

Об оценках температуры плавления графеноподобных соединений

© С.Ю. Давыдов[¶]

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук,
194021 Санкт-Петербург, Россия
Санкт-Петербургский национальный исследовательский университет
информационных технологий, механики и оптики,
197101 Санкт-Петербург, Россия

(Получена 6 апреля 2015 г. Принята к печати 10 апреля 2015 г.)

Обсуждаются три подхода к определению температуры плавления, понимаемой как температура термической неустойчивости двумерной гексагональной структуры: 1) приближение Найи, Изери и Ишии; 2) критерий Линдемманна; 3) критерий Борна. Для количественных оценок используется метод связывающих орбиталей Харрисона. Рассмотрены графен, силицен, германен и 12 соединений A_4V_4 и A_3V_5 . Показано, что критерии Линдемманна и Борна приводят к близким и более реальным результатам, чем приближение Найи, Изери и Ишии. Для грубой оценки „объемной“ и „поверхностной“ температур плавления предлагаются соответственно следующие выражения: $T_b \sim 10^4 K/a^2$ и $T_s \sim 2T_b/3$, где расстояние между ближайшими соседями a задается в Å.

1. Введение

Расчет температуры плавления является одной из непреходящих задач теории твердого тела, подходы к решению которой весьма разнообразны [1–4]. Одним из таковых является определение температуры термической неустойчивости поверхности кристалла, понимаемой как температура начала плавления массивного образца. Именно такой сценарий процесса плавления рассматривался Мацубарой с сотр. для одномерной модели и Г.Ц.К., и О.Ц.К. металлов [5–9]. При этом сама температура плавления оказывалась сильно завышенной [8], но тенденция ее изменения в ряду металлов отражала экспериментальные результаты [9].

Интерес к „поверхностному плавлению“ и плавлению низкоразмерных объектов значительно возрос в связи с исследованиями термоупругих свойств графена [10,11]. В настоящей работе теория Мацубары будет использована для оценки температур плавления однослойного графена и других теоретически возможных двумерных гексагональных структур. Так как в настоящее время какие-либо экспериментальные данные о температуре плавления графена (не говоря о других структурах) отсутствуют, мы ограничимся здесь лишь самыми простыми оценками. Более того, исходя из того обстоятельства, что теоретические оценки дают сильно завышенные значения температур плавления, мы ограничимся оценками относительными, так как главная цель настоящей работы состоит в том, чтобы выяснить, как температура плавления меняется в ряду двумерных гексагональных соединений A_4V_4 и A_3V_5 .

2. Приближение Найи–Изери–Ишии

В работе [8] Найи, Изери и Ишии предложили простую формулу для оценки температуры плавления, кото-

рая в слегка обобщенном виде может быть записана как

$$T_{b(s)} = \gamma \frac{z_{b(s)} D_{b(s)}}{ek_B}, \quad (1)$$

где $T_{b(s)}$ — объемная (поверхностная) температура плавления, $D_{b(s)}$ — глубина потенциальной ямы в потенциале Морзе для объемной (поверхностной) двухатомной связи, $z_{b(s)}$ — число ближайших соседей для объемного (поверхностного) атома, k_B — постоянная Больцмана, e — основание натурального логарифма, γ — масштабный множитель (см. далее). При этом предполагалось, что колебания атомов изотропны, а амплитуды этих колебаний много меньше постоянной решетки. Для двумерной структуры это означает, что оценка (1) может быть применена только для атомных смещений, лежащих в плоскости. В дальнейшем формулу (1) будем называть приближением Найи–Изери–Ишии.

Рассматривая графеновый лист конечных размеров и пренебрегая для простоты релаксацией связей граничных атомов, т.е. полагая $D_s \approx D_b$, получим

