

17,16

Расчет структуры углеродных кластеров на основе фуллереноподобных молекул C_{24} и C_{48}

© К.А. Крылова¹, Ю.А. Баимова^{1,3}, С.В. Дмитриев^{1,2}, Р.Р. Мулюков¹

¹ Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, Уфа, Россия

² Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск, Россия

³ УФМ УРО РАН, Екатеринбург, Россия [1mm] E-mail: julia.a.baimova@gmail.com

(Поступила в Редакцию 2 июня 2015 г.)

В окончательной редакции 1 июля 2015 г.)

Методом молекулярно-динамического моделирования исследованы равновесные структуры углеродных кластеров, полученных сшивкой валентными связями углеродных каркасов двух фуллереноподобных молекул. В свободном фуллерене атомы углерода образуют химическую связь по типу sp^2 -гибридизации, а на месте шивки фуллеренов образуется связь по типу sp^3 -гибридизации, что и определяет изменение свойств таких структур. В литературе описана топология алмазоподобных фаз, однако равновесные кластеры на основе фуллереноподобных молекул были мало изучены. Прямые углы между связями С–С энергетически невыгодны, и понижение энергии кластеров в процессе релаксации связано с оптимизацией валентных углов, что приводит к понижению симметрии кластеров и, в ряде случаев, даже к разрыву некоторых валентных связей. Показано, что способ сшивки двух фуллеренов при создании кластера обуславливает различие в их структуре и энергии. Различные начальные условия могут приводить к разным конфигурациям кластеров с одинаковой топологией. Среди изученных кластеров найдена структура с наименьшей потенциальной энергией на атом. Полученные результаты вносят вклад в изучение реальной структуры углеродных кластеров.

С.В.Д. благодарит за финансовую поддержку РФФИ, грант 14-13-00982, Ю.А.Б. благодарит за финансовую поддержку стипендией президента РФ молодым ученым и аспирантам (СП-4037.2015.1). Расчеты произведены на суперкомпьютере Межведомственного суперкомпьютерного центра РАН.

1. Введение

Фуллерены, получение которых в 1985 г. [1] было удостоено Нобелевской премии, обладают уникальными физическими свойствами, что открывает большие перспективы их использования в различных приложениях [2–6]. Например, фуллерены с металлическими включениями (так называемые фуллериды) являются магнитными диполями, что может быть использовано для создания новых высокочастотных носителей информации. Соединения фуллеренов с радиоактивными элементами могут использоваться в медицине в качестве противораковых препаратов. Небольшая добавка фуллереновой сажи повышает антифрикционные и противозносные свойства металлов [7].

Открытие все новых необычных свойств фуллеренов расширяет спектр их применимости, а, следовательно, растет и востребованность в синтезировании новых материалов на их основе [8–10]. Примером являются наноалмазы, в которых часть атомов углерода имеют свойственные кристаллическому алмазу координационное число $k = 4$ и гибридную sp^3 , а другая часть — $k = 3$ и гибридную sp^2 , свойственные графиту, фуллеренам, углеродным нанотрубкам и графену. Известны различные методы синтеза наноалмазов [11]. Наноалмазы, представляющие собой соединенные валентными связями

кластеры фуллеренов, могут формировать различные структуры, например при осаждении на подложку они могут образовывать либо неупорядоченные (аморфные) пленки, либо различные плотноупакованные решетки, основным свойством которых является большое число атомов элементарной ячейки, большие параметры решетки и значительные молекулярные пустоты. Эти материалы привлекают внимание в качестве антифрикционных материалов и добавок к маслам, а также для получения металлоалмазных упрочняющих покрытий [12]. Существуют перспективы применения наноалмазов в медицине и биологии. К настоящему времени экспериментально синтезированы и теоретически исследованы несколько алмазоподобных углеродных фаз, например кубический алмаз [13], гексагональный политип алмаза (2H политип–лонсдейлит) [14], полимеризованный кубический фуллерит C_{24} [15,16], углеродная фаза C_8 высокой плотности [17].

