

PACS numbers: 61.05.jm, 63.22.-m, 68.37.Og, 71.20.Tx, 73.61.Wр, 78.30.Na, 81.05.uj

ГЦК-наноуглерод: експеримент и теория

Н. Ф. Савченко, М. Б. Гусева, В. В. Хвостов, Ю. А. Коробов,
В. Г. Бабаев

*Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова,
Воробьевы горы,
Москва, Россия*

На основе результатов экспериментальных исследований атомной и электронной структур и электрофизических свойств монофазных пленок ГЦК-углерода, впервые полученных авторами, в сочетании с данными теоретических исследований модифицированным методом ЛКАО и в приближении Мотта–Хаббарда доказано, что ГЦК-углерод действительно имеет чисто гранецентрированную кубическую структуру и является четвертой аллотропной формой углерода, в которой связи между атомами углерода образуются негибризованными электронными орбиталями.

На основі результатів експериментальних досліджень атомової й електронної структур та електрофізичних властивостей монофазних плівок ГЦК-вуглецю, вперше одержаних авторами, у поєднанні з даними теоретичних досліджень модифікованою методою ЛКАО і у наближенні Мотта–Хаббарда доведено, що ГЦК-вуглець дійсно має чисто гранецентровану кубічну структуру і є четвертою алотропною формою вуглецю, у якій зв'язки між атомами вуглецю утворюються негібризованими електронними орбіталями.

It is proven that f.c.c. carbon really has purely face-centred cubic structure and is the fourth allotropic form of carbon, in which bonds between the carbon atoms are formed by non-hybridized electron orbitals. Results of experimental investigations of the atomic and electronic structures and the electrophysical properties of monophase films of f.c.c. carbon, which are first obtained by authors, in combination with the data of theoretical studies by the modified LCAO method and within the Mott–Hubbard approximation are used for that purpose.

Ключевые слова: ГЦК-углерод, алмаз, атомная и электронная структура, электронная спектроскопия, электронная дифракция.

(Получено 15 апреля 2010 г.)

1. ВВЕДЕНИЕ

Впервые ГЦК-нанофаза углерода была обнаружена в 1983 году в аморфных углеродных пленках, полученных методом ионно-стимулированной конденсации углерода при энергии ионов аргона 40 эВ [1]. После отжига при температуре $T = 350^\circ\text{C}$ в изначально бесструктурной матрице появились нанокристаллические включения размером около 10 нм, соответствующие плотноупакованной границентрированной кубической (ГЦК) решетке с параметром $a = 0,356$ нм, близким к алмазной — 0,3567 нм. За последние 25 лет ГЦК-нанофаза углерода была получена в научных лабораториях разных стран мира самыми различными методами [2]: преобразованием графита под высокими давлениями и при высоких температурах [3, 4], химической обработкой в водородной плазме с использованием различных углеводородов в смеси с аргоном, водородом и кислородом [5], плазмохимическим синтезом [6], травлением алмазных пленок в атмосфере атомарного водорода [7].

В этих работах методами электронной микроскопии и рентгеновских дифракционных исследований получали такого же типа дифракции, а именно, с запрещенными для алмаза рефлексами [8]. А поскольку дифракционные данные показывали постоянную решетки, близкую алмазной, эту углеродную модификацию продолжали называть «*n*-алмаз», «*x*-алмаз» или «*i*-алмаз» [9, 10].

До сегодняшнего дня вопрос о существовании ГЦК-фазы углерода остается открытым и обсуждается в литературе. Так, например, есть критика теоретиков [11, 12], которые, исходя из первых принципов, изучали стабильность ГЦК-фазы углерода и показали, что период решетки должен быть $a = 0,308$ нм — меньше экспериментально наблюдаемого $a = 0,356$ нм. В то же время в работе [13] из первых принципов были рассчитаны спектры плазмонных потерь ГЦК-углерода, показавшие хорошее соответствие с экспериментальными результатами.

Следует заметить, что все методы аттестации и характеристики получаемых пленок основывались только на дифракционных данных, на анализе атомной структуры. В этой связи представляло интерес получение дополнительной информации об электронной структуре.

2. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЯ

В [14] углеродные пленки с дифракционной картиной ГЦК-углерода подвергались разносторонним исследованиям. Методами электронной микроскопии высокого разрешения, электронной спектроскопии (Оже, ЭСХА, СХПЭ, РФС), ИК Фурье-спектроскопии, показано, что как атомная, так и электронная структура этой фазы существенно отличаются от алмазной.

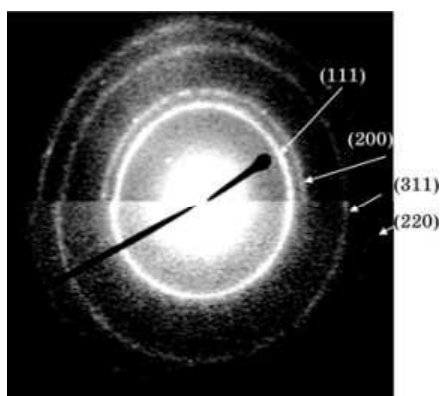


Рис. 1. Картины электронной дифракции ГЦК-углерода (вверху) и алмаза (внизу).