$$\frac{T_s}{T_b} = \frac{z_s}{z_b} = \frac{2}{3}. \quad (2)$$

Для однолистного графена (Gr) принимаем за реперные теоретические значения температур плавления $T_s(\text{Gr}) = 3400 \text{ K}$ [12,13] и $T_b(\text{Gr}) = 4900 \text{ K}$ [14] (см. обсуждение этих результатов в [11]). Отношение $T_s(\text{Gr})/T_b(\text{Gr}) \approx 0.69$, что отлично согласуется с оценкой (2). Однако сами величины T_s и T_b , оцененные по формуле (1), превосходят вышеприведенные реперные температуры более чем на порядок. Действительно, если, как и в работе [9], положить $\gamma = 1$ и принять $D_b = 6 \text{ эВ}$ [15], получим $T_b(\text{Gr}) \approx 7.7\gamma(\text{Gr}) \cdot 10^4 \text{ K}$. Если же считать $D_b = |E_{\text{bond}}(\text{Gr})|$, где энергия σ -связи $|sp^2$ -орбиталей соседних атомов углерода в рамках метода связывающих орбиталей Харрисона [16–18] равна $E_{\text{bond}} = -2V_2/3$ ($V_2(>0)$ — ковалентная энергия — см. далее), то получим $D_b \approx 8.21 \text{ эВ}$, что дает

[¶] E-mail: Sergei_Davydov@mail.ru

$T_b(\text{Gr}) \approx 10.5\gamma(\text{Gr}) \cdot 10^4 \text{ К}$. Отметим, что приведенные оценки D_b вполне реальны, так как энергии связи алмаза и графита приблизительно равны 7.2 эВ [19].¹ Таким образом, при использовании (1) и теории Харрисона следует полагать $\gamma(\text{Gr}) \sim 0.05$.

Были предприняты попытки модификации выражения (1). Так, например, в работе [9], где в явном виде учитывались ангармонические эффекты, для T_b было предложено более сложное выражение. Это выражение, однако, можно свести к формуле (1), положив $\gamma \approx 0.885$ и, главное, заменив координационное число z на эффективное число ближайших соседей ξ , равное 2 и 4 соответственно для Г.Ц.К. ($z = 12$) и О.Ц.К. ($z = 8$) металлов. Мы полагаем, что для двумерной гексагональной структуры замена z на ξ неприменима. Далее, во всех цитированных работах Мацубары и соавт. использовался потенциал Морзе, не слишком подходящий для описания ковалентных связей. В работе [20] был выбран значительно более сложный модельный потенциал, с помощью которого в рамках различных расчетных схем были получены значения $T_b(\text{Gr}) = 9730\text{--}12\,840 \text{ К}$. Таким образом, путем перечисленных усложнений радикальных улучшений теории добиться не удалось. Поэтому для графеноподобных соединений мы будем использовать выражение (1), но лишь для относительных оценок типа (2).

В работе [18] было показано, что в пренебрежении металличностью² энергия двухэлектронной связи может быть представлена в виде

$$E_{\text{bond}} = -\frac{2V_2}{\alpha_c} \left(1 - \frac{2}{3}\alpha_c^2\right). \quad (3)$$

Здесь α_c есть полярность связи по Харрисону [16,17], ковалентная энергия $V_2 = \eta_2(\hbar^2/ma^2)$, где для sp^2 -орбиталей, образующих σ -связь, $\eta_2 = 3.26$ [17], m — масса свободного электрона, \hbar — приведенная постоянная Планка. Здесь и в дальнейшем мы игнорируем релаксацию и реконструкцию „поверхности“, в качестве которой выступают края двумерного листа.

Тогда для соединений АВ запишем

$$\xi \equiv \frac{T_{b,s}(\text{AB})}{T_{b,s}(\text{Gr})} = \frac{E_{\text{bond}}(\text{AB})}{E_{\text{bond}}(\text{Gr})}, \quad (4)$$

где мы положили $\gamma(\text{Gr}) = \gamma(\text{AB})$. В табл. 1 и 2 приведены исходные данные и результаты расчета полярности связи α_c и ковалентной энергии V_2 , а на рис. 1 представлена зависимость отношения ξ от ионности межатомных связей по Филлипсу $f_i = 1 - \alpha_c^3$ (см. [15]). Из рисунка

¹ Заметим для сравнения, что для наиболее тугоплавких металлов (Мо и W) значения D_b не превышают 1 эВ. Несмотря на это, для металлов с О.Ц.К. и Г.Ц.К. структурами значения T_b , рассчитанные по формуле (1) при $\gamma = 1$, на порядок превышают экспериментальные [8].