Новые схемы структурной классификации углеродных фаз и наноструктур, в основу которых положены типы образующихся в материалах химических связей и число ближайших атомов, с которыми каждый атом углерода образует ковалентные связи, были представлены в работе [18]. Ряд алмазоподобных фаз предсказан в результате теоретического анализа. Например, методом теории функционала плотности рассчитана оптимизированная структура десяти углеродных алмазоподобных

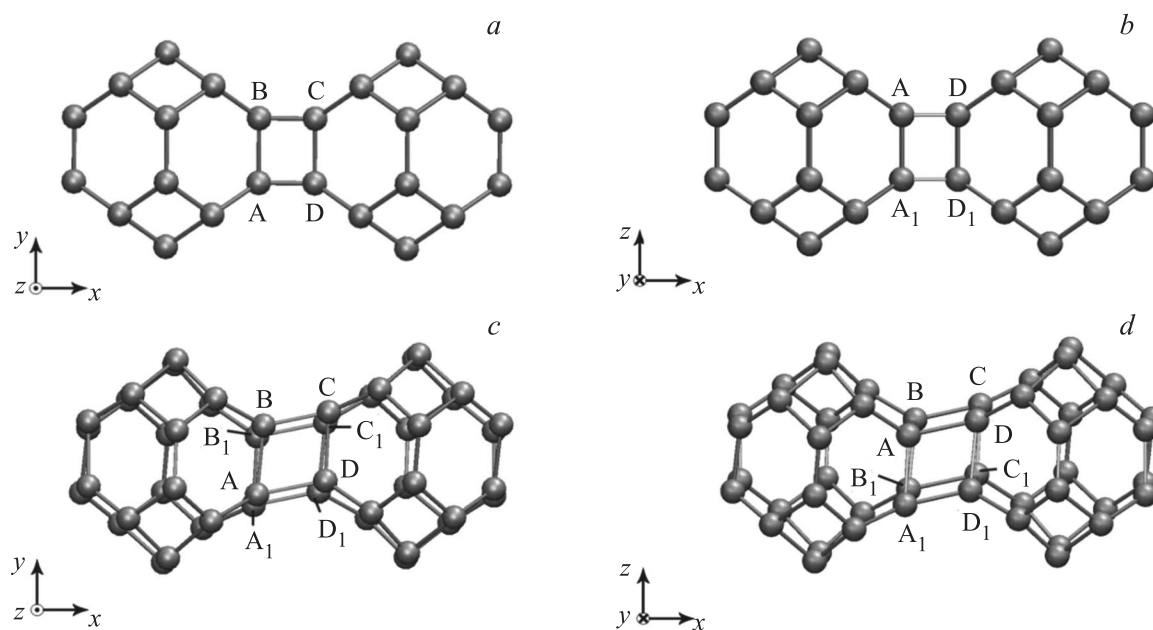


Рис. 1. Исходная (*a, b*) и равновесная (*c, d*) структуры фазы CA4, образованной сшивкой фуллеренов C_{24} , в проекциях на плоскости xy (*a, c*) и xz (*b, d*).

фаз, а также определены их параметры и некоторые свойства [19,20]. Из первых принципов были рассчитаны устойчивые структуры алмазоподобных фаз, получаемые из нанотрубок и трехмерных графитов [21]. В работе [22] впервые было предложено получать наноалмазную фазу из полимеризованных нанотрубок (4,0), которые представляют собой ковалентно связанные нанотрубки (4,0). В результате проведенных расчетов авторами установлено, что кристалл из полимеризованных нанотрубок является полупроводником с шириной запрещенной зоны 3.18 eV [22]. Методами молекулярной динамики были исследованы структуры карбиноидных слоев, карбиноидных нанотрубок и карбинофуллеренов и получены их основные характеристики [23]. Ряд структур был получен химическим синтезом, например димер C_{120} , состоящий из фуллеренов C_{60} , и димер C_{130} , состоящий из фуллеренов C_{60} и C_{70} [24]. Активно ведутся исследования полимеров на основе фуллерена C_{60} [25,26]. Например, исследовано влияние гидростатического давления на формирование кластеров из фуллеренов C_{60} и показано, что приложение давления приводит к формированию димеров, в то время как повышение температуры приводит к их разрушению [25].

Ранее была высказана гипотеза о возможности существования алмазоподобных фаз, которые можно получить в процессе сшивки валентными связями углеродных каркасов фуллереноподобных молекул, например C_{24} и C_{48} . Теоретические модели таких фаз и исследование условий их существования в неравновесном состоянии рассмотрены в работах [15,27,28]. Однако равновесные конфигурации данных структур недостаточно изучены, поэтому их исследование является актуальной задачей.

