

ОДНОМЕРНО НЕУПОРЯДОЧЕННЫЕ СТРУКТУРЫ В КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ПЛЁНКАХ ФУЛЛЕРИТА

Солонин Ю.М., Грайворонская Е.А.

Институт проблем материаловедения НАН Украины,
ул. Кржижановского 3, Киев, 03142 Украина

Фуллерит, конденсированная кристаллическая фаза из связанных ван-дер-ваальсовыми силами молекул фуллерена, является новым и чрезвычайно интересным объектом для физики углеродных материалов.

Согласно существующим представлениям кристалл фуллерена (фуллерит) C_{60} при комнатной температуре и нормальном давлении имеет ГЦК решетку (пространственная группа $Fm\bar{3}m$), каждому узлу которой соответствует одна молекула C_{60} , совершающая почти свободное вращение. Несмотря на отличие формы молекул от сфер (усечённые икосаэдры), вращение обеспечивает центрально-симметричный характер дисперсионного взаимодействия соседних молекул и их плотную упаковку [1].

Повышенный интерес к тонким плёнкам на основе фуллерита обусловлен их физическими и физико-химическими свойствами. Было установлено, что они имеют нелинейные оптические характеристики, являются перспективными материалами для преобразователей солнечной энергии, демонстрируют высокие трибологические параметры, могут использоваться для получения сверхтвёрдых покрытий и т.д. Это вызвало появление большого количества работ, посвященных исследованию кристаллической структуры, механизмов роста, а также поиску областей, где эти плёнки могут быть применены.

Тонкие плёнки фуллерита C_{60} характеризуются плотноупакованной ГЦК структурой с параметром 1,416 нм. По наблюдению многих авторов, плёнки C_{60} имеют различные структурные состояния, фазовые превращения. Однако, очень немного работ, как оказалось, посвящено детальному исследованию дефектов кристаллической структуры тонких плёнок фуллерита C_{60} .

Реальные плотноупакованные кристаллы с ГПУ и ГЦК структурами в ряде случаев содержат дефекты упаковки (ДУ), взаимное положение которых может быть не только хаотичным, но и упорядоченным, что приводит к образованию сверхрешёток ДУ. Интерес к изучению подобных структурных состояний определяется тем, что они могут формироваться в материалах обладающих

уникальными физическими свойствами [2]. Плёнки фуллерита C_{60} являются удачным объектом для изучения подобных структур.

В предыдущих исследованиях [3] было показано, что на большинстве электронно-микроскопических изображений плёнок C_{60} , полученных в режиме среднего разрешения, наблюдается характерный полосчатый контраст, который свидетельствует о наличии в структуре большого количества двумерных дефектов (рис.1). Детальный анализ картины электронной микродифракции подтвердил, что такой контраст связан с дефектами типа дефектов упаковки, двойниковых границ или частично разупорядоченных политипных фаз.

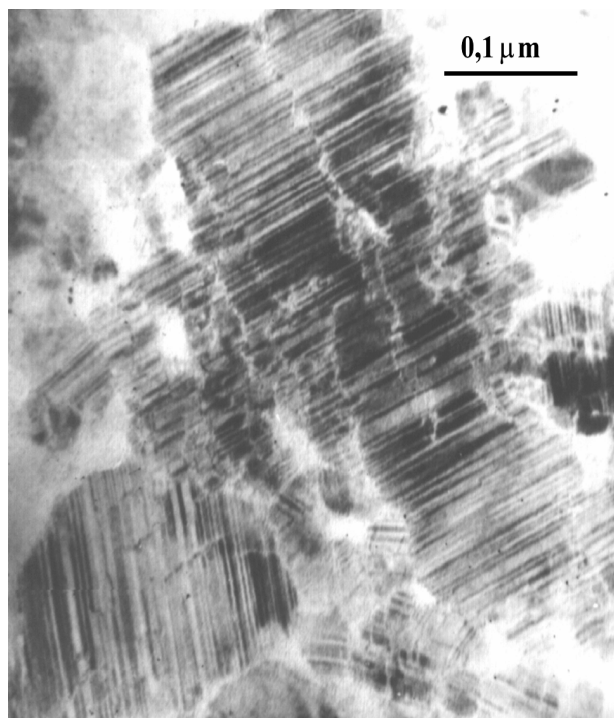


Рисунок 1. Полосчатый контраст ПЭМ изображений, который подтверждает, что плёнки фуллерита C_{60} содержат много плоских дефектов

В структуре плёнок фуллерита C_{60} существуют области, в которых рядом с двойниками и одиночными дефектами упаковки наблюдается политипная структура с упорядоченным расположением дефектов упаковки на плоскости типа (111). Для

детального анализа часть структуры с политипом приведена на рис.2.

