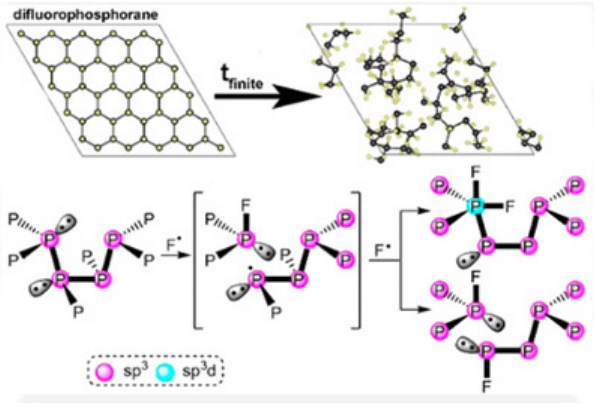
Химики научились стабилизировать «капризный» фосфор

Международный коллектив российских, шведских и украинских учёных определил эффективную стратегию улучшения стабильности двумерного чёрного фосфора — перспективного материала для использования в оптоэлектронике.



Выявлен наиболее действенный механизм прикрепления к поверхности этого материала атомов фтора. Помимо повышенной стабильности в сравнении с ранее предложенными структурами, предсказанные исследователями материалы продемонстрировали высокую антиокислительную устойчивость. Основные результаты работы представлены в журнале The Journal of Physical Chemistry Letters.

Чёрный фосфор получают в условиях высокого давления и повышенной температуры из белого фосфора. Материал подобно графиту имеет слоистую структуру, и по внешнему виду и свойствам также напоминает графит. Однако, в отличие от него, является хорошим полупроводником.

«Фосфорен — монослой чёрного фосфора, он обладает интересными физическими свойствами (высокая анизотропная электро- и теплопроводность, гибкая вариативность запрещённой зоны в зависимости от числа слоёв), которые делают его перспективным материалом для применения в различных областях оптоэлектроники (транзисторы, инвертеры, гибкая электроника, солнечные батареи). К сожалению, одной из его основных проблем является нестабильность в условиях окружающей среды. В отличие от своего объёмного аналога, который почти невосприимчив к внешним условиям, фосфорен быстро начинает присоединять кислород из воздуха и деградирует буквально в течение нескольких часов. В качестве одной из стратегий улучшения стабильности фосфорена предлагается прикреплять к поверхности этого материала атомы фтора. За последние пять лет учёные предложили несколько теоретически возможных вариантов такой „сцепки“. Был даже проведён эксперимент, который показал значительное увеличение стабильности фосфорена в условиях окружающей среды после его фторирования. Однако особенности полученной структуры материала остались необъяснёнными.

Используя различные теоретические подходы, мы с коллегами показали, что ранее предложенные структуры „стабилизированного“ фосфорена являются фактически нестабильными (неверными). Известно, что фосфор способен образовывать соединения с 3 или 5 атомами фтора. Наши расчёты также подтвердили, что характерная координация атома фосфора в системе PF равна 3 или 5. Путём последовательного присоединения атомов удалось выявить наиболее эффективный и действительно работающий механизм, по которому атомы фтора должны прикрепляться к поверхности фосфорена. Таким образом мы определили тип структур, которые, вероятнее всего, и были получены в вышеупомянутом эксперименте нашими предшественниками», — сообщил сотрудник научно-исследовательской части СФУ **Артём Куклин**.

Учёные отметили, что материалы, образованные по предсказанному механизму, действительно стабильны и обладают повышенной антиокислительной способностью (т. е. не будут так быстро деградировать), а их электронные свойства, практически не отличающиеся от свойств чистого фосфорена, предоставляют возможность их практического применения в оптоэлектронных устройствах — транзисторах, солнечных батареях, гибкой электронике, светодиодах, фотосенсорах, биомедицинских приборах, оптических устройствах хранения и передачи информации и т. д.

Помимо учёных СФУ в исследовании приняли участие научные сотрудники Королевского технологического института (Швеция), Хэнаньского университета (Китай) и Черкасского Национального университета им. Б. Хмельницкого.

Исследование поддержано Министерством науки и высшего образования РФ и Сибирским федеральным университетом (Грант № 16.1455.2017 / ПЧ).

Пресс-служба СФУ, 12 ноября 2019 г.

© Сибирский федеральный университет. Редакция сайта: +7 (391) 246-98-60, info@sfu-kras.ru.

Адрес страницы: https://news.sfu-kras.ru/node/22421