В настоящей работе с помощью молекулярно-динамического (МД) моделирования получены равновесные структуры алмазоподобных фаз, созданных на основе фуллереноподобных молекул C_{24} или C_{48} , которые далее для краткости именуются фуллеренами. Отметим, что метод МД-моделирования широко применяется в настоящее время для изучения структуры и свойств наноразмерных металлических и неметаллических материалов [29–34], в том числе фуллеренов, углеродных нанотрубок и листов графена [35–39].

2. Методика моделирования

Согласно работе [28], один и тот же фуллерен можно использовать для создания различных кластерных структур. В настоящей работе будут рассмотрены три варианта сшивки валентными связями фуллереноподобных молекул C_{24} и два варианта сшивки молекул C_{48} . В первом случае — это структуры CA4 (рис. 1, *a, b*), CA6 (рис. 2, *a, b*) и CA9 (рис. 3, *a, b*), а во втором случае — CA4 (рис. 4, *a, b*) и CA7 (рис. 5, *a, b*). Название структур соответствует типу соединения двух фуллеренов между собой, например структура CA4 получается сшивкой по квадратной грани, CA6 — по ребру, CA9 — по восьмиграннику, а CA9 — по шестиграннику. Длины четырех углеродных связей (L_1, L_2, L_3, L_4) кластеров были взяты из работы [28].

Для получения равновесных структур алмазоподобных кластеров и оценки их потенциальной энергии использовался свободно распространяемый программный пакет для МД-моделирования LAMMPS [40]. Межатомное взаимодействие описывалось с помощью потенциала

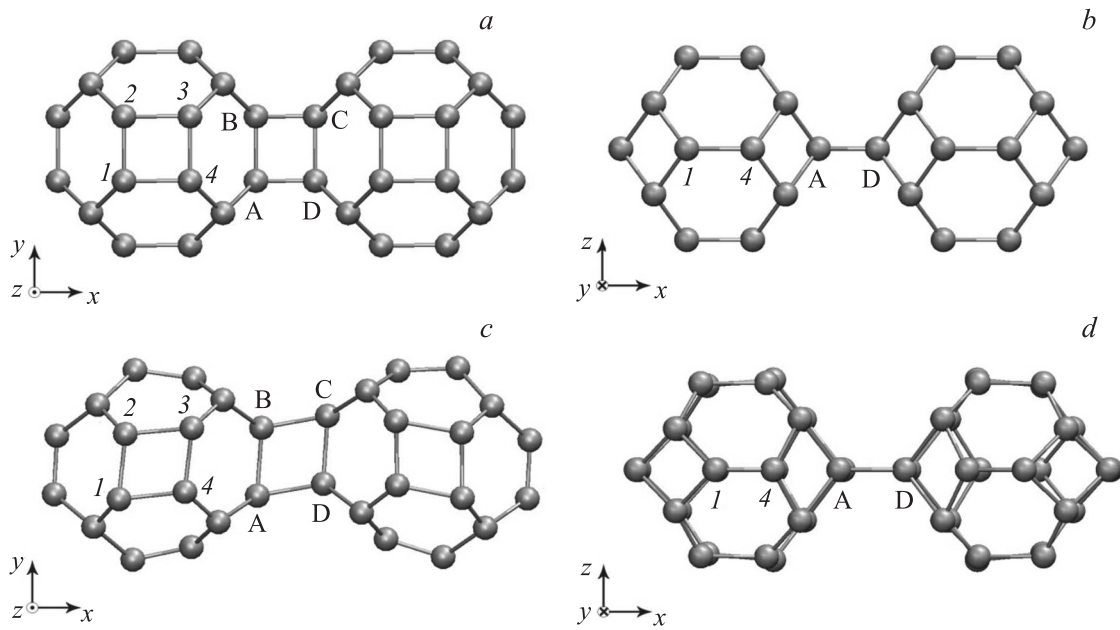


Рис. 2. То же, что на рис. 1, но для структуры СА6 в проекциях на плоскости xy (a, c) и xz (b, d).

