

PACS: 61.80.Ba

THE STRUCTURE OF MONOATOMIC LAYER ON GRAPHITE SURFACE

V.G. Kirichenko, A.A. Yampolskiy

V.N. Karazin Kharkiv National University

4 Svobody Sq., Kharkiv, 61022, Ukraine

E-mail: val_kir48@mail.ru

Received September 5, 2016

Monatomic surface layers of graphite were simulated on the basis of experimental data, which was obtained by scanning tunneling electron microscopy of atomically smooth surface of graphite. Values of relative deviation of the electron density were defined in the direction perpendicular to the plane of the layer. Increase in the degree of waviness layer to 2 nm are observed by increasing of linear dimensions under review graphite surface area of up to 25 nm. These results are confirmed by the data available for the graphene layers, which is caused by waviness defect. Indeed, defects such as vacancies and interstitial carbon atom are formed by increasing the number of cells to the surface layer up to 20.

KEY WORDS: graphite, surface, structure, graphene, electron density, defects

СТРУКТУРА МОНОАТОМНОГО ШАРУ НА ПОВЕРХНІ ГРАФІТУ

В.Г. Кіріченко, О.О. Ямпольський

Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна

61022, Харків, м. Свободи, 4

На основі експериментальних даних, отриманих за допомогою скануючої тунельної мікроскопії атомарно гладкої поверхні графіту, промодельовано моноатомні поверхневі шари графіту. Визначені значення відносних відхилень електронної густини в напрямі перпендикулярному площині шару. При збільшенні лінійних розмірів ділянки поверхні графіту до 25 нм спостерігається збільшення ступеня хвилястості шару до 2 нм. Ці результати підтверджуються даними для вільних графенових шарів, хвилястість яких обумовлена дефектами. Дійсно, при збільшенні числа осередків поверхневого шару до 20 формуються дефекти типу вакансія і впроваджений атом вуглецю.

КЛЮЧЕВІ СЛОВА: графіт, поверхня, структура, графен, електронна густина, дефекти

СТРУКТУРА МОНОАТОМНОГО СЛОЯ НА ПОВЕРХНОСТІ ГРАФИТА

В.Г. Кириченко, А.А. Ямпольский

Харьковский национальный университет имени В.Н. Каразина

61022, г. Харьков, пл. Свободы, 4

На основе экспериментальных данных, полученных с помощью сканирующей туннельной микроскопии атомарно гладкой поверхности графита, промоделированы моноатомные поверхностные слои графита. Определены значения относительных отклонений электронной плотности в направлении перпендикулярном плоскости слоя. При увеличении линейных размеров обозреваемого участка поверхности графита до 25 нм наблюдается увеличение степени волнистости слоя до 2 нм. Эти результаты подтверждаются данными для свободных графеновых слоев, волнистость которых обусловлена дефектами. Действительно, при увеличении числа ячеек поверхностного слоя до 20 формируются дефекты типа вакансии и внедренный атом углерода.

КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА: графит, поверхность, структура, графен, электронная плотность, дефекты

Interest in monatomic hexagonal layers of graphite has appeared in the mid 40's, last century [1]. In this work we calculated the monoatomic graphite layer in the strong-coupling approximation. In graphite, each C-atom is sp^3 -hybridized [2 - 6], orbital symmetry s -, p_x - и p_y located on the plane of the monatomic layer (σ -orbital); such orbitals are fully occupied and do not participate in the conduction. The fourth electron has a wave function p_z -symmetry; these orbitals are perpendicular to the atomic layer (π -orbital). These π -electrons are responsible for conductivity, and it will be further shown that energy band has both electrons and holes. π -electron interaction is considered and representation of the energy bands of the graphite is obtained in [1] and it predicts the most important properties. The main conclusion is the presence of degeneracy between filled and empty π -band, that follows from the symmetry of the monolayer. The bottom π -band must be filled and the top - must be empty at absolute zero. Also the energy gap between the bands must be absent. Progress in the preparation of thin film methods allowed synthesizing a monolayer of graphite monolayer on the surface of nickel [7], the lanthanum hexaboride crystals [8], platinum [9], iridium and rhenium [10,11], titanium carbide [12].

The first monolayer of graphite in a free state is graphene. It was obtained by Geim and Novoselov [13, 14]. Graphene is allotropic form of carbon, that consisting of a monolayer of graphite, which has a number of non-conventional properties - good electrical conductivity, transparency, good mechanical properties, high mobility of charge carriers at room temperature, the possibility of quantum conductivity and the epitaxial layer deposition. It is interesting to note that the basic approximation of Solid State Physics - Born-Oppenheimer approximation (adiabatic approximation) is broken down in graphene. So, fluctuations in the ion cores of the lattice must be included as a disturbance in the form of phonons in the lattice in the construction zone theory of graphene [15].