² Мы пренебрегаем металличностью, т.е. полагаем $V_1 = 0$ в [18], не только для простоты. Дело в том, что в работах Мацубары и др. используются парные (двухчастичные) потенциалы. Учет же металличности эквивалентен выходу за пределы двухчастичного взаимодействия [16].

Таблица 1. Расстояния между ближайшими соседями a , ковалентные энергии V_2 , полярности связи по Харрисону α_c , отношения $\tau = T_b(\text{AB})/T_b(\text{Gr})$ и ионности связей по Филлипсу f_i для соединений IV–IV

Соединение	Gr	Sl	Gm	SiC	GeC	GeSi
$a, \text{ \AA}$	1.42	2.23	2.31	1.79	1.83	2.28
$V_2, \text{ эВ}$	12.32	5.00	4.66	7.75	7.42	4.78
α_c	1	1	1	0.97	0.97	1
τ	1	0.41	0.38	0.63	0.60	0.39
f_i	0	0	0	0.09	0.09	0

Примечание. Gr — графен, Sl — силицен, Gm — германен.

Таблица 2. Расстояния между ближайшими соседями a , ковалентные энергии V_2 , полярности связи по Харрисону α_c , отношения $\tau = T_b(\text{AB})/T_b(\text{Gr})$ и ионности связей по Филлипсу f_i для соединений III–V

Соединение	BN	BP	BAs	AlN	AlP	AlAs	GaN	GaP	GaAs
$a, \text{ \AA}$	1.45	1.87	1.93	(1.78)	2.28	2.34	(1.82)	2.23	2.29
$V_2, \text{ эВ}$	11.82	7.10	6.67	7.84	4.78	4.54	7.50	5.00	4.74
α_c	0.95	0.98	0.99	0.83	0.87	0.88	0.82	0.89	0.90
τ	0.96	0.58	0.54	—	—	—	—	—	—
f_i	0.14	0.06	0.03	0.43	0.34	0.31	0.45	0.295	0.27

Примечание. Значения длин связи a , стоящие вне скобок, взяты из работы [21], значения в скобках — из [22].

следует, что имеются четыре группы соединений: 1) с нулевой ионностью (графен, силицен, германен и GeSi, у которого $\alpha_c \approx 1$); 2) с малой ионностью (BAs, BP, SiC, GeC); 3) с промежуточной ионностью (GaAs, GaP, AlAs,

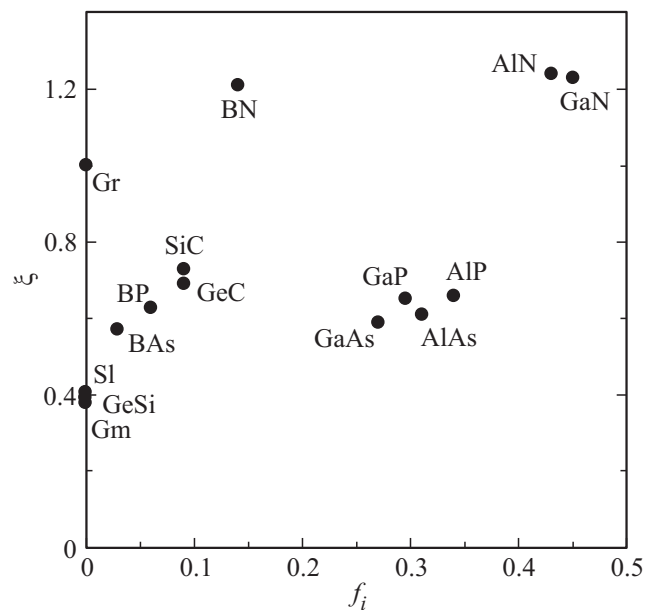


Рис. 1. Зависимость отношения $\xi = T_{b,s}(\text{AB})/T_{b,s}(\text{Gr})$ от ионности АВ-связи по Филлипсу f_i (Gr — графен, Sl — силицен, Gm — германен).

AlP); 4) соединения III–N (BN, AlN, GaN). Интересно отметить, что, во-первых, разброс значений ξ внутри групп максимален для первой группы и минимален для четвертой. Во-вторых, только для соединений III–N отношения $\xi > 1$, причем сами значения ξ довольно слабо зависят от конкретного катиона. И наконец, величины ξ для второй и третьей групп близки.