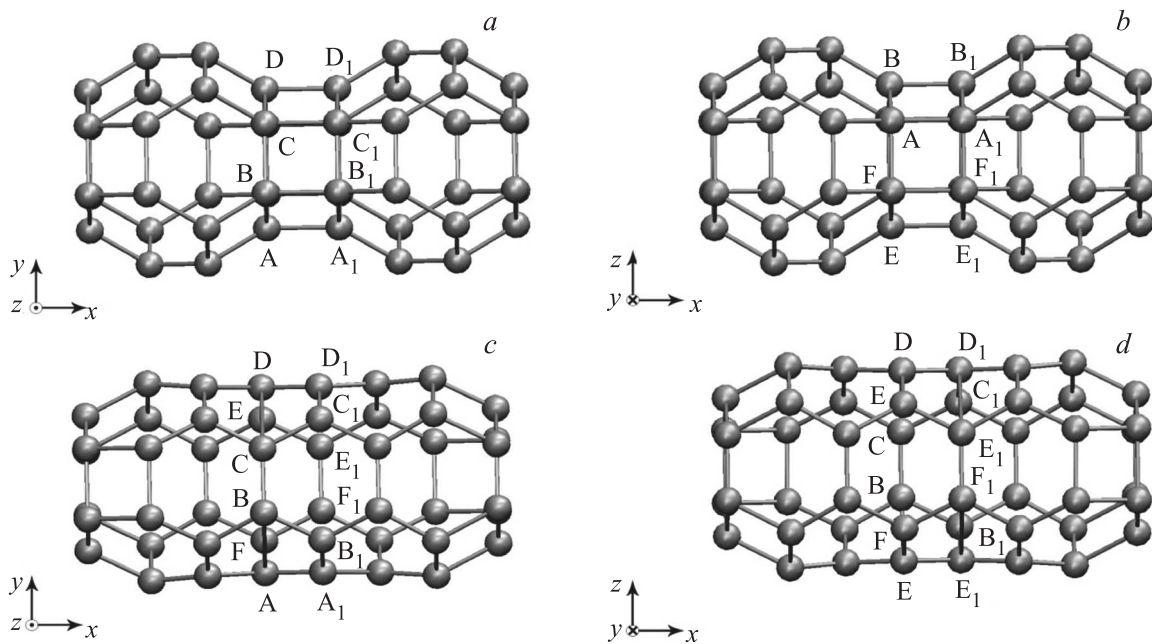


Рис. 3. То же, что на рис. 1, но для структуры СА9 в проекциях на плоскости xy (a, c) и xz (b, d).

AIREBO [41], включающего в себя многочастичные валентные взаимодействия между атомами углерода и дальнедействующие взаимодействия Ван-дер-Ваальса, описываемые парным потенциалом Леннарда–Джонса. Данные потенциалы устраняют некоторые неточности потенциала REBO [42], применявшегося ранее для МД-моделирования процессов упругой и пластической деформации графена, фуллеренов и углеродных нанотрубок. Потенциал AIRERO широко используется для моделирования деформационных процессов моно- и много-

слойных листов графена [43,44], смятого графена [36,45], углеродных нанотрубок [37,46] и фуллеренов [35,36]. Данные, полученные с помощью этого потенциала, хорошо согласуются с экспериментальными результатами и расчетами *ab initio*.

Для получения равновесного состояния рассматриваемых структур выполнялась минимизация энергий в системе с помощью многократной корректировки координат атомов по методу градиентного спуска, которая заканчивалась, если изменение энергии или силы было

