

Полная реконструкция зигзаг края графена: кинетика образования и аннигиляции остаточных дефектов

Попов А.М.¹, Полинская Ю.Г.², Лебедева И.В.^{3,4,5}, Вырко С.А.⁶, Книжник А.А.²,
Поклонский Н.А.⁶

popov-isaa@mail.ru

¹ Институт спектроскопии РАН, Троицк, Россия

² ООО "Лаборатория Кинтех", Москва, Россия

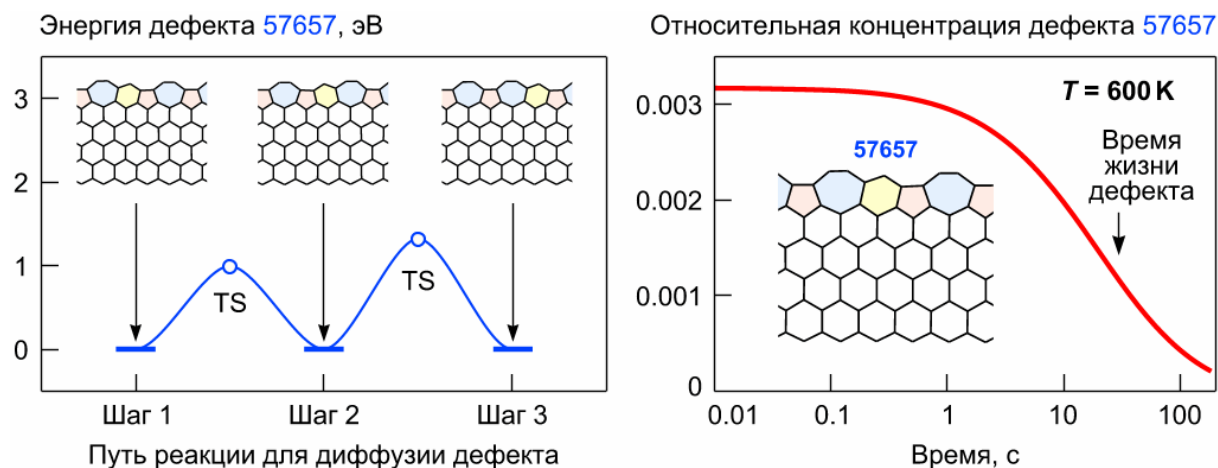
³ Catalan Institute of Nanoscience and Nanotechnology (ICN2), Барселона, Испания

⁴ CIC nanoGUNE BRTA, Сан-Себастьян, Испания

⁵ Simune Atomistics, Сан-Себастьян, Испания

⁶ Белорусский государственный университет, Минск, Беларусь

Проведены расчеты энергетики перестройки структуры для последних этапов реконструкции зигзаг края графена. Первый этап реконструкции — нуклеация 57 пары и рост реконструированных доменов, состоящих из 57 пар, рассмотрен в [1]. Рассчитаны энергии вдоль пути реакции при слиянии доменов с образованием остаточных дефектов (границ доменов) и диффузии этих дефектов. Барьеры при слиянии доменов находятся в диапазоне 0,8-1,6 эВ, что указывает на то, что слияние доменов не ограничивает скорость процесса реконструкции. Дефект 7557 с соседними пятиугольниками метастабилен относительно образования 66 пары между пятиугольниками. Предложены и исследованы атомистические пути диффузии остаточных дефектов, при этом рассчитанные барьеры в диапазоне 1,3-2,2 эВ. Самым подвижным дефектом является шестиугольник, разделяющий два домена с одинаковой ориентацией 57 пар (57657). Зависимость от температуры времени жизни остаточных дефектов до их аннигиляции определена с помощью кинетического моделирования. Показано, что полная реконструкция зигзаг края возможна при температурах выше 600 К. Работа поддержана ГПНИ «Конвергенция-2030» РБ.



Изменение энергии (в эВ) вдоль пути реакции при диффузии 57657-дефекта, слева.
Концентрация 57657-дефектов, приведенная на полное число многоугольников вдоль края, как функция времени реконструкции (в секундах), справа.

Ссылки

1. Y.G. Polynskaya, I.V. Lebedeva, A.A. Knizhnik, A.M. Popov, J. Phys. Chem. Lett. (2022) **13**, 10326.