ГЦК-наночастица углерода формировалась различными методами: в условиях травления поверхности алмазной пленки, полученной методом химического осаждения (CVD), в водородной плазме [6] и плазмохимическим (CVD) синтезом в атмосфере водорода и метана [14].

2.1. Картина электронной дифракции алмаза и ГЦК-углерода

Картина электронной дифракции ГЦК-углерода приведена на рис. 1. Можно заметить, что рефлексы, запрещенные для алмаза, — 200, 222, 420, — имеют в данном случае большую интенсивность. Положение рефлексов в точности соответствует ГЦК-решетке. Постоянная решетки, рассчитанная по этим данным, равна 0,356 нм и совпадает с периодом ячейки алмаза.

2.2. Атомная структура ГЦК-углерода

Электронная микроскопия с атомным разрешением (HRTEM) доказывает расположение атомов углерода в ГЦК, отвечающее кристаллической структуре с расстоянием между атомами, равным 0,25 нм (в алмазе оно равно 0,154 нм).

На рисунке 2 представлена фотография ГЦК-пленки в электронном микроскопе высокого разрешения. Выделен квадрат с одним атомом в центре, характерный для ГЦК-решетки. Длина стороны квадрата равна $0,36 \pm 0,02$ нм. Это совпадает с параметром решетки, полученным из дифракционных данных. Проекция атомов на плоскость (100) ГЦК-углерода и алмаза изображена внизу на рис. 2. У алмаза также можно выделить аналогичный наблюдаемому на данной картинке квадрат, но с размером 0,252 нм. Таким образом,

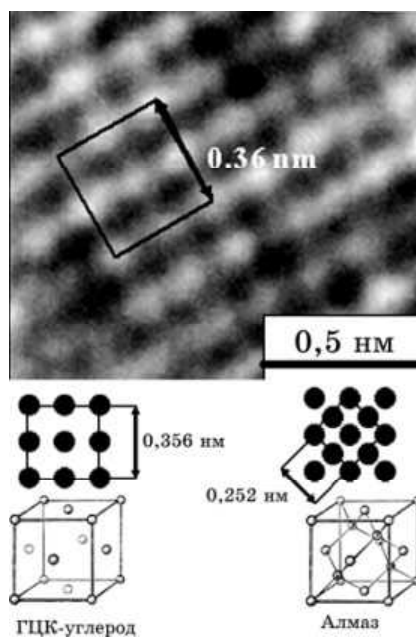


Рис. 2. Атомная структура ГЦК-углерода.

микроскопия с атомным разрешением доказывает ГЦК-структуру исследуемого образца.

2.3. Спектры характеристических потерь энергии электронов

Информацию о коллективных возбуждениях в твердом теле (плазмонах) можно получить из спектров характеристических потерь энергии электронов. В соответствии с формулой для частоты плазменных колебаний $\omega_p = \sqrt{\frac{4\pi e^2 n}{m}}$, для энергии плазменных колебаний справедливо соотношение

$$\frac{n_2}{n_1} = \left(\frac{E_2}{E_1} \right)^2, \quad (1)$$

где $n_{1,2}$ — плотность валентных электронов этих веществ, а $E_{1,2} = \hbar \omega_p$ — энергия плазмонов. Из спектров потерь энергии 1s-фотоэлектронов графита, алмаза и ГЦК-углерода [14] следует, что у алмаза энергия плазмонов составляет 33–35 эВ, у графита — 27 эВ. Рассчитанные из этих значений плотность алмаза и графита в точности совпадают с табличными значениями 3,51 и 2,26 г/см³. В спектре потерь графита

наряду с вышеупомянутым максимумом плазмона наблюдается пик потерь с энергией 7 эВ. Этот пик связан с возбуждением только негибридизованных π -электронов. В спектре потерь ГЦК-углерода — только один максимум с энергией 23 эВ. Это указывает на отсутствие в ГЦК-углероде гибридных связей. Плотность ГЦК-углерода, определенная по энергии плазмона, оказывается равной 1,61 г/см (в 2,18 раза меньше, чем у алмаза), что в точности соответствует данным высокоразрешающей электронной микроскопии.

Теоретически функция потерь может быть представлена как $S(E) = \text{Im}(1/\varepsilon(E))$, где $\varepsilon = \varepsilon_1(E) + i\varepsilon_2(E)$ — диэлектрическая проницаемость вещества. Используя преобразование Крамерса–Кронига, можно вычислить энергетическую зависимость $\varepsilon_2(E)$, которая является комбинированной плотностью состояний (сверткой валентной зоны с зоной проводимости).

