

10,12

## Упругие и акустические характеристики углеродного 3D-супракристалла (C)<sub>СТО</sub>

© Р.А. Браже, А.И. Кочаев

Ульяновский государственный технический университет,  
Ульяновск, Россия

E-mail: a.kochaev@gmail.com

(Поступила в Редакцию 11 января 2012 г.)

С использованием методов *ab initio* и связывающих орбиталей Харрисона вычислены силовые константы центрального и нецентрального взаимодействий атомов углерода в 3D-супракристалле (C)<sub>СТО</sub>. Вычислены компоненты тензора упругих жесткостей и скорости распространения упругих волн в этом супракристалле. Полученные результаты близки по своим значениям к соответствующим характеристикам алмаза.

Работа поддержана правительством Ульяновской области.

Наноаллотропные формы углерода: фуллерены, нанотрубки, графен и др. привлекают внимание исследователей в связи с их необычными механическими, электрическими и термическими свойствами, имеющими практическое применение [1]. В работе [2] показана возможность существования нового класса 2D- и 3D-наноаллотропов — так называемых супракристаллов, в узлах кристаллической решетки которых атомы замещены на их симметрично организованные комплексы. В частности, в узлах кубической супрарчейки 3D-супракристалла атомы могут образовывать октаэдр, усеченный октаэдр и ромбокубооктаэдр. Из атомов углерода может быть построен лишь один тип 3D-супракристалла — (C)<sub>СТО</sub> (рис. 1). Здесь первый индекс „C“ за скобками определяет вид супрарчейки (cubic — кубическая). Последующие индексы обозначают вид многогранника, образующего узловую элемент (truncated octahedron — усеченный октаэдр). Для образования химических связей в других 3D-супракристаллах требуются атомы, могущие принимать валентность, равную пяти и шести.

В работах [3,4] нами были исследованы упругие и акустические характеристики 2D-супракристаллов, составленных из атомов углерода, находящихся в состояниях с  $sp^2$  или  $sp^3$  гибридизацией. Здесь мы распространяем предложенную методику на 3D-супракристаллы. Ее основы были заложены в работах [5–9] и в модифицированном варианте использованы в [3,4] для расчета упругих свойств 2D-супракристаллов.

В супракристалле (C)<sub>СТО</sub> каждый атом углерода имеет четыре ближайших соседа ( $sp^3$ -гибридизация), и его ковалентная энергия может быть вычислена по формуле [7]

$$V_2 = -3.22 \frac{\hbar^2}{m_0 l^2}, \quad (1)$$

где  $\hbar$  — приведенная постоянная Планка,  $m_0$  — масса свободного электрона,  $l$  — длина связи. Энергия метал-

лизации [7] находилась как

$$|V_1| = \sqrt{\frac{1}{15} [|V_2|(3|E_{\text{atom}}| - 4|V_2|)]^{\frac{1}{2}}}, \quad (2)$$

где  $E_{\text{atom}}$  — энергия на один атом, вычисленная для структуры (C)<sub>СТО</sub> в [2] на основе теории функционала плотности с использованием программного пакета Abinit-5.8.4.

Силовые константы для центрального ( $\alpha$ ) и нецентрального ( $\beta$ ) взаимодействий атомов углерода можно найти как в [7]

$$\alpha = \frac{2}{l^2} |V_2| \left[ 1 - \frac{15}{4} \left( \frac{V_1}{V_2} \right)^2 \right], \quad (3)$$

$$\beta = \frac{\lambda}{3} \alpha, \quad (4)$$

где параметр  $\lambda$  выражается через матричные элементы оператора ковалентной энергии между соответствующи-

