

- [11] Белоусова И.М., Горшков Н.Г., Данилов О.Б., Залесский В.Ю., Ячнев И.Л. // ЖЭТФ. 1973. Т. 65. С. 517-524.
- [12] Кельцев Н.В. Основы адсорбционной техники. М.: Химия, 1984.

Поступило в Редакцию
15 сентября 1989 г.

Письма в ЖТФ, том 15, вып. 22
11; 12

26 ноября 1989 г.

ИНТЕРПРЕТАЦИЯ СТРУКТУРЫ АМОРФНОГО УГЛЕРОДА НА ОСНОВЕ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ОЖЕ-СПЕКТРОВ

Б.И. Резник, Ю.М. Ротнер,
В.И. Свиридов, В.Ш. Иванов

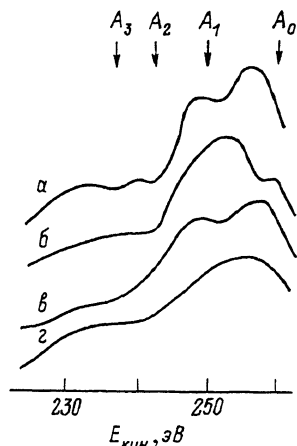
Уникальное сочетание высоких электрофизических и механических свойств материалов на основе аморфного углерода обуславливает в последнее время их широкое применение [1]. Эти свойства в значительной степени определяются типом ближнего порядка структуры аморфного углерода, которая в силу полиаморфизма определяется суперпозицией кластеров с различными типами ковалентной связи углерода.

В работе [2] было найдено, что осажденный при низкой температуре образец аморфной углеродной пленки содержит около 95% Sp^2 -связей. Такое же количество Sp^2 -связей содержится в стеклоуглероде [3]. Авторами [4] предложена модель аморфного углерода, содержащего 50% Sp^2 - и 50% Sp^3 -связей, в то время как авторы [5] предложили модель, где количество Sp^3 -связей равняется 91%. Отметим, что ранее авторами [6] было показано, что состав поверхности некоторых синтетических алмазных порошков может также соответствовать аморфному углероду.

Очевидно, что соотношение углеродных связей будет связано с конкретными условиями получения материалов на основе аморфного углерода. В этой связи актуальными являются исследования, направленные на разработку методов оценки соотношения вкладов различных типов углеродных кластеров в его структуру.

Для этой цели нами был использован метод электронной оже-спектроскопии, где усредненное энергетическое положение пиков специфично для данного элемента, а тонкая структура его связана с локальной плотностью состояний в валентной зоне, т.е. отражает химический состав исследуемого вещества [7]. Это позволяет оже-спектроскопией исследовать такие известные аллотропные соединения углерода, как алмаз и графит [7], используя для их иден-

Рис. 1. Фрагмент тонкой структуры $CKVV$ -пика природного алмаза (а), графита (б), частиц алмазного порошка размером 1 мкм (в) и 0.1 мкм (г).



тификации KVV -спектры углерода высокого разрешения. Поскольку энергетическое положение и тонкая структура KVV -спектров алмаза и графита (рис. 1) соответствует сигналам от Sp^3 - и Sp^2 -состояний углерода, то очевидно, что тот или иной тип ближнего порядка аморфного углерода будет определяться различным вкладом этих состояний в формирование тонкой структуры его оже-пика.

Как известно [8], существует два основных способа, с помощью которых можно попытаться расшифровать такие спектры, а именно способ обратной свертки и эмпирическая подгонка путем сопоставления с модельными спектрами. Метод обратной свертки, будучи более математически строгим, является в то же время более трудоемким. Требования, предъявляемые к методу эмпирической подгонки, просты — это значение начальной предположительной информации о спектре [8], т.е. о числе пиков и их параметрах. В нашем случае такой информацией являются спектры алмаза и графита, тонкая структура которых может быть использована в качестве спектров „отпечатков.“

Оже-спектры эталонов (монокристаллы алмаза и графита) и синтетических алмазных порошков получали в виде первой производной на спектрометре ЛАС-2000 с энергетическим разрешением анализатора $\leq 0.25\%$, пучком электронов с энергией 5 кэВ, током 100 нА. Для предотвращения искажения свойств анализируемой поверхности вследствие электронно-стимулированной десорбции спектры регистрировали с площади 200×200 мм² в режиме телевизионного стандарта.

