

Графитизация ультратонких пленок ионного состава

Е.Ю. Пашкин^{1,2}, А.Г. Квашнин^{1,2}, П.Б. Сорокин^{1,2}

¹Московский физико-технический институт (государственный университет)

²Федеральное государственное бюджетное научное учреждение

«Технологический институт сверхтвердых и новых углеродных материалов»

В ультратонких пленках вклад поверхностной энергии в общую энергию системы является определяющим, поэтому помимо незначительных поверхностных искажений, в системе может наблюдаться глобальная реконструкция структуры, происходящая по всему объему ультратонкой пленки.

Ранее мы предсказывали процесс графитизации в ионных наноматериалах [1,2], подобный (но не такой же) таковому в углеродных наноструктурах [3]. Этот сценарий графитизации, если он энергетически выгоден для широкого спектра веществ, может быть использован для синтеза ультратонких слоистых структур для нужд нанoeлектроники в пост-графеновую эру.

Используя первопринципные методы, мы выполнили комплексное исследование общей тенденции к графитизации ультратонких пленок ионного состава типа каменной соли. Было получено уравнение использующее только базовые параметры составных элементов (электроотрицательность по Аллену и ионный радиус металла), позволяющее определять критическую толщину пленок для набора систем, ниже которой происходит спонтанное превращение структуры из кубической в слоистую, графитоподобную, что обусловлено снижением поверхностной энергии.

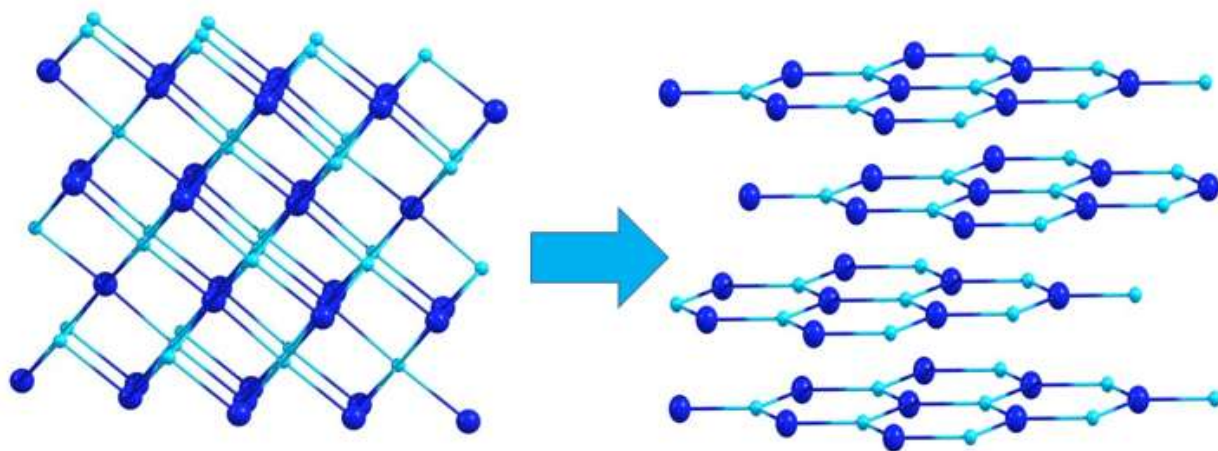


Рис. 1 Схема расщепления кубической структуры типа каменной соли на примере хлорида калия.

Литература

- [1] *Sorokin P.B., Kvashnin A.G., Zhu Z., Tománek D.* Spontaneous graphitization of ultrathin cubic structures: a computational study – Nano Letters, 2014
- [2] *Kvashnin A.G., Sorokin P.B., Tománek D.* Graphitic phase of NaCl. Bulk properties and nanoscale stability. – J. Phys. Chem. Lett., 2014, 5, 4014-4019
- [3] *Kvashnin A.G., Chernozatonskii L.A., Yakobson B.I., Sorokin P.B.* Phase diagram of quasi-two-dimensional carbon. Nano Letters, 2014, 2, 676-681