

**Теоретическое определение
диэлектрической проницаемости кубического углерода**

С.А. Неустроев¹, Н.С. Неустроев²

¹*Национальный исследовательский университет «МИЭТ»,
г. Москва, Россия*

²*НИИ материаловедения, г. Москва, Россия*

doloto@list.ru

Проблема использования алмаза в качестве диэлектрика в приборах микросхем состоит в недостаточной разрешающей способности оптических приборов контроля коэффициента преломления света и, соответственно, диэлектрической проницаемости ϵ . В работе проведено исследование фрагмента монокристаллического образца кубического углерода (разновидность алмаза) и определена его диэлектрическая проницаемость на уровне пространственной ячейки, которая представлена в гексагональной анаморфозе. Это гексагональная призма с базовыми плоскостями в виде гексагонов, в центре и углах которых располагаются атомы углерода. Значение ϵ определено по взаимодействию зарядов центральных атомов базовых плоскостей призмы и электронов связи. Это значение для данной связи вычислено с точностью до седьмого знака после запятой и может быть использовано в практических целях.

Ключевые слова: гексагональная призма кубического углерода; эллиптическая орбиталь; диэлектрическая проницаемость

Для цитирования: Неустроев С.А, Неустроев Н.С. Теоретическое определение диэлектрической проницаемости кубического углерода // Изв. вузов. Электроника. – 2018. – Т. 23. – № 5. – С. 439–445. DOI: 10.24151/1561-5405-2018-23-5-439-445

Theoretical Determination of *c*-C Dielectric Permeability

S.A. Neoustroev¹, N.S. Neoustroev²

¹*National Research University of Electronic Technology,
Moscow, Russia*

²*RIMST, Moscow, Russia*

doloto@list.ru

Abstract: The problem of using diamond as a dielectric in the devices of micro-circuits is an insufficient resolution of optical devices for controlling the light refraction coefficient, respectively, the dielectric permeability ϵ . In the work a fragment of a *c*-C monocrystal sample (a diamond variety) has been investigated. The dielectric permeability has been determined at the level of a spatial cell, which is presented in the hexagon anamorphous. This is a hexagonal prism with the base planes in the form of hexagons, in the center and in the angles of which the carbon atoms are arranged. The value ϵ has been determined by the interaction of charges of central atoms in the base planes of the prism and bond electrons. This value has been calculated with accuracy up to the 7-th symbol after decimal point and can be used for practical purposes.

Keywords: hexagonal prism *c*-C; elliptic orbital; dielectric permeability

For citation: Neoustroev S.A., Neoustroev N.S. Theoretical determination of *c*-C dielectric permeability. *Proc. Univ. Electronics*, 2018, vol. 23, no. 5, pp. 439–445. DOI: 10.24151/1561-5405-2018-23-5-439-445

Введение. Использование алмаза в качестве диэлектрика в твердотельной электронике перспективно как в выпускаемых приборах, так и в новых конструкциях, если удастся получать алмаз в виде тонких пленок и покрытий, а процесс их формирования не потребует создания экстремальных условий. В ряде публикаций сообщается о получении на различных поверхностях алмазных образований, формируемых в плазме газового разряда, содержащего атомы углерода. В частности, экспериментальные исследования по получению алмаза кубической модификации [1] выявили возможность его использования в «холодных» катодах с эмиссионной способностью до 100 А/см². Последующая отработка технологии завершилась выпуском реальных приборов [2].