Отметим, что для гомополярных структур выражение (4) переходит в

$$\bar{\xi} = \left(\frac{a(\text{Gr})}{a(\text{AB})} \right)^2, \quad (5)$$

где $a(A)$ — расстояние между ближайшими соседями в структуре AA. Так как для силицена и германена $a(A) > a(\text{Gr})$, ясно, что $\xi < 1$. То же можно сказать и о практически гомополярном соединении GeSi.

3. Критерий Линдемманна и температура Дебая

Согласно критерию Линдемманна [1,3,4], существует максимальное значение отношения

$$\Delta_{b(s)} = a^{-1} \sqrt{\langle u_{b(s)}^2 \rangle}, \quad (6)$$

где $\langle u_{b(s)}^2 \rangle$ — среднее квадратичное смещение (СКС) объемного (поверхностного) атома, a — межатомное расстояние, которое и определяет температуру плавления $T_{b(s)}$ для данной структуры. Аналогично [5], для высоких температур положим $\langle u_{b(s)}^2 \rangle = k_B T_{b(s)} / z_{b(s)} k_0$, где $k_0 = (\partial^2 E_{\text{bond}} / \partial a^2)$ есть силовая константа центрального взаимодействия, которая, согласно [19], имеет вид

$$k_0 = \frac{4}{a^2} \alpha_c V_2 (2\alpha_c^2 - 1), \quad (7)$$

где мы вновь пренебрегли металличностью и связали СКС только с изменением длины АВ-связи.³ С учетом (1) и (3) имеем

$$\Delta_{b,s}(\text{AB}) = \frac{1}{\alpha_c(\text{AB}) \sqrt{2e/\gamma(\text{AB})}} \sqrt{\frac{1 - 2\alpha_c^2(\text{AB})/3}{2\alpha_c^2(\text{AB}) - 1}}. \quad (8)$$

Теперь введем параметр $\delta = \Delta_{b,s}(\text{AB})/\Delta_{b,s}(\text{Gr})$, определяемый с учетом (8) выражением

$$\delta = \frac{\sqrt{3}}{\alpha_c(\text{AB})} \sqrt{\frac{1 - 2\alpha_c^2(\text{AB})/3}{2\alpha_c^2(\text{AB}) - 1}}, \quad (9)$$

где, как и в (4), мы положили $\gamma(\text{Gr}) = \gamma(\text{AB})$, так что $\Delta(\text{AB}) = \delta \sqrt{\gamma(\text{Gr})/6e}$. Легко видеть, что при $\alpha_c = 1$

³ В методе Харрисона нецентральное взаимодействие связано с взаимной разориентацией гибридных $|sp^k\rangle$ -орбиталей ($k = 1, 2, 3$), входящих в σ -связь [16]. При этом межатомные расстояния не меняются. Как следствие, СКС $\langle u_{b(s)}^2 \rangle$ определяет здесь по сути изменение длины связи АВ, а не собственные смещения атомов А и В.

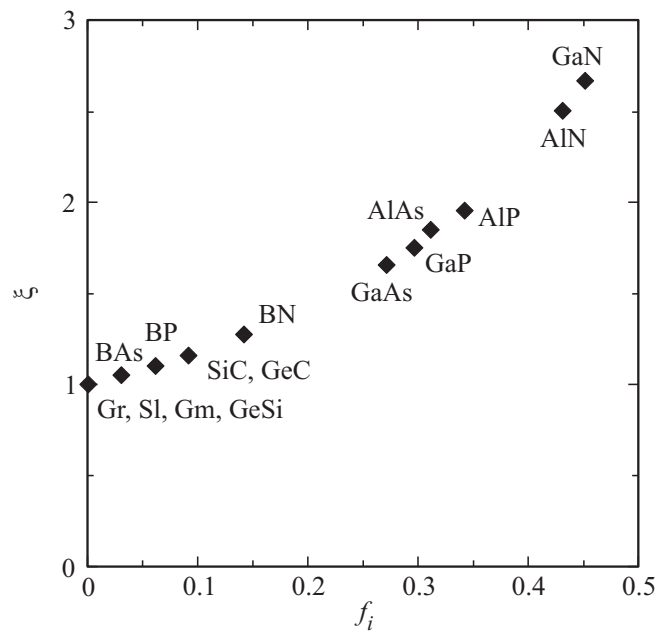


Рис. 2. Зависимость отношения $\delta = \Delta(\text{AB})/\Delta(\text{Gr})$ от ионности АВ-связи по Филлипсу f_i (Gr — графен, Si — силицен, Gm — германен).

