

РЕНТГЕНСПЕКТРАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ОСОБЕННОСТЕЙ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ НАНОРАЗМЕРНОГО НИТРИДА КРЕМНИЯ

Силенко П.М., Солонин Ю.М., Хижун О.Ю.,
Шлапак А.Н., Рагуля А.В., Петровская С.С.

Институт проблем материаловедения им. И.Н. Францевича НАН Украины,
ул. Кржижановского, 3, Киев 03680, Украина, sw.piotrowska@gmail.com

Нитрид кремния характеризуется уникальной комбинацией свойств, таких как высокая прочность в широком диапазоне температур, умеренная теплопроводность, низкий коэффициент теплового расширения, умеренно-высокий коэффициент упругости. Поэтому данный материал привлекает повышенное внимание с научной и практической точки зрения. Поскольку свойства материала существенно зависят от особенностей его электронного строения, в данной работе выполнено сравнительное исследование электронной структуры поликристаллического и наноразмерного Si_3N_4 .

Исследованы L_α рентгеновские эмиссионные спектры кремния, отображающие энергетическое распределение занятых s и d состояний в валентной зоне, и K_α рентгеновские эмиссионные спектры азота, соответствующие энергетическому распределению $N2p$ состояний в валентной зоне. Спектры были получены с помощью рентгеновского спектрометра-монокроматора РСМ-500.

Энергетическое перераспределение валентных электронов при переходе от поликристаллического к наноразмерному Si_3N_4 проявляется в сужении и изменении формы $\text{Si}L_\alpha$ - и NK_α -эмиссионных полос.

В низкоэнергетической части $\text{Si}L_\alpha$ -спектра нанопорошка проявляется дополнительная особенность, соответствующая группе молекулярных орбиталей с доминирующим вкладом $2s$ -атомных орбиталей кислорода с примесью $3s$ и $3p$ атомных орбиталей Si (рис. 1), что свидетельствует о частичном окислении наноразмерного Si_3N_4 . $\text{Si}L_\alpha$ -спектр нанопорошка сужается в областях энергий, соответствующих взаимодействию $3s$, $3p_\sigma$ атомных орбиталей кремния с $2p_\sigma$ атомными орбиталями азота и $3p_\pi$ атомных орбиталей кремния с $2p_\pi$ атомными орбиталями азота в крупном порошке. В эмиссионной $\text{Si}L_\alpha$ -полосе наноразмерного порошка в этих областях также

проявится взаимодействие $3s$, $3p_\sigma$ и $3p_\pi$ атомных орбиталей Si с $2p_\sigma$ и $2p_\pi$ атомными орбиталями кислорода. При переходе к наноразмерному порошку возрастает вклад поверхности по сравнению с вкладом объема. Это происходит вследствие разрыва Si-N связей на поверхности частиц порошка.

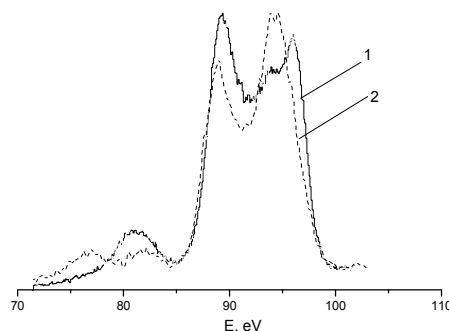


Рис. 1 Рентгеновские эмиссионные $\text{Si}L_\alpha$ -полосы нитрида кремния: 1 – крупного, 2 – нанопорошка

Сужение главного максимума NK_α (рис. 2), отображающего несвязывающие Np состояния, свидетельствует об уменьшении взаимодействия между атомами азота и кремния.

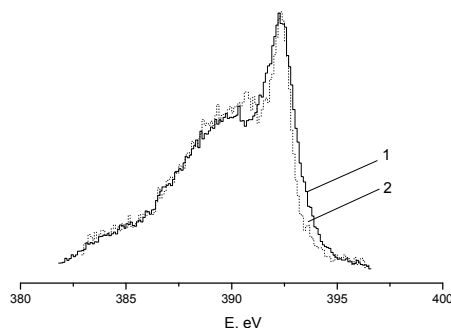


Рис. 2 Рентгеновские эмиссионные NK_α -полосы нитрида кремния: 1 – крупного, 2 – нанопорошка