Несмотря на очевидный успех проведенных ранее исследований, можно отметить недостаточность информации о структуре и связях, а также о взаимном влиянии зарядов атомов углерода и валентных электронов при наложении на образец внешнего поля в процессе образования алмаза. Влияние диэлектрической проницаемости ϵ проявляется в образовании связи в растущем элементе кристалла алмаза. В работе [3] приведено значение диэлектрической проницаемости $\epsilon = 5,6 \dots 5,8$ и оно сравнивается с квадратом показателя преломления света $n^2 = 5,76$ ($n = 2,40$). В [4] приведено значение показателя преломления света $n^2 = 5,841889$ ($n = 2,417$) с длиной волны 0,5893 мкм. Приведенные значения квадрата коэффициента диэлектрической проницаемости близки к значениям электронной поляризации, возникающей под воздействием света, но расхождение при их использовании достигает нескольких процентов. Отклонения измеренных значений диэлектрической проницаемости от квадрата показателя преломления света, характерного для электронной поляризации, свидетельствуют о наличии в измеряемых образцах приме-

сей, дефектов и других неоднородностей, влияющих на значения поляризации и, соответственно, диэлектрической проницаемости.

В настоящей работе определяется диэлектрическая проницаемость для связи между центральными атомами гексагонов базовых плоскостей призмы кубического углерода c -C как результат взаимодействия электрических полей. Расчет проведен в предположении совершенной структуры c -C.

Строение призмы c -C. Рассматриваемая модификация алмаза c -C имеет гранецентрированную кубическую ячейку с пространственной постоянной $a = 2,826195716 \cdot 10^{-10}$ м. В гексагональной анаморфозе ячейку можно представить в виде гексагональной призмы, состоящей из трех слоев соприкасающихся атомов углерода (трехслойная структура ...ABCA...). Пространственные постоянные призмы составляют: сторона гексагона $a_h = a/\sqrt{2} = 1,998422156 \cdot 10^{-10}$ м; высота призмы $c_h = 4,895114575 \cdot 10^{-10}$ м [5]. Главная ось призмы проходит через центры шестиугольников базовых плоскостей перпендикулярно к ним. Атомы углерода размещаются в центре и углах шестиугольников, атомы промежуточных плоскостей B и C – в лунках, образованных атомами базовых плоскостей (по три атома на каждой плоскости). Такая топология расположения атомов и последовательность слоев определяются влиянием потенциального барьера на различных участках поверхности [6].

На рис.1 приведен вид базовой плоскости призмы кристалла c -C, расположенной перпендикулярно его главной оси $OO_{+1}O_{+2}$. Это плоскость A_{+1} , ниже и выше которой располагаются плоскости A , A_{+2} и т.д. На плоскости A_{+1} изображен правильный шестиугольник $D_{+1}E_{+1}F_{+1}G_{+1}H_{+1}J_{+1}$, вписанный в окружность радиусом a_h . В центре и в каждом углу гексагона размещаются атомы углерода. Подобные гексагоны с номерами 1, 2, 3, 4, 5, 6 окружают описываемый. Объемный кристалл c -C можно представить в виде слоя призм на плоскости и последующего набора таких слоев, расположенных ниже и выше. При этом сохраняется расположение главных осей призм как единое целое.

Постоянство положения совокупных атомов углерода и насыщение всех его валентностей в призме и кристалле обусловлено образованием простых связей с атомами окружения. Атомы, вступающие в реакцию, представляют собой сферы, что по сути является совокупностью орбиталей электронов, а вид их – пространственные кривые. Последующее образование связи может превратить сферы, например, в электронное облако. Существование подобного электронного облака присуще и молекулам, в том числе и двухатомным [7].

Каждая связь атома углерода, вошедшего в кристаллическую решетку c -C, характеризуется пространственной обособленностью. Присутствие обособленных простых