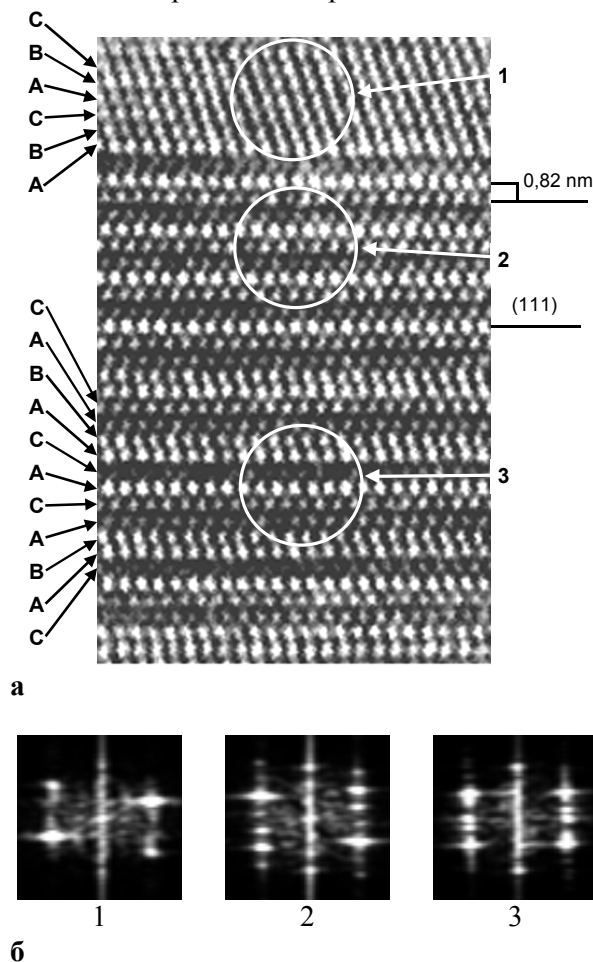


Рисунок 2. Структура плёнки C_{60} с политипом: **а** – микроскопическое изображение высокого разрешения, на котором присутствуют фрагменты ГЦК структуры (1), ГПУ структуры (2), а также политип САВСАСАВАС в плёнке фуллерита C_{60} (3); **б** – смоделированные дифракционные картины (Фурье образы) от областей 1-3.

Для обозначения чередования слоёв использована определённая последовательность букв АВСАВС и т.д., каждая из трёх букв соответствует одному из трёх возможных положений плоскости (111) в плотноупакованной структуре. В верхней части

изображения реализуется последовательность АВСАВСАВС..., что соответствует ГЦК структуре. Для нижней части этой области характерен порядок чередования слоёв САВАСАВАС..., что соответствует десятислойной политипной структуре. Анализируя картину, мы видим, что между областями ГЦК структуры и политипной структурой находится область ГПУ структуры.

Выводы

Для кристаллов фуллерита характерно сосуществование разных плотноупакованных структур. Оно объясняется слабыми ван-дер-ваальсовыми силами связи между молекулами фуллерита в твёрдой фазе. Известно, что при комнатной температуре, а также при более высоких температурах сферические молекулы фуллерена, сохраняя положение в определённых узлах кристаллической решётки, в то же время свободно вращаются вокруг своего центра. Для подобных молекулярных кристаллов должна быть характерна очень низкая энергия дефектов упаковки. Можно ожидать, что такие кристаллы будут легко двойниковаться, содержать значительное количество дефектов упаковки, двойниковых границ и других плоских дефектов. Очень велика вероятность образования в таких кристаллах различных политипных структур. Именно такие политипные состояния мы наблюдаем на изображениях, полученных при помощи электронной микроскопии высокого разрешения.

Литература

1. Нацик В.Д., Лубенец С.В., Фоменко Л.С. // Физика низких температур. – 1996. т.22. №3. – С. 337.
2. Олиховская Л.А., Рудь А.Д., Устинов А.И., Чуистов К.В. // Металлофизика. – 1986. т.10. №3. – С. 32-37.
3. Солонин Ю.М., Грайворонская Е.А., Галий О.З. // Порошковая металлургия. – 2001. т.91. № 11/12. –С. 91-99.