имеем $\delta = 1$. Если принять за основу полученные в [20] для графена значения $\Delta(\text{Gr}) \approx 0.14-0.26$, то получим $\gamma'(\text{Gr}) \approx 0.3-1.1$, что в среднем на порядок выше найденного в разд. 2 значения $\gamma(\text{Gr}) \sim 0.05$. Зависимость параметра δ от ионности f_i представлена на рис. 2. Из рис. 2 следует, что, в отличие от графика $\xi(f_i)$, функция $\delta(f_i)$ монотонно возрастает с увеличением ионности связи АВ. Еще раз подчеркнем, что речь идет о СКС $\langle u_{\parallel}^2 \rangle$, лежащих в плоскости графенового листа.

По расчетам [20], при температуре плавления отношение $\chi \equiv \sqrt{\langle u_{\perp}^2 \rangle / \langle u_{\parallel}^2 \rangle} \approx 4$, где $\langle u_{\perp}^2 \rangle$ — СКС, нормальные к плоскости графенового листа. Отсюда получаем $k_0^{\parallel}/k_0^{\perp} \approx 16$, где $k_0^{\parallel} = k_0$ (7), k_0^{\perp} — силовая константа, описывающая реакцию σ -связи графенового листа на смещение атома в перпендикулярном направлении. Такое значение $k_0^{\parallel}/k_0^{\perp}$ представляется сильно завышенным. Так, например, по данным [23,24], отношение $k_0^{\parallel}/k_0^{\perp}$ (или α/α_z в обозначениях [23]) меньше 4. Тогда $\chi < 2$, что уже гораздо ближе к изотропной модели Найи–Изири–Ишии. Добавим, что для поверхностных СКС полубесконечного кристалла имеем $\chi^2 < 2$ [25]. Здесь интересно также отметить, что, по мнению авторов работы [26], нормальное СКС мало влияет на температуру плавления.

Перейдем теперь к оценкам температуры Дебая Θ . Для соединения АВ температура Дебая $\Theta(\text{AB}) \propto \sqrt{k_0(\text{AB})/M_{\text{AB}}}$, где $M_{\text{AB}} = 2M_A M_B / (M_A + M_B)$ — приведенная масса атомов А и В. Введем отношение $\theta = \Theta(\text{AB})/\Theta(\text{Gr})$, которое, с

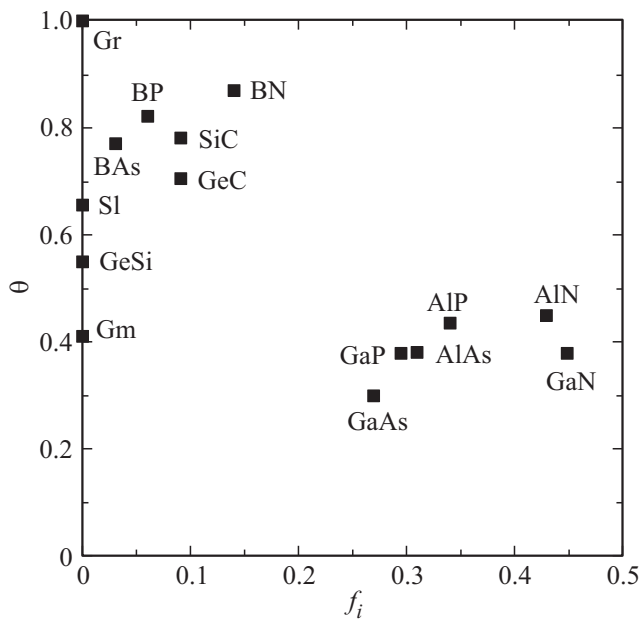


Рис. 3. Зависимость отношения $\theta = \Theta(AB)/\Theta(AB)$ от ионности АВ-связи по Филлипсу f_i (Gr — графен, SI — силицен, Gm — германен).

