

УДК 538.9

ОБЗОР СТРУКТУРЫ И СВОЙСТВ ПСЕВДО-ГРАФЕНОВ

Абраменко Н.Д. (Университет ИТМО), Рожков М.А. (Университет ИТМО), Романов А.Е. (Университет ИТМО), Колесникова А.Л. (Университет ИТМО),

Научный руководитель – доктор физико-математических наук, профессор Романов А.Е.

(Университет ИТМО)

Проведен анализ существующих научных работ по кристаллам псевдо-графена и сформирован обзор, покрывающий исследования в этой тематике. В обзоре описаны структурные особенности и свойства псевдо-графенов, а также предложена своя классификация и метод наименования для обнаруженных материалов.

Введение. Углерод способен образовывать множество аллотропов - твердых тел из одного и того же элемента, различного по строению. Например, алмаз - самый твердый природный материал; графит, который имеет широкое применение (например, в качестве сухой смазки и проводника), и др. В зависимости от своей внутренней структуры эти аллотропы могут демонстрировать различное поведение электронов на внешней электронной оболочке, ответственных за взаимодействие между атомами углерода.

Если взять один изолированный атомный слой графита, то мы получим графен - двумерный кристалл углерода с гексагональной решеткой. Графен обладает многообещающими прикладными свойствами: необычными электронными свойствами, высокой теплопроводностью и уникальным набором механических характеристик. Его успешный синтез привлек большое внимание и ознаменовал активный рост интереса к изучению двумерных кристаллов.

Физическими и механическими свойствами графена можно управлять с помощью внешних воздействий: механических, электрических, магнитных и / или путем изменения локального кристаллического совершенства графена. Например, расчеты электронной зонной структуры графена показывают, что деформация растяжением позволяет получить запрещенную зону, которая отсутствует для графена в его естественном состоянии. Дефекты решетки графена, в свою очередь, изменяют механические свойства (что аналогично эффектам, наблюдаемым в обычных трехмерных кристаллах), способствуя в то же время увеличению электропроводности и теплопроводности графена.

Существует множество работ, в которых исследуются двумерные кристаллы углерода, отличные от графена. В таких кристаллах наблюдается высокая плотность атомных колец углерода с дефектами, организованными периодическим образом. Эти кристаллы принято называть «аллотропами графена», «аллотропами углерода» и т.д. Однако пока никто не предложил единой номенклатуры для таких материалов.

Целью данного обзора является анализ современного состояния исследований данных материалов.

Основная часть. В полученном обзоре описано 47 материалов из различных статей. Из них 6 материалов были исследованы независимыми исследовательскими группами, а остальные были обнаружены единожды в единичных публикациях. Исходя из этого набора материалов, мы предложили их классификацию по форм-фактору, гибридизации и электронной структурой материала. Также, все исследуемые материалы были объединены единым термином – псевдо-графены и для них было предложено новое структурированное наименование, учитывающее свойства материала.

По результатам работ была составлена таблица материалов с их свойствами, источниками исследований и новым предложенным названием.

Среди рассмотренных в обзоре материалов мы не обнаружили никакой связи между их электронной структурой, структурой кристаллической решетки и гибридизацией кристаллов.

Материалы этого обзора планируется использовать в наших дальнейших исследованиях:

- Дополнить существующую таблицу другими низкоэнергетическими псевдо-графенами. Для этого планируется использовать программный пакет USPEX, который специализируется на прогнозировании кристаллической структуры по заданному химическому составу.

- Многие из рассмотренных в обзоре псевдо-графенов изучены недостаточно подробно, т.е. не все их физические характеристики рассчитаны. В связи с этим, логичным продолжением исследования было бы выполнение перерасчета характеристик изученных кристаллов единым методом, а также завершение расчетов для материалов, чьи характеристики не были исследованы полностью.

- Необходимо провести аналитическое исследование графеноподобных псевдо-графенов (с sp^2 -гибридизацией) с использованием теории дисклинаций. Возможно, это позволит нам найти какие-либо связи между кристаллической структурой и конечными свойствами псевдо-графенов, которые нам не удалось обнаружить.

Выводы. По изученным литературным источникам был составлен обзор материалов. В данном обзоре был представлен перечень кристаллов псевдо-графена, исследуемых в выше упомянутых работах. Для каждого материала были расписаны свойства его электронной структуры, гибридизация атомов, а также механические свойства, если таковые были исследованы. На основе полученного перечня материалов была предложена классификация псевдо-графенов по их свойствам; для изученных материалов был предложен новый метод наименования в соответствии со свойствами материала.

Абраменко Н.Д. (автор)

Романов А.Е. (научный руководитель)