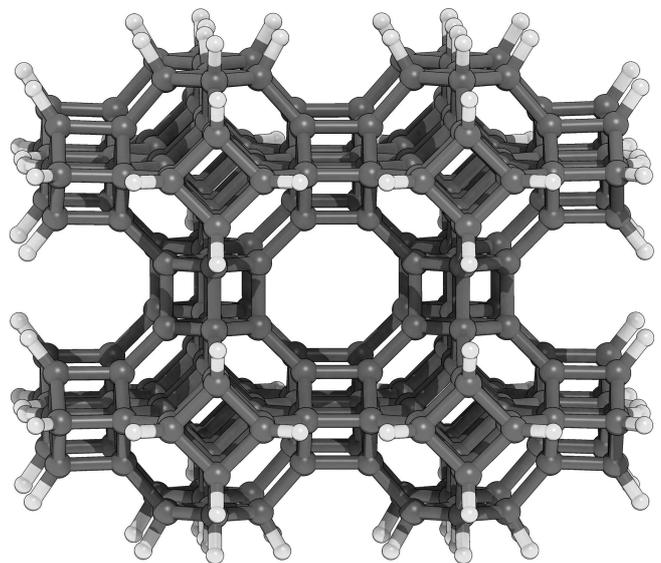
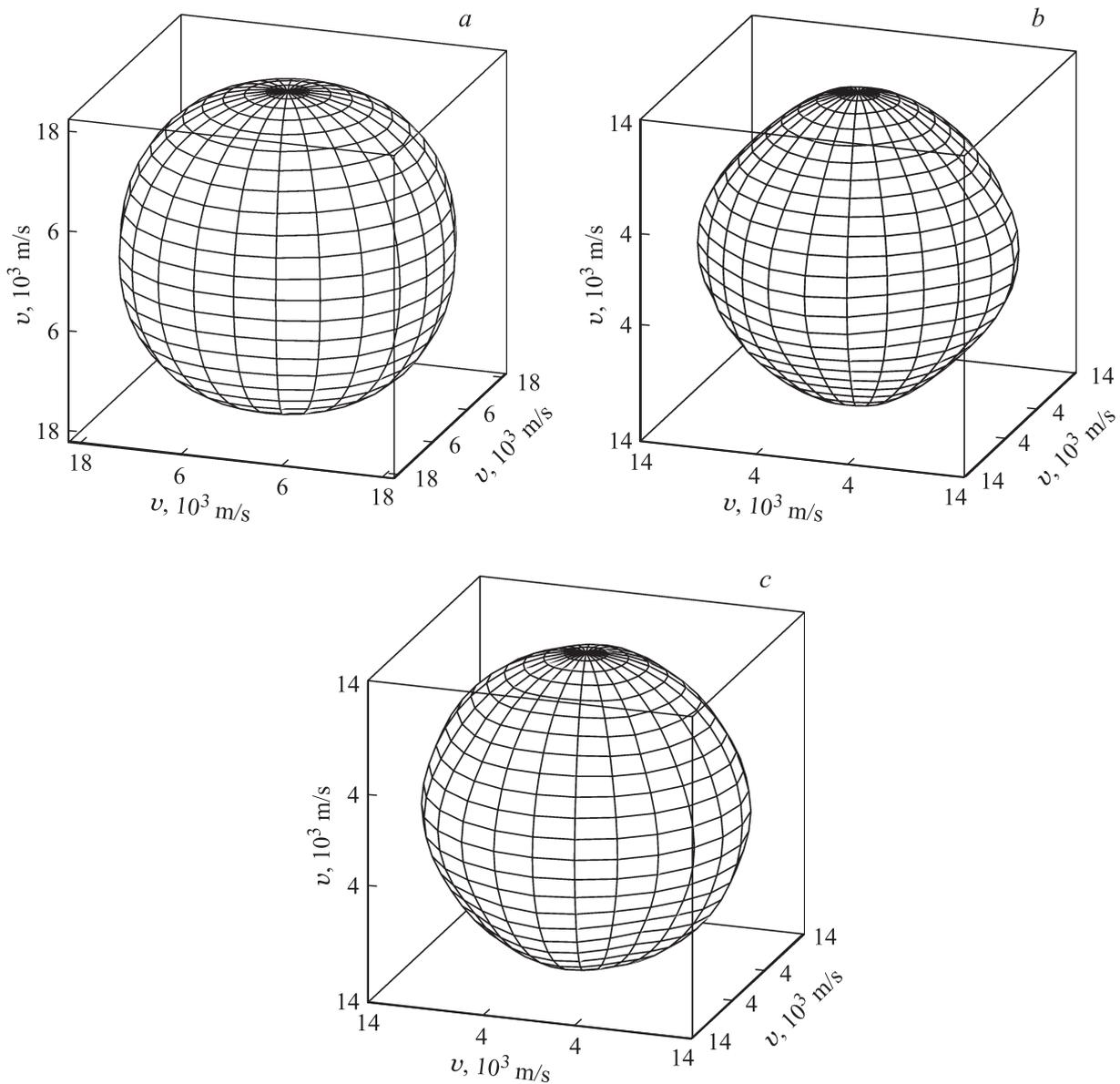


Рис. 1. Пространственная структура супракристалла (C)<sub>СТО</sub>.