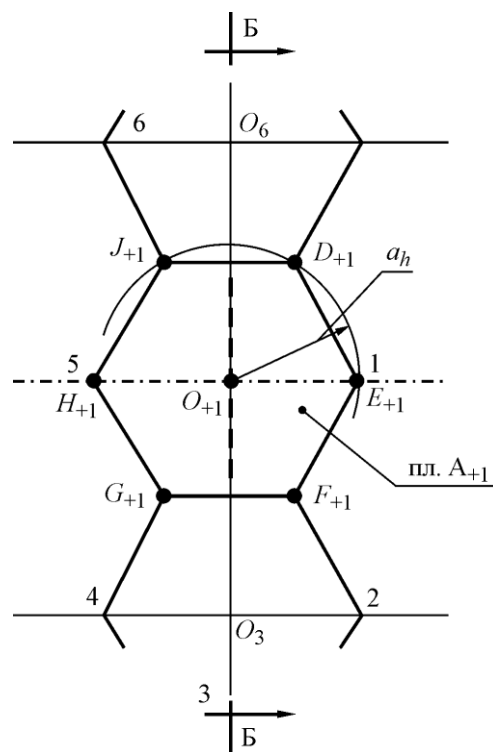


Рис.1. Вид базовых плоскостей кристалла c -C
Fig.1. Aspect of base plan prism crystal c -C

связей вместе с наличием самосогласованного поля и движения валентных электронов по «своим» орбиталям объединим и представим в виде отдельных объектов с простыми связями двухатомных молекул. В соответствии с этим рассмотрим фрагмент монокристаллического образца кубического углерода на уровне пространственной ячейки.

Плоскость Б–Б проходит вдоль главной оси призмы и пересекает сторону и большой диаметр гексагона по нормали (см. рис.1). Центральный атом углерода O_{+1} плоскости A_{+1} образует связи с атомами H_{+1} и E_{+1} (обозначены штрихпунктиром). Два оставшихся валентных электрона центрального атома гексагона плоскости A_{+1} образуют связи с центральными атомами гексагонов базовых плоскостей призмы, расположенных ниже и выше рассматриваемой: O на плоскости A и O_{+2} на плоскости A_{+2} . Проекция орбитали представляет собой отрезок прямой (обозначен штрихом), что отражает наличие плоской кривой. Это обусловлено тем, что орбитали данных связей подверглись сжатию сферами атомов, расположенных в углах гексагона D_{+1} и J_{+1} и F_{+1} и G_{+1} . Подобное сжатие происходит и на плоскостях $A-D$ и J , а также F и G .

Модель орбитали центральных атомов гексагонов базовых плоскостей призмы. В [6] вид связей в тетраэдрах c -C описан в соответствии с математическим определением эллипса. Это плоские выпуклые замкнутые кривые, имеющие центр, а их параметрами являются малая полуось b , фокусное расстояние c , большая полуось l и эксцентриситет e .

Выбор орбитали связи между центральными атомами гексагонов базовых плоскостей призмы кристалла c -C в виде аналитической кривой – эллипса, а также окружности связан с тем, что это единственная центральная кривая второго порядка, которая выпукла и замкнута. Эллипс и окружность являются результатом сечения конуса плоскостью, их параметры легко определяются, исходя из параметров пространственной ячейки. Появление эллиптических орбиталей – результат тесного сближения атомов углерода, которое завершается образованием простых химических связей. Такие связи в кристалле c -C отражают плотнейшую упаковку.

Если представить атом как сферу в виде упругой субстанции радиусом l , то сечение ее плоскостью, проходящей через центр, выявляет окружность. Известно также, что равномерное одностороннее сжатие этой окружности преобразует ее в эллипс, характеризующийся эксцентриситетом. Иначе говоря, окружность является предельным вариантом эллипса, эксцентриситет которого равен нулю. Субстанция характеризуется тем, что параметры сжатия и расширения при преобразовании окружности в эллипс и обратно идентичны. Приведенные в [6] значения геометрических параметров использованы для вычисления параметров эллиптической орбитали, охватывающей центральные атомы базовых плоскостей призмы – фокусного расстояния $c = c_h/2 = 2,447557288 \cdot 10^{-10}$ м, длины большой полуоси орбитали $l = c\sqrt{1,5} = 2,997633236 \cdot 10^{-10}$ м и малой полуоси $b = c\sqrt{2} = 1,730684355 \cdot 10^{-10}$ м.