учетом (7), имеет вид

$$\theta = \frac{a(\text{Gr})}{a(\text{AB})} \sqrt{\alpha_c(\text{AB})[2\alpha_c^2(\text{AB}) - 1] \frac{M_{\text{Gr}}}{M_{\text{AB}}} \frac{V_2(\text{AB})}{V_2(\text{Gr})}}. \quad (10)$$

Результаты расчета представлены на рис. 3, откуда следует, что все соединения по величине параметра θ могут быть разбиты на три группы: а) с нулевой ионностью, где разброс значений максимальный; б) с малой ионностью, куда входят соединения бора и карбиды кремния и германия; в) соединения галлия и алюминия. Вообще говоря, исходя только из величины отношения θ , графен и силицен можно объединить с группой б), германен — с группой в), при этом GeSi как бы разделяет эти две расширенные группы. Такое разбиение по величине θ диктуется, главным образом, отношением $M_{\text{Ge}}/M_{\text{AB}}$.

4. Критерий Борна

Согласно критерию Борна, температура плавления твердотельной структуры определяется обращением в нуль одного из модулей сдвига. Однако ни эксперименты, ни теоретические экстраполяции не приводят к обнулению упругих модулей, хотя, согласно теории [6,7,27], характерные силовые константы при температуре T_b уменьшаются в e раз. Известно, что в квазигармоническом приближении температурная зависимость упругих постоянных c_{ij} при $T \gg \Theta$ может быть представлена в виде $c_{ij}(T) = c_{ij}(0)(1 - p_{ij}T)$, где $p_{ij} = -c_{ij}^{-1}(dc_{ij}/dT)_{T=0} > 0$ [18,28]. Тогда, полагая

$c_{ij}(T_b)/e = c_{ij}(0)$, найдем

$$T_b = (1 - e^{-1})p_{ij}^{-1}. \quad (11)$$

Интересно отметить, что аналогичный способ определения температуры плавления применялся в [29], где для металлов полагали $c_{44}(T_b) = 0.55c_{44}(0)$.

Выберем в качестве c_{ij} модуль всестороннего сжатия B и воспользуемся выражением для $B^{-1}(dB/dT) = -p_B$, полученным в [18] для двумерной гомополярной гексагональной структуры. Пренебрегая (как и выше) металличностью, получим

$$T_b = (1 - e^{-1}) \frac{2V_2}{17k_B} \quad (12)$$

или

$$T_b = \frac{21.44}{a^2} \cdot 10^3 \text{ К}, \quad (13)$$

где расстояние между ближайшими соседями a измеряется в Å. Тогда для графена получаем $T_b \approx 10630 \text{ К}$, что практически совпадает с результатами работы [20], но более чем в 2 раза превосходит значение $T_b(\text{Gr}) = 4900 \text{ К}$ [14]. Интересно отметить, что такое же двукратное превышение вычисленных температур плавления для трехмерных О.Ц.К. и Г.Ц.К. металлов по сравнению с экспериментальными значениями отмечалось в работе [9]. В принципе, так же как при записи уравнения (1), в формулу (13) можно ввести масштабный множитель $\gamma''(\text{Gr}) \sim 0.5$, который на порядок выше введенного в разд. 2 множителя $\gamma(\text{Gr})$, но вполне согласуется с приведенной в разд. 3 оценкой $\gamma'(\text{Gr}) \approx 0.3-1.1$.

Вновь перейдем к относительным величинам, введя параметр

$$\tau = \frac{T_b(\text{AB})}{T_b(\text{Gr})} = \left(\frac{a(\text{Gr})}{a(\text{AB})} \right)^2, \quad (14)$$

что совпадает с выражением (5). Здесь нужно подчеркнуть, что исходные положения, приводящие к совпадающим формулам (5) и (14), существенно различаются: если формула (5) основывается на приближении Найи, Изери и Ишии (1), то формула (14) возникает из модифицированного критерия Борна (13). В обоих случаях, однако, для численных оценок используется метод связывающих орбиталей Харрисона.

Результаты расчета τ представлены в табл. 1 и 2 для графена, силицена, германена и соединений с высокой полярностью связи ($\alpha_c \geq 0.95$). Из таблиц следует, что по параметру τ все рассмотренные соединения делятся на три группы: графен и нитрид бора ($\tau \sim 1$); SiC, GeC, BP и BAs ($\tau \sim 0.5-0.6$); силицен, германен и GeSi ($\tau \sim 0.4$).