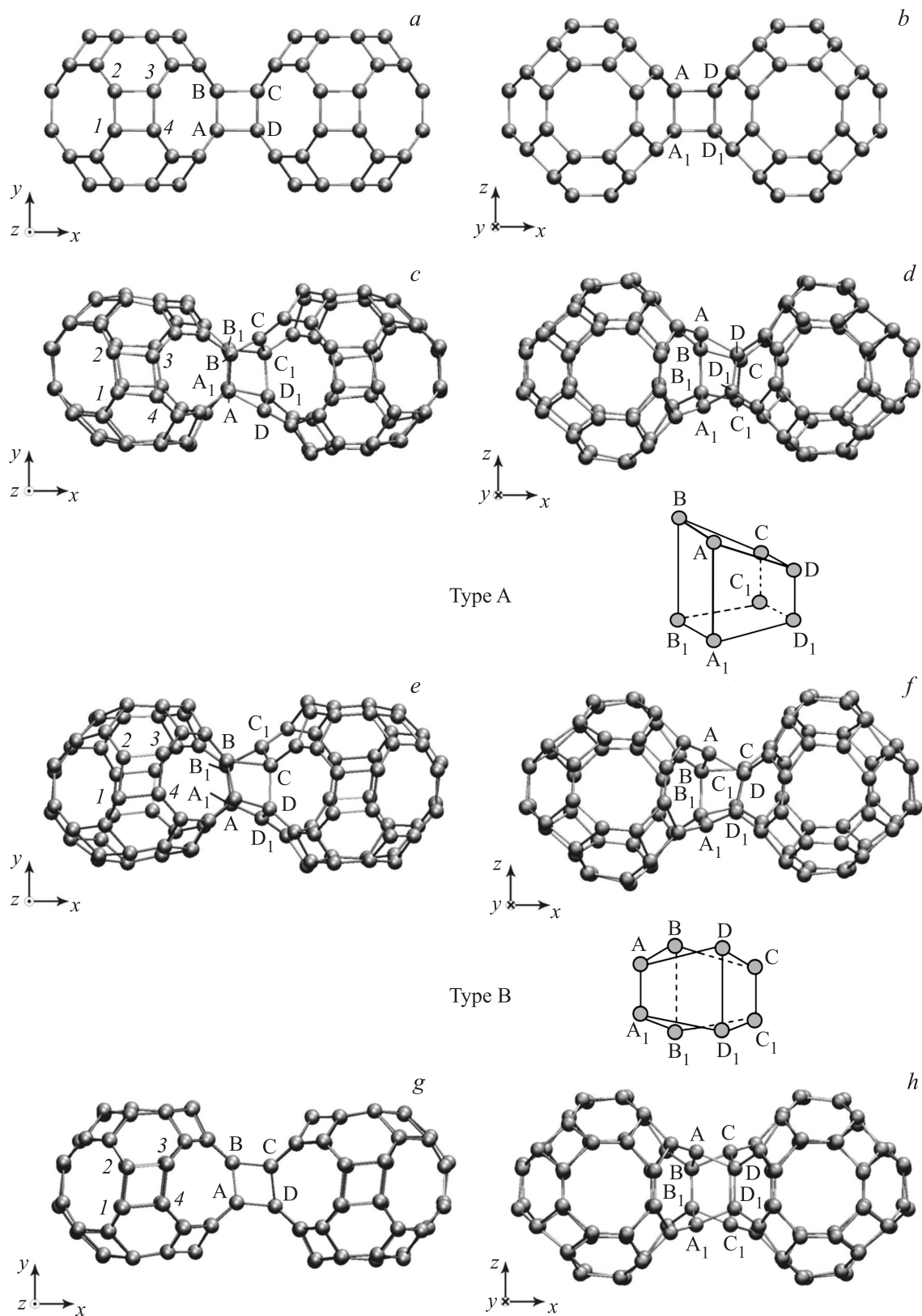


Рис. 4. Исходная (a, b) и равновесная (c, d) структуры алмазоподобного кластера CA_4 , полученного шивкой фуллеренов C_{48} в проекциях на плоскости xy (a, c) и xz (b, d). Релаксированная структура кластера CA_4 типа А (e, f) и типа В (g, h) в двух проекциях.

меньше заданных малых значений. В этот момент система достигает локального или глобального минимума потенциальной энергии, причем результат может зависеть от начальной конфигурации системы.

3. Результаты моделирования

3.1. Алмазоподобные кластеры на основе фуллереноподобной молекулы C_{24} . Рассмотрим молекулу CA_4 , образованную сшивкой двух фуллеренов C_{24} по грани, имеющей форму квадрата. Структура молекулы до (a, b) и после (c, d) релаксации представлена на рис. 1 в проекциях на плоскости xu (a, c) и xz (b, d). Атомы углерода А, В, С и D (см. рис. 1, a), образующие четыре валентные связи, в исходном состоянии соединены друг с другом под прямым углом [28], однако после релаксации углы между валентными связями отклоняются от 90° (рис. 1, c, d).