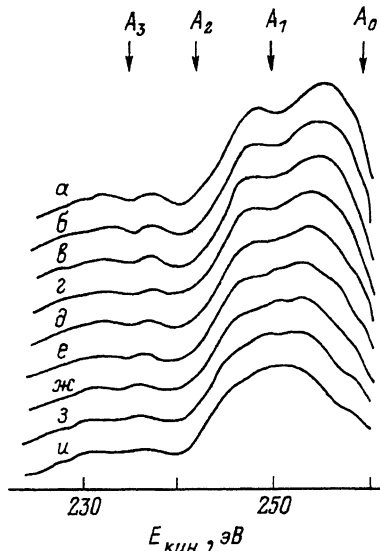
Модельные спектры с различным числом Sp^2 -, Sp^3 -связей строили с помощью ЭВМ „СМ-1800.03“ путем получения аддитивных смесей экспериментальных спектров алмаза и графита. Табулирование спектров проводилось по низкоэнергетическому плечу (по положительной части) $CKVV$ -пика с шагом разбиения 1 эВ. За точку сшивки экспериментальных спектров была принята точка A_2 — особенность, характерная как для алмаза, так и для графита [7]. Смешивание спектров осуществлялось по следующей формуле:

$$X = A \cdot P + B(1 - P),$$

где P — коэффициент, учитывающий вклад спектра A ($0 \leq P \leq 1$). Полученный набор модельных спектров X (рис. 2) сравнивался

Рис. 2. Модельные $CKVV$ -спектры, соответствующие различным соотношениям (Sp^2 / Sp^3) углеродных связей:

а) 10:90, б) 20:80, в) 30:70, г) 40:60, д) 50:50, е) 60:40, ж) 70:30, з) 80:20, и) 90:10.



с экспериментальными спектрами (рис. 1, в, г) с помощью критерия согласия χ^2 Пирсона. Сопоставление рассчитанных спектров с экспериментальными позволяет оценить, что поверхностный слой микронных частиц соответствует образованию смешанных углеродных фаз, содержащих около 40% Sp^2 - и 60% Sp^3 -связей соответственно.

Поверхностный слой субмикронных частиц содержит порядка 90% Sp^2 -связей.

Несмотря на неплохое согласие рассчитанных спектров с экспериментальными, следует отметить, что в спектрах „в, г“ (рис. 1), плечо в районе 240 эВ менее крутое, чем в спектрах, соответствующих 40% и 90% концентрации тригональных связей (рис. 2). Подобное изменение тонкой структуры $CKVV$ -пика обусловлено, по-видимому, активной хемосорбцией водорода, приводящей к восстановлению поверхностных атомов с Sp^3 -гибридизацией [2]. Эти положения проверяются.

Таким образом, расчет относительного вклада тригональных и тетрагональных углеродных связей в тонкую структуру модельного $CKVV$ -спектра позволяет на примере исследования поверхности синтетических алмазных порошков идентифицировать тип ближнего порядка структуры аморфного углерода, а в дальнейшем, возможно, и оценить изменение локальной плотности состояний вблизи излучающего атома углерода.

С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] S a v v i d e s N. // J. Appl. Phys. 1985. V. 58. P. 518-520.
- [2] F i n k J., M u l l e r - H e i n z e r l i n g T., P f l u g e r J. // Solid State Commun. 1983. V. 47. P. 687-691.
- [3] M i l d n e r D.F.R., C a r p e n t e r J.M. // J. Non-Cryst. Solids. 1982. V. 47. P. 391-398.

- [4] K a k i n o k i J., K a t a d a K., H a - n a w a T. et al. // Acta Crystallogr. 1960. V. 13. P. 171-176.
- [5] B e e m a n D., S i l v e r m a n J., L y n d s R. et al. // Phys. Rev. 1984. V. B30. P. 870-876.
- [6] Р е з н и к Б.И., С у р а н о в А.В., Р о т н е р Ю.М. // ЖТФ. 1989. Т. 59. В. 1. С. 191-194.
- [7] P a t e B. // Surf. Sci. 1986. V. 165. P. 83-142.
- [8] Анализ поверхности методами оже- и рентгеновской спектроскопии. / Под ред. Д. Бриггса, М.П. Сиха. М.: Мир. 1987. 600 с.

Поступило в Редакцию
6 июня 1989 г.

Письма в ЖТФ, том 15, вып. 22

26 ноября 1989 г.

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИЗУЧЕНИЕ ВОЛН РАЗГРУЗКИ В НЕПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛАХ

В.Ф. Л е м б е р г, С.Г. П с а х ь е,
В.Е. П а н и н

Псевдопотенциальные расчеты уравнения состояния в последнее время нередко применяются для построения ударных адиабат различных металлов [1-3]. Однако данный подход может быть использован и при решении ряда других традиционных задач физики ударных волн.

Целью настоящей работы является исследование поведения непереходных металлов при разгрузке после ударно-волнового нагружения. Используемая при расчетах методика ранее успешно применялась при изучении различных термодинамических свойств [4], фазовых равновесий [5] и ударных адиабат [6] рассматриваемых металлов и их сплавов. Вычисления проведены с использованием модельного локального псевдопотенциала Краско-Гурского [7] и самосогласованной модели эйнштейновских осцилляторов [4]. При расчетах учтены также вклады, связанные с остов-остовными взаимодействиями и с тепловым возбуждением электронного газа.

На рис. 1 в качестве примера изображены результаты расчета энтропии разгрузки натрия, предварительно деформированного ударно-волновым нагружением до степени сжатия $\gamma = \frac{V}{V_0} = 0.6$.

В работе [8] на основании полуэмпирического определения коэффициента Грюнайзена как функции γ были рассчитаны конечные значения (т.е. при нулевом давлении) термодинамических величин