На рисунке 3 приведены реальная (пунктир) и мнимая (сплошная линия) части диэлектрической функции алмаза и ГЦК-углерода. Ширина запрещенной зоны (область энергий, где $\varepsilon_2(E) = 0$ и максимум $\varepsilon_1(E)$), определенная из этих данных, для алмаза оказалась

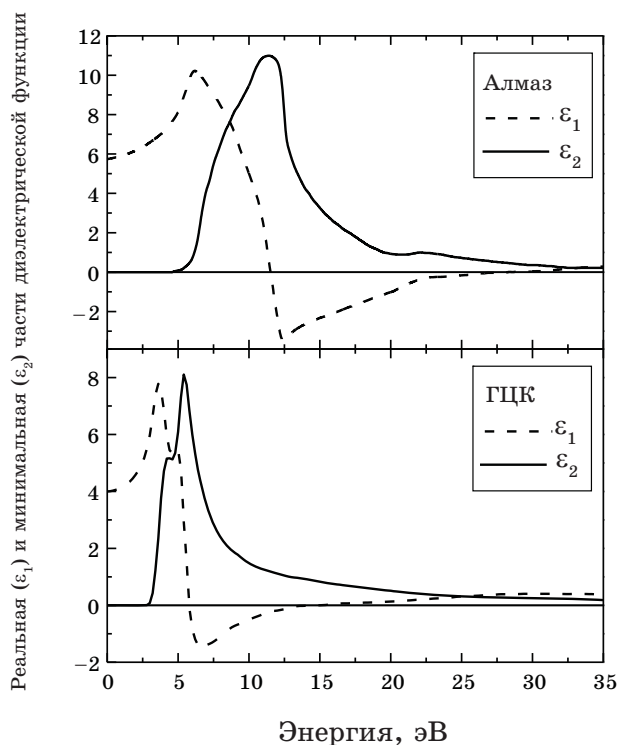


Рис. 3. Реальная (пунктир) и мнимая (сплошная линия) части диэлектрической функции алмаза и ГЦК-углерода.

равной 5,5 эВ, что хорошо соответствует результатам оптических измерений. Ширина запрещенной зоны ГЦК-углерода оказалась равной 3,5 эВ.

3. ИЗУЧЕНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ ГЦК-УГЛЕРОДА (ТЕОРИЯ)

Все известные расчеты электронной структуры ГЦК-углерода как из первых принципов [11–12, 15–16], так и методом ЛКАО, приводят к выводу о том, что ГЦК-углерод — типичный металл с наполовину заполненной валентной зоной и с электронной структурой, аналогичной свинцу. Однако нами было экспериментально установлено, что углерод — диэлектрик [14]. Кроме того, теоретические значения параметра решетки ГЦК-углерода, полученные методом самосоглазованного расчета из первых принципов ($a = 0,309$ нм), значительно отличаются от экспериментального ($a = 0,356$ нм) [11–12, 15].

3.1. Электронная структура и стабильность ГЦК-углерода

Появление запрещенной зоны в системах с наполовину заполненной зоной может быть связано с переходом металл–диэлектрик по модели Пайерлса (структурной) или Мотта–Хаббарда (за счет кулоновских корреляций). Структурный переход по Пайерлсу реализуется только в одномерных системах, например, в углеродной цепочке (кумулян–полиин). Поэтому нами был проведен расчет электронной структуры в рамках модели Мотта–Хаббарда. Слишком малая постоянная решетки ГЦК-углерода, полученная в расчетах из первых принципов, свидетельствует о недооценке энергии отталкивания атомов в этом методе, который учитывает лишь энергию отталкивания электронов валентной зоны с коровскими электронами, описываемой псевдопотенциалом. На самом деле необходимо еще учитывать и энергию отталкивания коровских оболочек атомов, которая в данном случае лучше всего описывается потенциалом Борна–Майера. Правомочность такого подхода обосновывается тем, что, как показали наши исследования, учет энергии отталкивания коровских оболочек атомов посредством потенциала Борна–Майера дает правильное значение параметра решетки одновременно для алмаза, графита, карбина и ГЦК-углерода при одних и тех же параметрах A и b потенциала Борна–Майера.

Итак, нами была предпринята попытка расчета полной энергии ГЦК-углерода, где потенциал отталкивания брался в виде парного потенциала отталкивания Борна–Майера, а электронная структура описывалась методом ЛКАО. Затем для объяснения возникновения запрещенной зоны в валентной зоне ГЦК-фазы рассчитывалась

плотность электронных состояний с учетом кулоновской корреляции по модели Хаббарда [17].

Вначале производился расчет электронной структуры алмаза как функции межатомного расстояния R . Для этого использовался метод ЛКАО [18]. Для описания энергии отталкивания, обусловленной взаимодействием коровских электронов, нами использовался потенциал Борна–Майера

$$E_{BM} = A \exp(-R / b), \quad (2)$$

где A и b — константы Борна–Майера.