Далее рассмотрим алмазоподобный кластер CA_6 , образованный сшивкой двух фуллеренов C_{24} по ребрам шестигранника АВ и CD, структура которого до (a, b) и после (c, d) релаксации представлена на рис. 2 в проекциях на плоскости xu (a, c) и xz (b, d). Аналогично ранее рассмотренному кластеру CA_4 , в структуре CA_6 после релаксации наблюдается трансформация квадрата ABCD в параллелограмм (рис. 2, a, c). В исходной структуре фуллерена C_{24} также имеются атомы (например, 1, 2, 3 и 4 на рис. 2), соединенные валентными связями и расположенные под углом 90° , которые смещаются в процессе релаксации, формируя ромб (рис. 2, c). Аналогичная трансформация квадратов в фуллерене C_{24} наблюдалась и при релаксации кластера CA_4 . В обоих случаях трансформация структуры при релаксации приводит к небольшому удлинению (сжатию) вдоль оси $x(y)$.

На рис. 3 показано структурное соединение CA_9 [28], образованное сшивкой фуллеренов C_{24} по шестигранникам (на рис. 3, a, b они обозначены ABCDEF и $A_1B_1C_1D_1E_1F_1$). Релаксация алмазоподобного кластера CA_9 приводит к разрыву двух углеродных связей — B_1C_1 и EF, и исходная структура трансформируется в фазу, представленную на рис. 3, c и 3, d , обладающую симметричной структурой. Данную структуру можно отнести к углеродной нанотрубке с закрытыми концами, в которой все атомы углерода имеют три валентные связи по типу sp^2 -гибридизации.

3.2. Алмазоподобные кластеры на основе фуллереноподобной молекулы C_{48} . Структура алмазоподобного кластера CA_4 , полученного сшивкой фуллерена C_{48} по квадратной грани, представлена на рис. 4 в исходном (a, b) и релаксированном (c, d) состояниях в проекциях на плоскости xu (a, c) и xz (b, d). Аналогично алмазоподобным кластерам CA_4 (рис. 1) и CA_6 (рис. 2), полученным сшивкой фуллеренов C_{24} , атомы углерода, образующие квадраты, например ABCD или 1234 (рис. 4, a), меняют свои положения, формируя

параллелограммы (рис. 4, c). Отметим, что равновесная структура алмазоподобного кластера CA_4 на основе фуллерена C_{24} (рис. 1, c, d) более симметричная, чем CA_4 на основе фуллерена C_{48} (рис. 4, c, d), хотя в обоих случаях за счет трансформации структуры при релаксации наблюдается удлинение (сжатие) кластера вдоль оси $x(y)$. Однако в отличие от CA_4 на основе C_{24} в кластере CA_4 на основе C_{48} происходит разрыв углеродных связей CD и AA_1 (см. рис. 4, c, d).

На рис. 4, c, d изображена равновесная структура, полученная релаксацией „идеальной“ исходной структуры более высокой симметрии. Новая низкосимметричная структура образовалась из-за развития малой (величины порядка ошибок округления) асимметрии молекулы. Для получения других возможных конфигураций были проведены расчеты с измененной исходной геометрией молекулы. Это было сделано с целью поиска равновесных конфигураций, имеющих топологию исходной структуры, иными словами, для того чтобы избежать разрыва валентных связей в ходе релаксации. Для алмазоподобного кластера CA_4 на основе фуллерена C_{48} перед релаксацией кубическую структуру атомов ABCDA₁B₁C₁D₁ превращаем в усеченную пирамиду (тип А) или в сложную фигуру (тип В). Данные отклонения атомов в исходном состоянии наследуются в релаксированных структурах, показанных на рис. 4, e, f и g, h соответственно в проекции на плоскости xu (e, g) и xz (f, h). Оказалось, что релаксация модифицированных структур CA_4 типа А и типа В также приводит к разрыву связей, как и при релаксации исходной структуры (на рис. 4, f и на рис. 4, h видна разорванная связь AA_1). Однако алмазоподобный кластер CA_4 типа В (рис. 4, g, h) имеет более симметричную равновесную форму, чем кластеры, представленные на рис. 4, c, d и рис. 4, e, f . Таким образом, найти равновесную конфигурацию алмазоподобного кластера CA_4 на основе фуллерена C_{48} , сохраняющего идеализированную топологию, показанную на рис. 4, a, b не удалось. Тем не менее во всех релаксированных структурах остаются атомы углерода с четырьмя валентными связями. Отметим, что наши расчеты не могут служить доказательством отсутствия равновесных структур с топологией, показанной на рис. 4, a, b . Возможно, что существует такая исходная конфигурация, которая при релаксации сохранила бы данную топологию. Поиск начальных условий, при которых разрыва связей не происходит, требует дальнейших усилий.