**Рис. 2.** Поверхности фазовых скоростей для квазипродольной (a) и квазипоперечных (b, c) упругих волн в супракристалле (C)<sub>СТО</sub>.

ми атомными волновыми функциями  $s$ - и  $p$ -состояний. Его вычисление для супракристаллических структур вызывает значительные трудности, поэтому для углеродного кубического супракристалла (C)<sub>СТО</sub> в данной работе мы воспользовались отношением  $\beta/\alpha = 0.66$  для алмаза [10].

Выражения для компонент тензора упругих жесткостей в случае кристаллов кубической сингонии имеют вид [10]

$$c_{11} = \frac{\alpha + 3\beta}{4a}, \quad c_{12} = \frac{\alpha - \beta}{4a}, \quad c_{44} = \frac{\alpha\beta}{a(\alpha + \beta)}, \quad (5)$$

где  $4a$  — постоянная решетки.

В табл. 1 приведены расчетные значения параметров, определяемых выражениями (1)–(5), для супракристал-

ла (C)<sub>СТО</sub> в сравнении с алмазом (C). Из нее следует, что рассчитанные по нашей модели значения упругих жесткостей алмаза близки к своим экспериментально найденным значениям [11] и значениям, вычисленным Китингом [10] на основе констант  $\alpha$  и  $\beta$ , определенных Киттелем [12] из экспериментальных данных. Значения упругих жесткостей для исследуемого супракристалла (C)<sub>СТО</sub> несколько меньше в силу более слабого межатомного взаимодействия в этой структуре.

Зная упругие жесткости и плотность кристалла, можно рассчитать его акустические характеристики. На рис. 2 представлены поверхности фазовых скоростей, в общем случае, для одной квазипродольной и двух квазипоперечных упругих волн в супракристалле (C)<sub>СТО</sub>. Построение проводилось на основе модели, описанной

**Таблица 1.** Результаты расчета упругих характеристик  $(C)_{\text{СТО}}$  в сравнении с алмазом

Параметр	$C(\text{алмаз})$	$(C)_{\text{СТО}}$
$l, \text{Å}$	1.54 [7]	1.69 [2]
$4a, \text{Å}$	3.57	2.90 [2]
$ E_{\text{atom}} , \text{eV}$	15.9 [7]	13.0 [2]
$ V_2 , \text{eV}$	10.35 [7]	8.61
$ V_1 , \text{eV}$	2.08 [7]	1.62
$\alpha, \text{N/m}$	119 [7]; 129 [10]	83.6
$\beta, \text{N/m}$	78.5; 85 [10]	55.2
$c_{11}, 10^{11} \text{ Pa}$	9.93; 10.73 [10,11]	8.59
$c_{12}, 10^{11} \text{ Pa}$	1.13; 1.25 [10,11]	0.98
$c_{44}, 10^{11} \text{ Pa}$	5.30; 5.76 [10,11]	4.59

**Таблица 2.** Скорости распространения чистых мод упругих волн в супракристалле  $(C)_{\text{СТО}}$  в сравнении с алмазом

Мода	Тип волны	$c_{\text{эфф}}$	$c_{\text{эфф}}, 10^{11} \text{ Pa}$		$v, 10^3 \text{ m/s}$	
			$C$	$(C)_{\text{СТО}}$	$C$	$(C)_{\text{СТО}}$
$\beta$	$L$	$(c_{11} + 2c_{12} + 4c_{44})/3$	12.10	9.64	18.6	19.7
	$T_2, T_3$	$(c_{11} + c_{44} - c_{12})/3$	5.09	4.07	12.0	12.8
$\gamma$	$L$	$(c_{11} + c_{12} + 2c_{44})/2$	11.77	9.38	18.3	19.4
	$T_2$	$(c_{11} - c_{12})/2$	4.76	3.81	11.6	12.3
	$T_3$	$c_{44}$	5.76	4.59	12.8	13.6
$\alpha$	$L$	$c_{11}$	10.76	8.59	17.5	18.6
	$T_2, T_3$	$c_{44}$	5.76	4.59	12.8	13.6

нами в работе [13], основанной на решении уравнения Грина–Кристоффеля [14].