Воспользовавшись плотностью электронных состояний $\rho(E)$, вычисленной методом ЛКАО, рассчитывалась полная одноэлектронная энергия

$$E_{el} = \int E \rho(E) dE / \int \rho(E) dE. \quad (3)$$

Тогда полная энергия, приходящаяся на один атом, есть сумма

$$E_{tot} = Z E_{el} + N E_{BM} / 2, \quad (4)$$

где Z — число валентных электронов в расчете на один атом; N — координационное число, равное 12 для ГЦК-решетки и 4 для алмаза.

Минимизируя полную энергию (4) как функцию межатомного расстояния R , получаем равновесное расстояние между атомами углерода R .

В точке минимума E можно вычислить модуль всестороннего сжатия

$$K = V \left(\frac{d^2 E}{dV^2} \right) n_{яч} 160,2 \text{ [ГПа]}, \quad (5)$$

где $n_{яч}$ — число атомов в элементарной ячейке; E — полная энергия на атом [эВ]; V — объем элементарной ячейки [\AA^3]. Далее определялась жесткость связей, которая необходима для расчета фононного спектра ГЦК-углерода:

$$\mu = \sqrt{\frac{d^2 E / dR^2}{n_{св}}}, \quad (6)$$

где $n_{св}$ — число связей, приходящихся на один атом. Зная μ , можно вычислить частоту фундаментальных колебаний решетки в гармоническом приближении

$$\omega_0 = 530,52 \sqrt{\frac{\mu}{M}} \text{ [см}^{-1}\text{]}, \quad (7)$$

где M — масса атома углерода.

Константы Борна–Майера определялись по равновесному меж-
атомному расстоянию в алмазе $R = 1,54 \text{ \AA}$ и по частоте оптически
активной моды продольных колебаний LO алмаза

$$\nu = \sqrt{\frac{8}{3}} \omega_0, \quad (8)$$

вычисленной в гармоническом приближении с учетом взаимодейст-

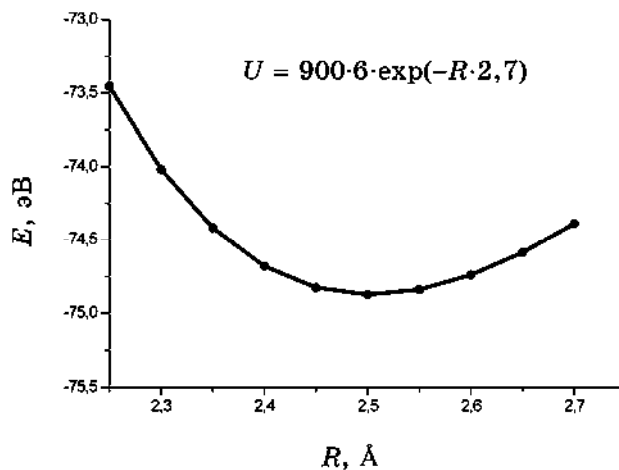


Рис. 4. Зависимость полной энергии связи атома E от межатомного расстояния R .

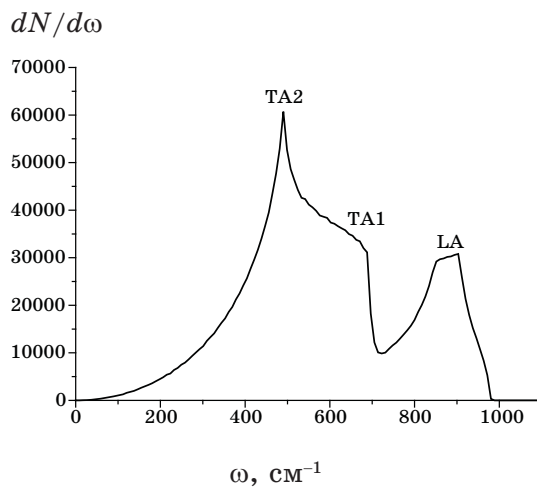


Рис. 5. Спектр фононов ГЦК-углерода.

вия только ближайших соседей [19]. Они оказались равными соответственно $A = 900$ эВ и $b = 0,37$ Å. Вычисление модуля всестороннего сжатия K (6) кристаллической решетки алмаза дает величину $K = 438$ ГПа, что близко к экспериментальному значению 444 ГПа для монокристалла алмаза.

Для проверки правомерности такого подхода эти константы были применены к расчету параметров других модификаций углерода: алмаза, графита, карбина и показали точное соответствие экспериментальным данным.

На рисунке 4 представлена зависимость полной энергии связи E атома в ГЦК-углероде от межатомного расстояния R в кристаллической решетке, рассчитанная методом ЛКАО с учетом энергии отталкивания для найденных констант Борна–Майера $A = 900$ эВ и $b = 0,37$ Å. Как видно из рисунка, равновесное расстояние равно $R = 2,5$ Å, что в точности соответствует эксперименту. Величина модуля всестороннего сжатия K для ГЦК-фазы получается равной $K = 294$ ГПа, которая близка к величине $K = 233$ ГПа, рассчитанной из первых принципов в [15].