На рис.2 представлено сечение призмы Б–Б. Построена эллиптическая орбиталь, расположенная между центральными атомами гексагонов базовых плоскостей призмы. Изображение эллиптической орбитали совмещено с прямоугольником (обозначен штрихом), образованным высотой призмы c_h , которая равна удвоенному фокусному расстоянию, и шириной $2a_h$. Указаны параметры эллипса: положение фокусов O_A и O_{+1} , фокусное расстояние c , длина большой полуоси l , длина малой полуоси b и центр P . Плоскость xPy проходит вдоль главной оси призмы и пересекает сторону и большой диаметр гексагона по нормали. Точками обозначено положение электронов связи при прохождении ими других диаметров эллипса. Тангенс угла α равен: $\operatorname{tg} \alpha = c/b$.

Взаимодействие зарядов центральных атомов гексагонов призмы кристалла с-С и электронов связи. Положительные заряды атомов находятся в центре каждой базовой плоскости, а электроны перемещаются по эллиптической орбитали, которая расположена между базовыми плоскостями. Следствием этого является временная переменчивость распределения поля в каждой точке пространства вокруг зарядов и орбитали. Если принять, что положение атомов стационарно, то появляется возможность определения поля в некоторые моменты времени. При этом необходимо учесть изменение значения поля, которое обусловлено экранированием заряда атома. Оно проявляется в уменьшении заряда атома Z от фундаментального до эффективного, измеряемого в атомных единицах заряда (а.е.з.). Заряд атома углерода $Z = 6$, заряд эффективного атома $Z_{\text{эфф}} = Z - S$, где S – константа экранирования. Значение константы экранирования углерода по Клементи Э. равно 2,864 [8], по Полингу Л. – 2,7868 [9]; по Слэтеру Дж. – 2,75 [10]. Предполагается, что в образовании рассматриваемой связи участвует равная доля зарядов, расположенных в фокусах эллиптической орбитали, для всех возможных связей.

Электростатика в связи с-С. Центральную ось набора призм, расположенных последовательно на нескольких плоскостях вдоль главной оси, можно представить в виде цепи, звеньями которой являются орбитали центральных атомов гексагонов базовой плоскости смежных призм. Каждое звено (орбиталь) состоит из двух атомов и двух электронов. При перемещении электронов по орбитали осуществляется связь между центральными атомами гексагонов призмы – по одному от атома каждой базовой плоскости. Оставшиеся электроны этих атомов образуют связи с атомами смежных призм, находящихся ниже и выше рассматриваемой.

Электроны связи, оказавшиеся одновременно в точках M и N (малых вершин орбиталей), подвергаются воздействию полей зарядов, расположенных в фокусах. Значение каждой проекции связано с фокусным расстоянием через тангенс угла α ($\text{tg} \alpha = c/b = \sqrt{2}$). Проекция поля заряда каждого атома направлены от малых вершин орбитали M и N к ее центру P : $X_M^+ \rightarrow P$ и $X_N^+ \rightarrow P$. Эффект этого воздействия – сжатие орбитали. В момент прохождения электронами связи малых вершин орбитали между ними возникает расталкивающий эффект. Векторы этих полей лежат вдоль малой оси орбитали и направлены от вершины M и от вершины N наружу.

Рассчитаем напряженности полей в миделевом сечении орбитали, которые создаются зарядами атомов, расположенных в фокусах, и полей электронов.

Проекция поля, создаваемая зарядом атомов, изменяется непрерывно, образуя фон:

$$X^+ = 0,5 \cdot 2[(Z_{\text{эфф}}^+/4)q]/(4\pi\epsilon_0\epsilon)(l^2)\sin\alpha,$$

где $Z_{\text{эфф}}^+ = (6 - 2,864)/4$ – доля эффективного заряда отдельной связи центральных атомов гексагонов призмы, а.е.з.; $q = 1,602189 \cdot 10^{-19}$ Кл – заряд электрона; $\epsilon_0 = 8,854188 \cdot 10^{-12}$ Ф/м – электрическая постоянная; ϵ – диэлектрическая проницаемость среды (для вакуума

