

## Záverečná karta projektu

Názov projektu Evidenčné číslo projektu **APVV-16-0319**

**Vlastnosti rozhrania grafén-diamant: štúdium na atomárnej úrovni**

Zodpovedný riešiteľ **doc. Ing. Viera Skákalová, DrSc.**

Príjemca **Slovenská technická univerzita v Bratislave**

### Názov pracoviska, na ktorom bol projekt riešený

Slovenská technická univerzita v Bratislave, Centrum pre nanodiagnostiku, Vazovova 5, Bratislava

### Názov a štát zahraničného pracoviska, ktoré spolupracovalo pri riešení

Slovenská technická univerzita v Bratislave, Centrum pre nanodiagnostiku, Vazovova 5, Bratislava  
Fyzikálny ústav Slovenskej akadémie vied, Dúbravská cesta 9, Bratislava

### Udelené patenty/podané patentové prihlášky, vynálezy alebo úžitkové vzory, ktoré sú výsledkami projektu

žiadne

### Najvýznamnejšie publikácie (knihy, články, prednášky, správy a pod.) zhrňujúce výsledky projektu – uveďte aj publikácie prijaté do tlače

Kniha:

2nd edition: Graphene: properties, preparation, characterisation and applications (Woodhead Publishing Series in Electronic and Optical Materials), Editors: Viera Skákalová and Alan B. Kaiser, Elsevier; Imprint: Woodhead Publishing Ltd., Cambridge, United Kingdom, Paperback ISBN: 9780081028483, Published Date: 1st June 2021

Semir Tulić, Thomas Waitz, Mária Čaplovičová, Gerlinde Habler, Marián Varga, Mário Kotlár, Viliam Vretenár, Oleksandr Romanyuk, Alexander Kromka, Bohuslav Rezek and Viera Skákalová, Solid-state reactions with silicon accompanying process of catalytic graphitization of diamond, RSC Advances 10, 8224 – 8232 (2020).

Semir Tulić, Thomas Waitz, Mária Čaplovičová, Gerlinde Habler, Marián Varga, Mário Kotlár, Viliam Vretenár, Oleksandr Romanyuk, Alexander Kromka, Bohuslav Rezek and Viera Skákalová, Covalent Diamond–Graphite Bonding: Mechanism of Catalytic Transformation, ACS Nano 13, 4621–4630 (2019)

Marian Varga, Tibor Izak, Viliam Vretenar, Halyna Kozak, Jakub Holovsky, Anna Artemenko, Martin Hulman, Viera Skakalova, Dong Su Lee, Alexander Kromka, Diamond/carbon nanotube composites: Raman, FTIR and XPS spectroscopic studies, Carbon 111, 54-61 (2017).

Toma Susi, Viera Skákalová, Andreas Mittelberger, Peter Kotrusz, Martin Hulman, Timothy J. Pennycook, Clemens Mangler, Jani Kotakoski & Jannik C. Meyer Computational insights and the observation of SiC nanograin assembly: towards 2D silicon carbide, Scientific Reports 7, 4399 (2017)

Laura Guardia, Loreto Suárez, Nausika Querejeta, Viliam Vretenár, Peter Kotrusz, Viera Skákalová and Teresa A. Centeno, Biomass waste-carbon/reduced graphene oxide composite electrodes for enhanced supercapacitors, *Electrochimica Acta* 298, 910-917 (2019),

Yongping Liao, Kimmo Mustonen, Semir Tulic, Viera Skakalova, Sabbir A Khan, Patrik Laiho, Qiang Zhang, Changfeng Li, Mohammad RA Monazam, Jani Kotakoski, Harri Lipsanen, Esko I Kauppinen, Enhanced Tunneling in a Hybrid of Single-Walled Carbon Nanotubes and Graphene, *ACS Nano* 13, 10, 11522-11529 (2019)

### **Uplatnenie výsledkov projektu**

Výsledky projektu významne prispeli k porozumeniu mechanizmov transformácie povrchov diamantu na grafiticke štruktúry. Je to nevyhnutnou podmienkou k optimalizácie procesov, kde bude grafén priamo vytvorený z povrchovej vrstvy diamantu. Grafén pokrývajúci diamantovú vrstvu môže slúžiť ako vodivý kanál s riadenou hustotou nosičov náboja v polom riadenom tranzistore, kde diamantový substrát bude slúžiť ako vysoko kvalitne dielektrikum. Takéto elektronické prvky sľubujú niekoľko vynikajúcich vlastností: extrémne vysoká pohyblivosť náboja v graféne, vysoká dielektrická konštanta diamantu, a žiadne znečistenie rozhrania inými chemickými prísadami, pretože štruktúry oboch materiálov pozostávajú výlučne z atómov uhlíka.