Расчетный спектр частот колебаний ГЦК-фазы, вычисленный в гармоническом приближении, состоит из двух поперечных (TA) и одной продольной (LA) акустических ветвей, частотные зависимости которых от волнового вектора зависят как от направления в пространстве, так и от модуля волнового вектора. Соответствующая им плотность фононных состояний ГЦК-углерода представлена на рис. 5. Как видно из рисунка, частоты колебаний ГЦК сильно сдвинуты относительно КР активной линии алмаза (1332 см⁻¹) и графита (1580 см⁻¹) в сторону низких частот, что делает возможным их наблюдение в ИК и КР отдельно от линий алмаза. В ГЦК-решетке существуют лишь три акустические моды (одна LA и две — $TA1$ и $TA2$), которые оптически не активны из-за несохранения импульса при взаимодействии со световой волной. Оптически активной выбиралась мода, состоящая из линейной комбинации двух продольных акустических волн со взаимно противоположными импульсами, типа стоячей волны, для которой правило отбора по импульсу выполняется, и которые образуются в наночастицах из-за отражений акустической волны от границ. Поперечные же моды TA оптически неактивны в силу правил отбора и, следовательно, их можно не учитывать. Из рисунка 5 видно, что максимум LA наблюдается при 850 см⁻¹, что хорошо соответствует экспериментально наблюдаемому максимуму в КР-спектре углеродной пленки, содержащей ГЦК-фазу (рис. 6).

3.2. Расчет плотности электронных состояний. Модель Хаббарда

В представлении вторичного квантования гамильтониан Хаббарда

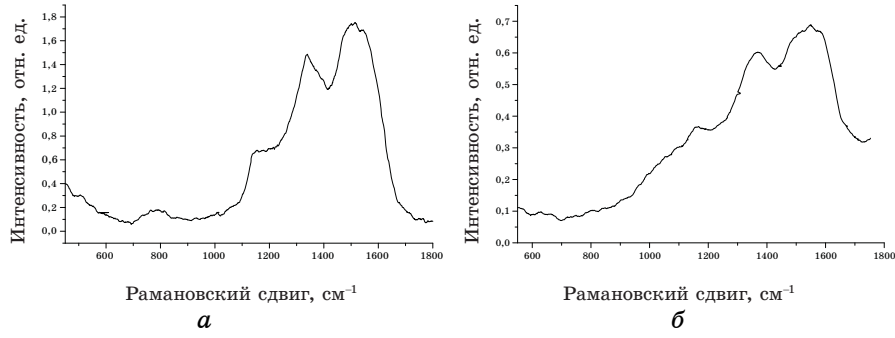


Рис. 6. КР-спектры углеродных пленок: *a* — содержащей ГЦК-фазу, *б* — не содержащей ГЦК-фазу.

выражается следующим образом [17]:

$$H = \sum_{ij\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma} + \sum_i U n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}, \quad (9)$$

где $c_{i\sigma}^+$, $c_{i\sigma}$ операторы рождения и уничтожения электрона на i -м узле со спином σ , $n_{\sigma} = c_{i\sigma}^+ c_{i\sigma}$ оператор числа частиц на i -м узле t_{ij} — матричные элементы ЛКАО; U — потенциал кулоновского отталкивания электронов на одном атоме.

Первое слагаемое фактически описывает зонную структуру в приближении ЛКАО, а второе — кулоновское отталкивание двух электронов на одном узле. Диагонализируя матрицу t_{ij} , получим собственные значения энергии электронов валентной зоны по методу ЛКАО ε_k , что позволяет найти плотность электронных состояний в валентной зоне по методу ЛКАО.

Далее, используя приближенное решение модели Хаббард-1, можно рассчитать плотности состояний с учетом второго слагаемого гамильтониана (9):

$$\rho(\omega) = -\sum_k \text{Im} G(k, \omega), \quad (10)$$

где ω — энергия, отсчитываемая от уровня Ферми μ , а мнимая часть функции Грина $G(k, \omega)$ равна

$$\text{Im} G(k, \omega) = \pi P_{1\sigma}(k) \delta(\omega - E_{1\sigma}(k) + \mu) + \pi P_{2\sigma}(k) \delta(\omega - E_{2\sigma}(k) + \mu), \quad (11)$$

где

$$E_{1,2\sigma}(k) = \frac{1}{2} \left(\varepsilon_k + U \pm \sqrt{\varepsilon_k^2 - 2\varepsilon_k U (1 - 2n_{-\sigma}) + U^2} \right) \quad (12)$$

— перенормированное значение энергий электронов в валентной

зоне, а

$$P_{1,2\sigma} = \frac{1}{2} \left(1 \pm \frac{\varepsilon_k - U(1 - 2n_{-\sigma})}{\sqrt{\varepsilon_k^2 - 2\varepsilon_k U(1 - 2n_{-\sigma}) + U^2}} \right) \quad (13)$$

— амплитуда соответствующих электронных состояний; ε_k — собственные значения энергии по методу ЛКАО.