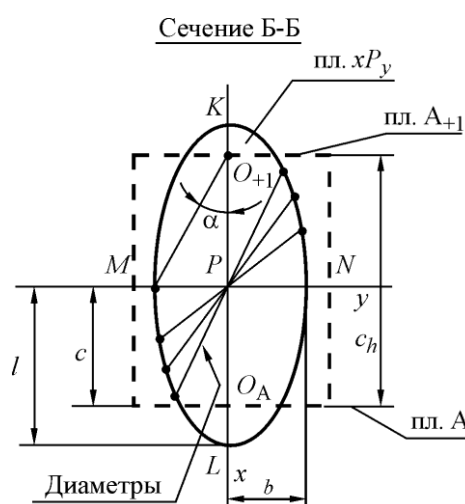


Рис. 2. Сечение призмы Б-Б в координатах xPy

Fig. 2. In coordinates xPy is section of prism Б-Б

$\varepsilon_b = 1$; α – угол между большой полуосью и вектором, исходящим от заряда к вершине малой полуоси орбитали ($\sin\alpha = 1/\sqrt{3}$).

Напряженность поля, наведенного в пространстве электронами связи в момент прохождения ими малых вершин эллиптической орбитали, равна:

$$X^- = (q/(4\pi\varepsilon_0\varepsilon))b^{-2},$$

где $b = c/\sqrt{2}$ – длина малой полуоси эллиптической орбитали связи.

Подставляя числовые значения в приведенные уравнения и учитывая, что $\varepsilon_b = 1$, имеем $X^+ = 0,725359974 \cdot 10^{10}$ В/м; $X^- = 4,807501264 \cdot 10^{10}$ В/м. Эти значения напряженности поля получены с использованием экранирования [8]. Как видно из приведенных расчетов, значение поля отрицательного заряда в момент прохождения электронами малых вершин эллиптической орбитали превышает значение поля, создаваемого зарядами атомов связи. Разность этих значений используется для определения диэлектрической проницаемости.

Компенсация поля электронов в момент прохождения ими малых вершин орбиталей, необходимая кубическому углероду *c*-C как диэлектрику, обеспечивается поляризацией. Это свидетельствует об изменении свойств среды, в которой распространяется поток электрической индукции.

Разность X^- и X^+ соответствует действительному значению поля в точках *M* и *N*: $X_M^- = 4,082141286 \cdot 10^{10}$ В/м. Используя уравнение, связывающее отношение полей и отношение диэлектрических проницаемостей среды и вакуума ($X_M^-/X^+ = \varepsilon_c/\varepsilon_b$), можно определить значение диэлектрической проницаемости кубического углерода *c*-C: $\varepsilon_c = 5,6277454$. Так как достоверность геометрических параметров ограничена точностью определения масс атомов углерода (7 знаков после запятой), то примем значение диэлектрической проницаемости *c*-C $\varepsilon_c \approx \varepsilon_{c-C} = 5,6277454$, которое может быть использовано в практических целях.

Заключение. Определение диэлектрической проницаемости кубического углерода *c*-C сводится к выявлению электрических полей, которые создают заряды атомов углерода, находящиеся в центрах гексагонов базовых плоскостей призмы, и электроны связи. Полученное значение диэлектрической проницаемости близко к экспериментальному.

Литература

1. Твердотельный автоэмиссионный диод / В.А. Беспалов, Э.А. Ильичев, А.Е. Кулешов и др. // Письма в ЖТФ. – 2013. – Т. 39. – Вып. 4. – С. 46–50.
2. Исследование технологий формирования наноструктурированных эмиссионных сред для высоко-точной радиочастотной электроники / В.А. Беспалов, Э.А. Ильичев, Е.П. Кириленко и др. // Изв. вузов. Электроника. – 2014. – № 4. – С. 27–35.
3. Богородицкий Н.П., Пасынков В.В., Тареев Б.М. Электротехнические материалы. – М.: Энергия, 1969. – 408 с.
4. Большая советская энциклопедия. – 3-е изд. – М.: Советская энциклопедия, 1970. – 454 с.
5. Неустроев С.А. Моделирование орбиталей в тетраэдре кристалла кубического углерода // Изв. вузов. Электроника. – 2017. – Т. 22. – № 2. – С. 120–127.
6. Неустроев С.А. Влияние упаковки на воспроизводство сингонии кристалла кубического углерода // Изв. вузов. Электроника. – 2016. – Т. 21. – № 6. – С. 515–519.
7. Краснов К.С. Молекулы и химическая связь. – М.: Высшая школа, 1984. – 295 с.
8. Clementi E.A., Raimondi D.L. J. Chem. Phys. – 1968. – Vol. 38. – P. 2863–2875.
9. Поллинг Л. Общая химия. – М.: Мир, 1974. – 846 с.