Наиболее сложной структурой по сравнению с уже рассмотренными обладает алмазоподобный кластер CA_7 , имеющий большое число атомов углерода с sp^3 -гибридизацией в месте сшивки фуллеренов C_{48} (рис. 5, a, b). Равновесная структура, полученная в результате релаксации исходной структуры CA_7 с возмущениями порядка ошибок округления, представлена на рис. 5, c и d . Из рисунка видно, что в отличие от рассмотренных выше структур, валентные связи, расположенные под прямым углом и образующие квадрат, могут трансформироваться не в параллелограмм,

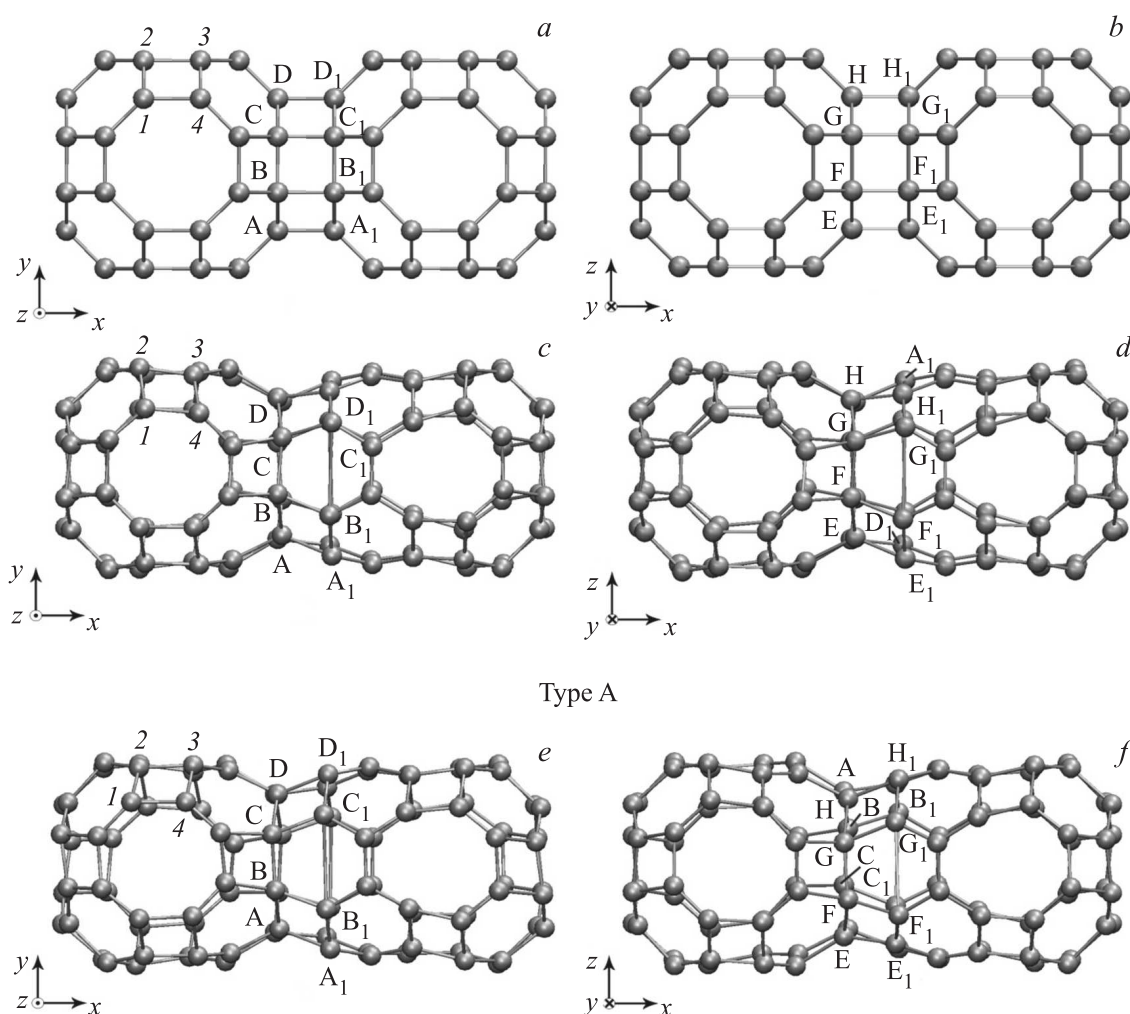


Рис. 5. Исходная (*a, b*) и равновесная (*c, d*) структуры алмазоподобного кластера CA_7 , полученного шивкой фуллеренов C_{48} в проекциях на плоскости xy (*a, c*) и xz (*b, d*). Равновесная модифицированная структура CA_7 типа *A* (*e, f*) в двух проекциях.

а в равнобедренную трапецию, как например квадрат BCC_1B_1 . Разрыва валентных связей в ходе релаксации структуры CA_7 не наблюдалось. Однако отклонение углов между валентными связями от 90° при релаксации наблюдается у всех исследуемых алмазоподобных кластеров, благодаря чему их структура несимметрична. Изменение начальных условий для структуры CA_7 не привело к повышению симметрии в равновесном состоянии. Так, например, разворот на 10° плоскости $ABCD$ относительно $A_1B_1C_1D_1$ (рис. 5, *a, b*) слабо повлиял на вид равновесной структуры, показанной на рис. 5, *e, f*.

4. Обсуждение результатов

Поскольку равновесные углы между валентными связями при sp^3 -гибридизации в кристалле алмаза равны 109.47° , то следует ожидать, что в наиболее стабильной конфигурации углы вблизи атомов с четырьмя соседями в рассмотренных структурах будут стремиться к данной