Чисто продольные и чисто поперечные моды отвечают направлениям, проходящим через точки экстремумов уравнений изображенных поверхностей. Это кристаллофизические направления  $\langle 001 \rangle$  ( $\alpha$ -мода),  $\langle 011 \rangle$  ( $\gamma$ -мода) и  $\langle 111 \rangle$  ( $\beta$ -мода). Значения соответствующих скоростей чисто продольных и чисто поперечных волн можно вычислить по формулам, приведенным в [15], либо численно по методике, предложенной нами в [16,17]. Соответствующие результаты приведены в табл. 2. Значение плотности  $3.51 \text{ g/cm}^3$  для алмаза взято из [11] и для супракристалла  $(C)_{\text{СТО}}$   $2.48 \text{ g/cm}^3$  — из [18].

То обстоятельство, что скорости распространения упругих волн в супракристалле  $(C)_{\text{СТО}}$  оказываются даже выше, чем в алмазе, не должно вызывать удивления. Дело в том, что при соизмеримой по сравнению с алмазом жесткости кристаллического каркаса он имеет гораздо меньшую плотность (является более рыхлым).

Отметим, что найденные значения упругих и акустических характеристик супракристалла  $(C)_{\text{СТО}}$  являются оценочными и приведены здесь для того, чтобы стимулировать интерес исследователей к синтезу этого перспективного материала.

## Список литературы

- [1] Е.А. Беленков, В.В. Ивановская, А.Л. Ивановский. Наноалмазы и родственные углеродные наноматериалы. Компьютерное материаловедение. УрО РАН, Екатеринбург (2008). 169 с.
- [2] Р.А. Браже, А.А. Каренин. Изв. вузов. Поволжский регион. Физ.-мат. науки **18**, 105 (2011).
- [3] Р.А. Браже, А.А. Каренин, А. И. Кочаев, Р.М. Мефтахутдинов. ФТТ **53**, 1406 (2011).
- [4] Р.А. Браже, А.И. Кочаев, Р.М. Мефтахутдинов. ФТТ **53**, 1614 (2011).
- [5] С.Ю. Давыдов, А.А. Лебедев, Н.Ю. Смирнова. ФТТ **51**, 452 (2009).
- [6] С.Ю. Давыдов. ФТТ **51**, 2041 (2009).
- [7] С.Ю. Давыдов. ФТТ **52**, 172 (2010).
- [8] С.Ю. Давыдов. ФТТ **52**, 756 (2010).
- [9] У. Харрисон. Электронная структура и свойства твердых тел. Т. 1. Мир, М. (1983). 381 с.
- [10] P.N. Keating. Phys. Rev. **145**, 637 (1966).
- [11] H.J. McSkimin, W.L. Bond. Phys. Rev. **105**, 116 (1957).
- [12] C. Kittel. Introduction to Solid State Physics. John Wiley & Sons, N.Y. (1956).
- [13] A.I. Kochaev, R.A. Brazhe. Acta Mechan. **222**, 193 (2011).
- [14] E.V. Christoffel. Ann. di matematica pura ed applicata. **8**, 193 (1877).
- [15] K. Brugger. J. Appl. Phys. **36**, 759 (1965).
- [16] A.I. Kochaev, R.A. Brazhe. Acta Mechan. **220**, 199 (2011).
- [17] А.И. Кочаев. Свидетельство о государственной регистрации программы для ЭВМ № 2011614305 от 31.05.2011 г.
- [18] Р.А. Браже, А. А. Каренин, И.С. Оленин. Радиоэлектронная техника. Межвуз. сб. науч. тр. УЛГТУ, Ульяновск (2010). С.156.