

УСТОЙЧИВОСТЬ ПЛЕНОК ЛИНЕЙНО-ЦЕПОЧЕЧНОГО УГЛЕРОДА НА ПОДЛОЖКАХ ЭЛЕМЕНТАРНОГО И БИНАРНОГО СОСТАВА

Матицев А.И.¹, Бунтов Е.А.¹, Зацепин А.Ф.¹, Бокизода Д.А.¹, Вагапов А.Ш.¹

¹) Уральский федеральный университет имени первого Президента России
Б.Н. Ельцина, г. Екатеринбург, Россия
E-mail: Sasha_sz61@mail.ru

STABILITY OF LINEAR-CHAINED CARBON FILMS ON SUBSTRATES OF ELEMENTARY AND BINARY COMPOSITIONS

Matitsev A.I.¹, Buntov E.A.¹, Zatsepin. A.F.¹, Boqizoda D.A.¹, Vagapov A.Sh.¹

¹) Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

The aim of this work is an ab initio study of the linear chained carbon (LCC) stability on the substrates of elementary and binary composition. The investigated substrates are Al, KCl, NaCl. DFT and MD calculations on sample structures reveal the peculiarities of LCC film deposition.

Производство макроскопического карбина до сих пор является очень важной проблемой из-за нестабильности углеродных цепей. По сути, проблема нестабильности линейно-цепочечного углерода (ЛЦУ) связана с высокой гибкостью одномерных цепей, а также реакционной способностью ненасыщенных связей с sp¹-гибридизацией. Формирование гексагональной структуры из линейных цепочек в процессе роста обеспечивается поверхностью подложки [1]. В этой связи интерес представляет кристаллические подложки, подверженные растворению с последующим отслаиванием углеродной пленки. Подобные материалы позволяют проводить исследования структуры и свойств ЛЦУ непосредственно, без участия подложки. В перспективе они создают основу для переноса цепочечного покрытия на подложки другого типа, где его непосредственное выращивание невозможно.

Целью настоящей работы является изучение стабильности пленок линейно-цепочечного углерода на подложках элементарного и бинарного состава. В качестве исследуемых подложек используются алюминий, хлорид натрия и хлорид калия с ориентациями (001), (110) и (111). Оптимизация структуры цепей на поверхности осуществляется в рамках теории функционала плотности в приближении GGA. Моделирование устойчивости ЛЦУ при повышенных температурах выполняется методами молекулярной динамики.

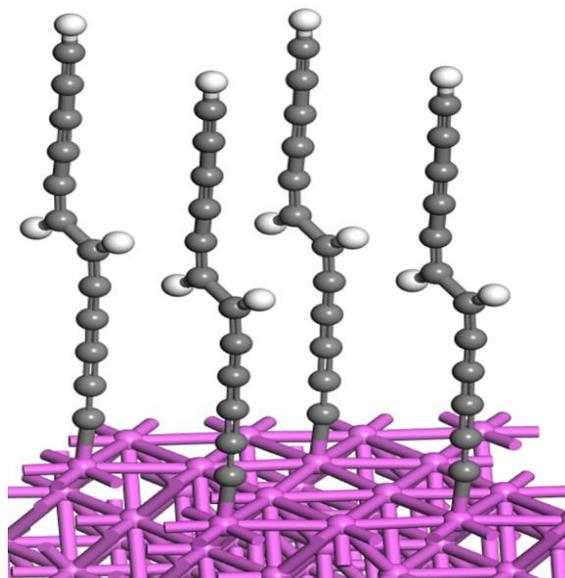


Рис. 1. Упрощенная модель пленки из линейно-цепочечного углерода на поверхности алюминия

1. Babaev V.G., Guseva M.B., Novikov N.D., Khvostov V.V., Polyynes: Synthesis, Properties, and Applications, 219-252 (2005)

MODELING OF SURFACE SP-SYSTEMS MAKING USE THE EXTENDED DYNAMICAL MEAN-FIELD THEORY

Medvedeva D.^{1,2}

¹⁾ Ural Federal University, Yekaterinburg, Russia

²⁾ Institute of Physics of the Czech Academy of Sciences, Prague, Czech Republic

E-mail: medvedeva.ds@gmail.com

This work is devoted to construction of a model to describe influence of correlation and nonlocal charge interaction effects on the electronic properties of surface sp-systems on the example of Graphene adatom systems.

Adatom systems attract lot of attention of scientists because of evolving of STM technology. This kind of materials has a big potential for development of novel logical devices or atomic memory. A great example is the surface systems with s- and p- electrons. Some of them present interesting feature: despite of strong hybridization of atomic levels and smaller extension of a wave function, we can observe formation of a narrow band on the Fermi level with half-filling [1, 2]. Because of that the ARPES [3] experiment and single-electron theoretical methods [4, 5] can present conflicting results.

In this work we consider adatom graphene systems C₂F and C₂F. For more realistic description the electronic properties of these systems taking into account the nonlocal charge interactions were considered using the Extended Dynamical Mean-Field Theory.