Выражения (9)–(13) дают плотность электронных состояний $\rho(\omega)$ с учетом кулоновских корреляций, которая расщепляется на две подзоны в соответствии с двумя знаками в формулах.

На рисунке 7 представлены расчетные плотности электронных состояний $\rho(\omega) = dN(E)/dE$ ГЦК-углерода без учета (а) и с учетом (б) кулоновской корреляции. Плотность электронных состояний ГЦК-углерода, вычисленная методом ЛКАО (рис. 7, а), весьма близка к плотности состояний, вычисленной из первых принципов [16] и хорошо соответствует экспериментальной [14]. Согласно расчетам, пик в плотности состояний при $E = -21$ эВ соответствует s -зоне, а пики в районе -15 и -10 эВ соответствуют p -зоне. Эти данные хорошо соответствуют расчетам из первых принципов. Уровень Ферми E_f располагается в валентной зоне, что свидетельствует о металлической проводимости.

В рассчитанной плотности электронных состояний ГЦК-фазы наблюдаются три пика при $E = -7,5$ эВ, $E = -13$ эВ, $E = -27$ эВ. Край заполненной зоны соответствует положению уровня Ферми $E_f = -6,3$ эВ. Рассчитанная с учетом кулоновской корреляции плотность электронных состояний демонстрирует появление запрещенной зоны (рис. 7, б). При этом потолок заполненной зоны оказывается вблизи уровня Ферми металлической ГЦК-фазы и потолка валент-

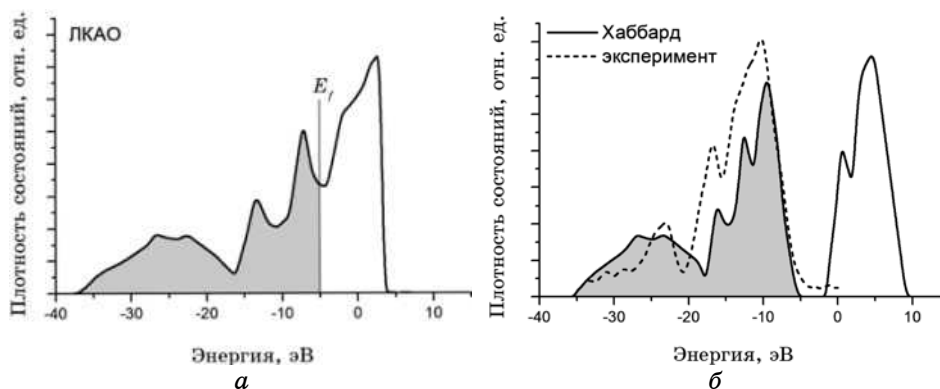


Рис. 7. Плотности электронных состояний ГЦК-углерода, рассчитанные без учета (а) и с учетом (б) кулоновской корреляции.

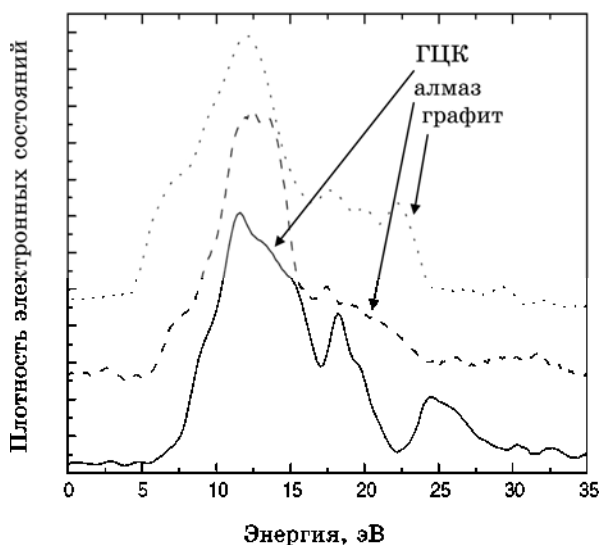


Рис. 8. Распределение плотности электронных состояний (эксперимент).

ной зоны алмаза, а энергия сродства $\chi = E_c$ около 2 эВ.

На рисунке 8 приведены Оже-электронные спектры графита, алмаза и ГЦК-углерода. Оже-линия углерода является самосверткой плотности электронных состояний в валентной зоне. Высокоэнергетический край ГЦК-спектра углерода смещен в сторону низких энергий по сравнению с графитом на 7 эВ и только на 1 эВ отличается от спектра алмаза. Это означает, что потолок валентной зоны ГЦК-углерода находится при больших энергиях связи (по крайней мере, на 3,5 эВ выше по сравнению с графитом). Это косвенно указывает на наличие в ГЦК-фазе запрещенной зоны, подобной алмазу. Структуру валентной зоны и тип связи в решетке можно определить из Оже-линии углерода, используя процедуру обращения самосвертки.