Výsledky projektu tiež ukázali, že v prípade nanokryštalického diamantu rasteného v plazme na kremíkovom substráte za určitých podmienok katalytické častice spôsobujú špecificky prieraz a takýto elektronický prvok môže fungovať ako odporový spínač.

Posledné výsledky projektu poskytujú detailný obraz o atomárnej štruktúre grafitizovaného monokryštálu diamantu. Tu sa ukázala nesmierna citlivosť na orientáciu povrchovej vrstvy a na tomto základe bude možné v budúcnosti postaviť stratégiu prípravy elektronických prvkov na baze uhlíka.

The results of the project significantly contributed to understanding the mechanisms of conversion of the diamond surfaces into graphitic phase. This is the necessary condition for optimization of the processes, where graphene will be produced directly from the surface layer of diamond. Graphene covering diamond could serve as a conductive channel with controlled density of carriers in a field effect transistor where diamond will play a role of a high quality dielectric. Such electronic devices promise a few outstanding properties: extraordinarily high charge mobility in graphene, high dielectric constant of diamond, combine with no contamination of the interface from other elements or chemical impurities, since both structures contain carbon only.

The project results also demonstrated that, in the case of nanocrystalline diamond layers grown in plasma on the silicon substrate, at particular conditions could lead to an electrical breakdown, and such a device can function as a resistive switch.

The latest project results provide a detail picture of the atomic structure of graphitized single crystal diamond. It reveals a great sensitivity to orientation of the surface layer and, on this basis, it will be possible in the future to develop a strategy to fabricate electronic devices based on graphene.

### **Súhrn výsledkov riešenia projektu a naplnenia cieľov projektu v slovenskom jazyku (max. 20 riadkov)**

o Pre grafitizovanie povrchu diamantu sme použili katalytickú transformáciu diamantového povrchu pomocou Ni, pričom pre tento proces boli vybrané nanokryštalické vrstvy diamantu na kremíkovom substráte, ako aj monokryštály diamantu v rôznych orientáciách

o Pre charakterizáciu grafitizovaných vzoriek diamantu sme využili rozlične spektroskopické a mikroskopické metódy a merania elektrickej vodivosti.

o V prípade nanokryštalického diamantu skúmanie atomárnej štruktúry pomocou HRTEM/STEM poskytlo dôkaz o tom, že grafické vrstvy hlavne rastu vo vnútri kanálov, ktoré vyhlbili Ni častice medzi diamantovými zrnami.

o Meranie medzirovinných vzdialeností medzi grafiticou vrstvou a diamantom v HRTEM snímkach odhalilo kovalentne viazane grafické roviny ku povrchu diamantu na rozhraní, ktoré boli usporiadané v kolmom smere.

o V prípade monokryštalického diamantu formovanie grafitických vrstiev kriticky závisí od kryštalografickej orientácie povrchu diamantu: grafické roviny boli buď orientované kolmo na povrch alebo rovnobežne s povrchom diamantu.

o Elektrický transport meraný vo vybraných vzorkách grafitizovaného diamantu zreteľne koreloval s pozorovanou atomárnou štruktúrou.

**Súhrn výsledkov riešenia projektu a naplnenia cieľov projektu v anglickom jazyku (max. 20 riadkov)**

o To graphitize the diamond surface, we used the catalytic transformation of the diamond surface with Ni, and for this process nanocrystalline diamond layers on a silicon substrate were selected, as well as diamond single crystals in different orientations.

o We used various spectroscopic and microscopic methods and measurements of electrical conductivity to characterize graphitized diamond samples.

o In the case of nanocrystalline diamond, examination of the atomic structure by HRTEM / STEM provided evidence that the graphitic layers mainly grow inside the channels that dug Ni particles between the diamond grains.

o Measurement of the interplanar distances between the graphitic layer and the diamond in HRTEM images revealed covalently bonded graphitic planes to the diamond surface at the interface, which were arranged in a perpendicular direction.

o In the case of a monocrystalline diamond, the formation of graphitic layers critically depends on the crystallographic orientation of the diamond surface: the graphitic planes were either oriented perpendicular to the surface or parallel to the surface of the diamond.

o The electrical transport measured in selected graphitized diamond samples was clearly correlated with the observed atomic structure.