10. **Слэтер Дж.** Методы самосогласованного поля для малых молекул и твердых тел. – М.: Мир, 1978. – 668 с.

Поступила 20.10.2017 г.; принята к публикации 19.06.2018 г.

Неустроев Степан Архипович – доктор технических наук, профессор Института перспективных материалов и технологий Национального исследовательского университета «МИЭТ» (Россия, 124482, г. Москва, г. Зеленоград, пл. Шокина, д.1), doloto@list.ru

Неустроев Николай Степанович – кандидат технических наук, старший научный сотрудник НИИ материаловедения (Россия, 124460, г. Москва, г. Зеленоград, Георгиевский пр., д. 5, стр.2)

References

1. Bepalov V.A., Il'ichev E.A., Kuleshov A.E. et al. Solid state autoemissied diod. *Pis'ma v ZHTF = Letters to JTP*, 2013, vol. 39, no. 4, pp.46–51 (In Russian).
2. Bepalov V.A., Il'ichev E.A., Kirilenko E.P., Kozlitin A.I., Kuleshov A.E., Migunov D.M., Nabiev R.M., Petrukhin G.N., Rychkov G.S., Sakharov O.A., Trifonov A.I. Peculiarities of forming emission structures for powerful microwave electronics. *Izvestiya vuzov. Elektronika = Proceedings of Universities. Electronics*, 2014, no. 4, pp. 27–35. (In Russian).
3. Bogoroditskiy N.P., Pacinkov V.V., Tareev B.M. *Electrotechnical materials*. Moscow, Energia Publ., 1969. 408 p. (In Russian).
4. *Great Soviet Encyclopedia*. Vol.1. 3 ed. Moscow, Sovetskaya entsiklopediya Publ., 1970. 454 p. (In Russian).
5. Neoustroev S.A. Modeling of orbitals in c-C crystal tetrahedron. *Izvestiya vuzov. Elektronika = Proceedings of Universities. Electronics*, 2017, vol. 22, no. 2, pp. 120–127. (In Russian).
6. Neoustroev S.A. Influence of packing on reproduction of singonia of c-C crystal. *Izvestiya vuzov. Elektronika = Proceedings of Universities. Electronics*, 2016, vol. 21, no. 6, pp. 515–519. (In Russian).
7. Krasnov K.S. *Molecules and chemical bonds*. Moscow, Vysshaya shkola Publ., 1984. 295 p. (In Russian).
8. Clementi E.A., Raimondi D.L. *J. Chem. Phys.* 1968, vol. 38, pp. 2863 – 2875.
9. Pauling L. *General Chemistry*. Moscow, Mir Publ., 1974, 846 p. (In Russian).
10. Sleter D. *Methods of self agree field for small molecules and solids*. Moscow, Mir Publ., 1978. 668 p. (In Russian).

Submitted 20.10.2017; Accepted 19.06.2018.

Information about the authors:

Stepan A. Neoustroev – Dr. Sci. (Eng.), Prof. of the Institute of Perspective Materials and Technologies, National Research University of Electronic Technology (Russia, 124498, Moscow, Zelenograd, Shokin sq., 1), doloto@list.ru

Nikolay S. Neoustroev – Cand. Sci. (Eng.), Senior Researcher, RIMST (Russia, 124460, Moscow, Zelenograd, Georgievskiy pr., 5, bld. 2).