Характерной особенностью валентной зоны ГЦК-фазы является наличие пика плотности состояний при энергиях 25–30 эВ, соответствующих *s*-состояниям, что свидетельствует о слабой гибридизации атомных орбиталей в ней. Потолок валентной зоны ГЦК-углерода расположен при той же энергии, что и в алмазе, однако следует отметить более высокую плотность состояний на краю валентной зоны у ГЦК-углерода. Отличительной особенностью валентной зоны ГЦК-углерода является наличие абсолютного максимума плотности состояний при энергии 17,5 эВ, соответствующего *p*-состояниям.

4. ГЕТЕРОСТРУКТУРА АЛМАЗ–ГЦК-УГЛЕРОД

Методом CVD и последующим ионным облучением (Ar^+) на поверх-

ности p -Si получена алмазная пленка с ГЦК-углеродом в приповерхностном слое, обладающая электронной проводимостью.

На рисунке 9, *а* представлена схема измерения термоэдс. Измерение знака термоэдс двухконтактным методом показало, что пленка алмаза обладает n -типом проводимости. Величина термоэдс, измеренная при $T_1 - T_2 = 50^\circ\text{C}$, оказалась равной 1 мВ. При освещении гетероперехода светом вольфрамовой лампочки с плотностью светового потока $0,3 \text{ лм/см}^2$ наблюдалась фотоэдс. Максимальное значение фотоэдс составило $-0,35 \text{ В}$, причем знак фотоэдс соответствовал p - n переходу p -Si/ n -алмаз.

На рисунке 9, *б* представлены вольт-амперные характеристики полученного гетероперехода при освещении светом и в темноте. ВАХ гетероперехода при освещении светом сдвигался по шкале приложенного напряжения на величину фотоэдс.

В рамках одноэлектронного приближения ЛКАО с потенциалом отталкивания, удалось получить положение границ запрещенной зоны в ГЦК-фазе при учете кулоновской корреляции. Это позволи-

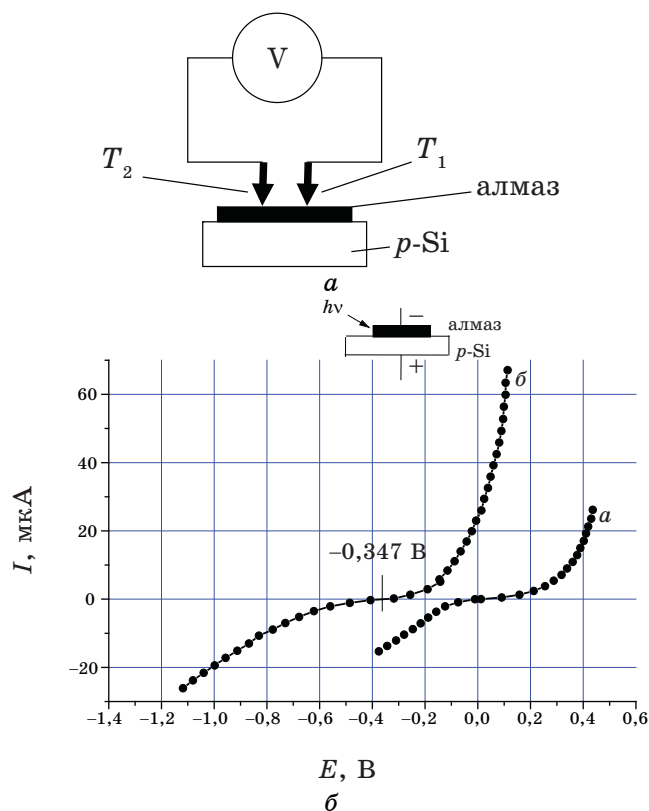


Рис. 9. Схема измерения термоэдс (*а*) и фотоэдс (*б*).

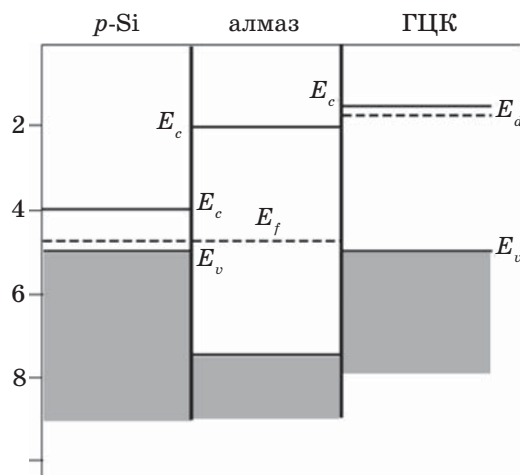


Рис. 10. Энергетические диаграммы *p*-Si, алмаза и ГЦК-углерода.

