**Павлова Н.Ю.,**
Національний педагогічний університет ім. М.П.Драгоманова,
м. Київ
**Шевченко В.І., Картузов В.В.**
Інститут проблем матеріалознавства АН НАНУ,
м. Київ

**Фононний спектр алмазоподібної плівки на підкладці SiC**

Методом молекулярної динамики розраховано коливальні спектри алмазоподібної плівки, розміщеної на повехні (111) 3C-SiC. Спостерігається певна схожість щільності коливальних станів, розрахованих для поверхні алмазу та алмазоподібної плівки.

Oscillatory spectra of diamond-like film adsorbed on surface (111) of 3C-SiC were calculated by a method of molecular dynamics. A certain similarity in the density of oscillatory states designed for a free surface of diamond and diamond-like film on SiC surface is observed.

В роботі [1] експериментально та шляхом комп'ютерного моделювання досліджено процеси утворення різноманітних вуглецевих плівок на поверхні SiC. Моделювання плівок проводилось методом молекулярної динаміки з використанням потенціалів Терсофа для системи Si-C [2]. Автори роботи [1] вказали на можливість утворення на поверхні (111) SiC тонких алмазоподібних плівок. Було виконано структурні дослідження змодельованих алмазоподібних плівок. Однак співставлення непружного розсіювання електронів такими плівками виконано не було, оскільки фононні спектри цих об'єктів не досліджувались. Тому в даній роботі розраховано коливальні спектри алмазоподібних плівок, які покривають поверхню (111) SiC. В якості вхідної було вибрано атомну структуру, отриману в роботі [1].

Розрахунок коливальних спектрів в даній роботі базується на методі використаному в роботі [3]. В цьому методі спочатку розраховується швидкість-швидкісна автокореляційна функція (ШАКФ) для деякої групи атомів, потім виконується перетворення Фур'є знайденої функції. В порівнянні з стандартним методом, в якому знаходяться власні частоти відповідної динамічної матриці, метод, оснований на використанні автокореляційної функції, має ту перевагу, що дозволяє враховувати нелінійність міжатомної взаємодії.

Миттєві швидкості вибраної групи атомів, необхідні для обчислення відповідної ШАКФ, записуються (з малим часовим інтервалом між сусідніми записами) в достатній кількості в процесі проведення молекулярної динаміки. Температура моделювання, часовий інтервал між сусідніми записами швидкостей та загальна кількість таких записів є важливими параметрами, які визначають якість відповідної автокореляційної функції, а відтак і шуканого коливального спектра. Зауважимо, що описуваний метод дозволяє просто розраховувати локальні частотні характеристики системи, що коливається, і тому є зручним для розв'язуваної задачі.

ШАКФ $Z(t)$ розраховується за наступною формулою [3]

$$Z(t) = \sum_{\tau}^{\tau_m} \frac{\langle \vec{v}_n(t+\tau) \cdot v_n(\tau) \rangle}{\langle \vec{v}_n(t) \cdot v_n(\tau) \rangle},$$

де дужки вказують на усереднення по всіх атомах вибраної групи атомів. Для отримання спектру $Z(\omega)$, пов'язаного з вибраними атомами, проводиться перетворення Фур'є [4]

$$Z(\omega) = \int dt e^{i\omega t} Z(t) \cdot$$

Коливання досліджуваної системи моделювались методом молекулярної динаміки. Взаємодія між атомами описувалась відомими емпіричними потенціалами [2].

Попередні (оцінкові) розрахунки дозволили вибрати оптимальні параметри розрахунків, а саме, температура моделювання - 500°K, крок інтегрування рівнянь руху (молекулярна динаміка) – $10^{-17}$ сек, кількість послідовних записів швидкості атомів - 1000, часовий інтервал між сусідніми записами швидкостей – $10^{-16}$ сек, загальна кількість атомів - 1000.

З ціллю тестування вибраного методу було розраховано коливальний спектр алмазу. На рис. 1 зображено отримані ШАКФ та фононний спектр алмазу. Відхилення розрахованого спектру від експериментальних даних можна пояснити не достатньою точністю параметрів Терсофа.

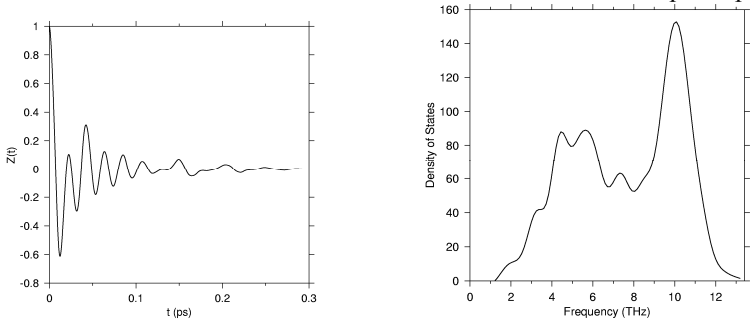


Рис. 1 ШСКФ $Z(t)$ та фононний спектр алмазного кластера.