5. Заключительные замечания

Итак, мы рассмотрели три различных подхода к грубой, но простой оценке температуры плавления гек-

сагональных двумерных структур. Оказалось, что, по-видимому, критерии Линдемманна и Борна дают более достоверные результаты, чем приближение Найи–Изири–Ишии.⁴ Отсюда следует, что термическая неустойчивость вызывается не разрывом межатомных связей, а ослаблением („смягчением“) их упругости.

Для быстрой оценки „объемной“ и „поверхностной“ температур плавления ковалентных структур (т.е. термической неустойчивости соответственно внутренней области и краев двумерного листа) предлагаются следующие формулы:

$$T_b \sim \frac{10^4 \text{ K}}{a^2}, \quad T_s \sim \frac{2}{3} T_b, \quad (15)$$

где расстояние между ближайшими соседями a задается в Å.

Может быть задан вопрос, почему $T_b(\text{Gr}) = 4900 \text{ K}$ [14] и $T_s(\text{Gr}) = 3400 \text{ K}$ [12,13] принимаются за реперные температуры. Что касается $T_b(\text{Gr})$, то приведенное значение хорошо коррелирует с температурами плавления графита (4000 K [30]), фуллеренов (4000 K [31]) и нанотрубок (4800 K [32]) (см. также обсуждение в [11]). Со значением $T_s(\text{Gr})$ дело обстоит несколько сложнее: так, например, по данным работы [33], отслоение графитовых листов начинается при 3000 K, а в соответствии с работой [34] на зигзагообразном крае графенового листа реконструкция начинается при 2800 K (здесь интересны также исследования термической устойчивости малых углеродных кластеров [35]). Подчеркнем, что все приведенные температурные значения (за исключением [33]) получены теоретически, в основном, методами молекулярной динамики. Какие-либо экспериментальные данные отсутствуют даже для графена. Поэтому делать окончательные выводы о справедливости тех или иных подходов в такой ситуации было бы опрометчиво.

В заключение несколько слов об общей проблеме устойчивости двумерных структур. Согласно классическим работам Пайерлса, Ландау [36] и Мермина [37], двумерная периодическая структура неограниченной площади существовать не может, так как тепловые флуктуации ее разрушают. Однако в случае конечной площади существование структурного упорядочения уже допускается [36]. Следует также подчеркнуть, что результаты работ [36,37] получены в гармоническом приближении, что заведомо недостаточно для описания кристалла при высоких температурах. Более того, в [36,37] какие-либо смещения атомов в нормальном по отношению к листу направлении исключались. В графене подобные колебания, естественно, существуют. Более того, в свободном графене имеются структурные искажения (ripples), вызванные нормальными смещениями атомов углерода, которые, строго говоря, выводят графен из двумерного состояния. Таким образом, к реальному графену выводы работ [36,37] впрямую не относятся.

⁴ В свете этого возникают определенные сомнения в том, что температуры плавления соединений III–N могут превышать температуру плавления графена (рис. 1).

Работа выполнена частично при государственной финансовой поддержке ведущих университетов Российской Федерации (субсидия 074-U01).