ло построить энергетическую диаграмму для *p*-Si, алмаза и ГЦК-фазы (рис. 10).

Положения уровня Ферми алмаза и *p*-Si примерно совпадают (рис. 10), в результате гетероконтакт алмаз-кремний не образуется. Соответственно, равна нулю и фотоэдс. Как показали расчеты в ГЦК-углероде с моттовской щелью, дно зоны проводимости и локализованные состояния, обуславливающие электронную проводимость, находятся выше дна зоны проводимости алмаза. Благодаря этому электроны из ГЦК-углерода инжектируются в зону проводимости алмаза, что ведет к смещению уровня Ферми в сторону зоны проводимости. В результате получается алмаз *n*-типа и, как следствие, гетеропереход *p*-Si/*n*-алмаз. В возникающем на границе гетеропереходе электрическом поле происходит разделение фотоэлектронов и дырок, дающих фотоэдс.

Наличие обратного тока в ВАХ гетероперехода, с другой стороны, свидетельствует о туннелировании электронов сквозь барьер из валентной зоны Si в зону проводимости *n*-алмаза при приложении обратного потенциала, что обеспечивает обратный (дырочный) ток гетероперехода.

Малая работа выхода ГЦК-фазы может обеспечивать не только инжекцию электронов в алмаз, но и холодную эмиссию в вакуум, что представляет большой практический интерес для вакуумной эмиссионной электроники.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе представлены данные о ГЦК-углероде, свидетельствующие

о том, что это — аллотропная форма, отличная от ранее известных форм углерода своей кристаллической решеткой, электронной структурой, типом гибридизации и электрофизическими свойствами. Несмотря на близость параметров ГЦК-углерода и алмаза, электронная структура и колебательные спектры их совершенно различны, что позволяет их надежно различать. Более того, даже присутствие ГЦК в алмазе менее 1% резко изменяет его электрофизические свойства: алмаз из диэлектрика превращается в полупроводник n -типа, который, будучи нанесен на поверхность p -Si, образует гетеропереход с фотоэдс 0,35 В.

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. Л. С. Палатник, М. Б. Гусева, В. Г. Бабаев, Н. Ф. Савченко, И. И. Фалько, *ЖЭТФ*, **87**, вып. 3(9): 914 (1984).
2. B. Wen, J. J. Zhao, and T. J. Li, *International Materials Reviews*, **52**, No. 3: 131 (2007).
3. H. Hirai and K. Kondo, *Science*, **253**: 772 (1991).
4. S. Endo, N. Idani, R. Oshima, K. Takano, and M. Wakatsuki, *Phys. Rev. B*, **49**: 22 (1994).
5. S. Jarkov, Y. Titarenko, and G. Churilov, *Carbon*, **36**: 595 (1998).
6. M. Frenklach, R. Kematich, W. Howard, and K. Spear, *J. Appl. Phys.*, **66**: 395 (1989).
7. I. Konyashin, A. Zern, J. Mayer, F. Aldinger, V. Babaev, V. Khvostov, and M. Guseva, *Diamond Relat. Mater.*, **10**: 99 (2001).
8. B. Wen, T. Li, Ch. Dong, X. Zhang, Sh. Yao et al., *J. Phys.: Condens. Matter*, **16**: 2991 (2004).
9. J. Hodeau, J. Tonnerre, B. Bouchet-Fabre, M. Regueiro, J. Capponi, and M. Perroux, *Phys. Rev.*, **B50**: 10311 (1994).
10. M. Rossi, G. Vitali, M. L. Terranova, and V. Sessa, *Appl. Phys. Lett.*, **63**, No. 20: 2765 (1993).
11. C. J. Pickard, V. Milman, and B. Winkler, *Diamond Relat. Mater.*, **10**: 2225 (2001).
12. G. Murrrieta, A. Tapia, and R. de Coss, *Carbon*, **42**, No. 4: 771 (2004).
13. M. Dadsetani and A. Pourghazi, *Diamond Relat. Mater.*, **15**: 1695 (2006).
14. М. Б. Гусева, В. Г. Бабаев, И. Ю. Коляшин, Н. Ф. Савченко, В. В. Хвостов и др., *Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования*, № 3: 28 (2004).
15. C. Mailhot and A. K. McMaham, *Phys. Rev. B*, **44**: 11578 (1991).
16. A. Tapia, G. Ganto, G. Murrrieta et al., *Pis'ma v ZhETF*, **82**: 134 (2005).
17. Ю. А. Изюмов, *УФН*, **165**, № 4: 403 (1995).
18. У. Харрисон, *Электронная структура и свойства твердых тел* (Москва: Мир: 1983), т. 1.
19. А. Марадудин, Э. Монтролл, Дж. Вейсс, *Динамическая теория кристаллической решетки в гармоническом приближении* (Москва: Мир: 1965).