Аналогічно розраховувались локальні щільності коливальних станів, які відповідають

- атомам, розміщеним на та поблизу вільної (релаксованої) поверхні (111) алмазу
- та атомам алмазоподібної плівки, адсорбованої на поверхні (111) 3C-SiC.

Отримані щільності фононних станів ілюструє рис. 2. Видно, що щільності коливальних станів, які відповідають алмазоподібній плівці на поверхні SiC, в загальних рисах подібні до щільностей фононних станів вільної поверхні алмазу. Це може служити додатковим свідченням на користь того, що отримані шляхом моделювання вуглецеві плівки дійсно являються алмазоподібними. Зсув вліво піків, які відповідають алмазоподібній плівці, відносно подібних піків, що відповідають поверхні алмазу, викликаний тим, що алмазоподібна плівка злегка розтягнута. Зміна форми та інтенсивності піків обумовлено впливом матеріалу підкладки (SiC) на коливальні властивості алмазоподібної плівки.

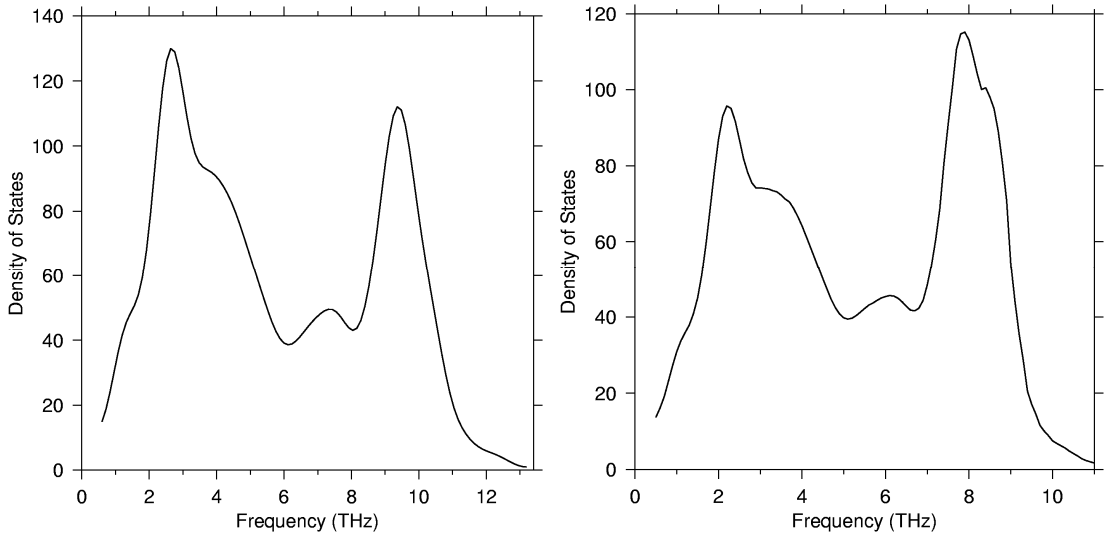


Рис. 2. Щільності фононних станів, які відповідають поверхні алмазу (зліва) та алмазоподібної плівки, адсорбованої на підкладці із SiC.

Звичайно, вичерпною відповіддю на питання, підняті в цій роботі, було б пряме експериментальне дослідження фононних спектрів вуглецевих плівок, адсорбованих на повехні SiC. Наприклад, дослідження □едружнього розсіювання електронів вуглецевими плівками на підкладці SiC. Поки що авторам, на жаль, не відомі такі дослідження коливальних станів вуглецевих плівок.

**Висновки**

Спостерігається певна схожість щільності станів, розрахованих для поверхні алмазу та алмазоподібної плівки, адсорбованої на (111) поверхні SiC, що є ще одним свідченням можливості отримання на поверхні карбіду кремнію алмазоподібної плівки.

*Література*

1. Nanostructured carbon coatings on silicon carbide: experimental and theoretical study /Y. Googotsi, V. Kamyshenko, V. Shevchenko et al. // Proceeding NATO ASI on "Functional Gradient Materials and Surface Layers Prepared by Fine Particle Technology" / Ed. by M. I. Baraton, I. Uvarova. - Dordrecht, NL: Kluwer, 2001. - Pp. 239-255.

2. Tersoff J. Modeling solid-state chemistry: Interatomic potentials for multicomponent systems // Phys. Rev. B. - 1989. - Vol. 39, no. 8. Pp. 5566-5568.

3. Kim E. and Lee Y. H. Structural, electronic, and vibrational properties of liquid and amorphous silicon: Tight-binding molecular-dymamics approach // Phys. Rev. B. - 1994. -.Vol. 49, no. 3. -. Pp. 1743 -1749.

4. Дженкинс Г., Ваттс Д. Спектральный анализ и его приложения. Выпуск 2. –Москва: Мир, 1972 – 287 с.

УДК:378.016:53

**Погорілко Т.М.**
Національний педагогічний університет імені М.П. Драгоманова,
м. Київ

**Розв’язування задач з фізики і моделювання професійної діяльності**

Дуже часто молодому спеціалісту важко влаштуватися на роботу, оскільки одразу після закінчення навчального закладу вчорашній студент не готовий до цілісної професійної діяльності. Він безперечно має