Список литературы

- [1] С.М. Стишов. УФН, **114** (1), 3 (1974).
- [2] K.J. Strandburg. Rev. Mod. Phys., **60** (1), 162 (1988) (Erratum: Rev. Mod. Phys., **61** (3), 747 (1988)).
- [3] J.G. Dash. Rev. Mod. Phys., **71** (5), 1737 (1999).
- [4] Q.S. Mei, K. Lu. Prog. Mater. Sci., **52** (8), 1175 (2007).
- [5] T. Matsubara. J. Phys. Soc. Jpn., **40** (2), 603 (1976).
- [6] T. Matsubara, K. Kamiya. Prog. Theor. Phys., **58** (3), 767 (1977).
- [7] T. Hama, T. Matsubara. Prog. Theor. Phys., **59** (5), 1407 (1978).
- [8] S. Naya, M. Iziri, T. Ishii. Prog. Theor. Phys., **60** (5), 1604 (1978).
- [9] Y. Aikawa, K. Fujii. Materials Transactions, **50** (2), 249 (2009).
- [10] А.В. Елецкий, И.М. Искандарова, А.А. Книжник, Д.Н. Красиков. УФН, **181** (3), 233 (2011).
- [11] А.Е. Галашев, О.Р. Рахманова. УФН, **184** (10), 1045 (2014).
- [12] X. Li, X. Wang, L. Zhang, S. Lee, H. Dai. Science, **319**, 1229 (2008).
- [13] J. Hu, X. Ruan, Y.P. Chen. Nano Lett., **9** (7), 2730 (2009).
- [14] K.V. Zakharchenko, A. Fasolino, J.H. Los, M.I. Katsnelson. J. Phys.: Condens. Matter, **23**, 202202 (2011).
- [15] А.В. Елецкий. УФН, **177** (3), 233 (2007).
- [16] У. Харрисон. *Электронная структура и свойства твердых тел* (М., Мир, 1983) т. 1, с. 383.
- [17] W.A. Harrison. Phys. Rev. B, **27** (6), 3592 (1983).
- [18] С.Ю. Давыдов, О.В. Посредник. ФТТ, **57** (4), 819 (2015).
- [19] В.В. Бражкин. УФН, **179** (4), 393 (2009).
- [20] Y. Hu, B. Wang. AIP Advancics, **3**, 052101 (2013).
- [21] T. Suzuki, Y. Yokomizo. arXiv: 1004.3638.
- [22] G. Mukhopadhyay, H. Behera. arXiv: 1210.3308.
- [23] Л.А. Фальковский. ЖЭТФ, **132** (8), 446 (2007).
- [24] Л.А. Фальковский. ЖЭТФ, **142** (3), 560 (2012).
- [25] R.F. Wallis, A.A. Maradudin, L. Dobrzyanski. Phys. Rev. B, **15** (12), 5681 (1977).
- [26] J. Dietel, H. Kleinert. Phys. Rev. B, **79**, 075412 (2009).
- [27] L. Pietronero, E. Tosatti. Sol. St. Commun., **32** (3), 255 (1979).
- [28] С.П. Никаноров, Б.К. Кардашов. *Упругость и дислокационная неупругость кристаллов* (М., Наука, (1985).
- [29] Y.P. Varshni. Phys. Rev. B, **2** (10), 3952 (1970).
- [30] A.I. Savvatimskiy. Carbon **43** (6), 1115 (2005).
- [31] S.G. Kim, D. Tomanek. Phys. Rev. Lett. **72** (15), 2418 (1994).
- [32] K. Zhang, G.M. Stocks, J. Zhong. Nanotechnology, **18**, 285703 (2007).
- [33] F. Colonna, J.H. Los, A. Fasolino, E.J. Meijer. Phys. Rev. B, **80**, 134103 (2009).
- [34] G.-D. Lee, C.Z. Wang, E. Yoon, N.-M. Hwang, K.M. Ho. Phys. Rev. B, **81**, 195419 (2010).
- [35] S.K. Singh, M. Neek-Amal, F.M. Peeters. arXiv: 1304.6010.
- [36] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. *Статистическая физика* (М., Наука, 1976).
- [37] N.D. Mermin. Phys. Rev., **176**, 250 (1968).

Редактор А.Н. Смирнов

On the estimations of the melting temperature for the graphene-like compounds

S.Yu. Davydov

Ioffe Institute,
194021 St. Petersburg, Russia
St. Petersburg National Research University
of Information Technologies, Mechanics and Optics,
197101 St. Petersburg, Russia

Abstract The problem on melting temperature for two-dimensional hexagonal structure considered as the temperature at which thermo-instability occurs are discussed within 3 approaches: (i) Naya–Iziri–Ishii approximation, (ii) Lindemann criterion, and (iii) Born criterion. For the numerical estimations Harrison's bond orbital model is used. Graphene, silicone, germanene and 12 other IV–IV and III–V compounds are considered. It is shown that the Lindemann and Born criterions give similar and more realistic results than the Naya–Iziri–Ishii approximation. For the crude estimations of the „volume“ and „surface“ melting temperatures the following expressions are proposed: $T_b \sim 10^4 \text{ K}/a^2$ and $T_s \sim 2T_b/3$, where a is the nearest-neighbor distance in Å.