величине. Анализ всех исследованных структур показал, что формирование устойчивых конфигураций связано с понижением симметрии идеализированных структур и, более того, может сопровождаться разрывом некоторых валентных связей. Чаще всего в структуре остаются атомы с четырьмя валентными связями, но релаксация структуры CA_9 привела к формированию структуры аналогичной углеродной нанотрубке с закрытыми концами, где все атомы имеют по три валентные связи (см. рис. 3).

Для всех исследованных кластеров, состоящих из N атомов, была рассчитана величина полной потенциальной энергии P_Σ после релаксации структуры. Кроме того, была рассчитана энергия одной связи $C-C$ в алмазе, $P_0 = 3.725 \text{ eV}$. В таблице для исследованных структур представлены значения P_Σ и $P = P_\Sigma/N - 1.5P_0$, где $1.5P_0$ — это оценка энергии одного атома, имеющего три валентные $C-C$ -связи. Таким образом, величина P характеризует разностную удельную потенциальную энергию кластеров относительно алмаза. Сравнение значений величины потенциальной энергии на атом для

Потенциальная энергия системы после релаксации алмазоподобных фаз

Фуллерен	Алмазоподобная фаза		P_{Σ} , eV	N	$P = P_{\Sigma}/N - 1.5P_0$, eV/atom
C_{24}	CA4	Исходная структура	280.29	48	0.252
	CA6	Исходная структура	282.38	48	0.296
	CA9	Исходная структура	308.21	48	0.834
C_{48}	CA4	Исходная структура	589.31	96	0.682
		Тип А	589.08	96	0.680
		Тип В	589.80	96	0.687
	CA7	Исходная структура	600.61	96	0.802
		Тип А	600.40	96	0.800

алмазоподобных кластеров, полученных из C_{24} , показывает, что наименьшей энергией P обладает структура CA4, а наибольшей — CA9 ($P_{CA4} = 5.839$ eV/atom и $P_{CA9} = 6.421$ eV/atom соответственно). Из сравнения потенциальных энергий на атом алмазоподобных кластеров из фуллерена C_{48} видно, что структура CA4 также обладает наименьшей величиной P . Отметим, что величина потенциальной энергии P для CA4 и CA7, полученных сшивкой C_{48} , почти не зависит от топологии.

5. Заключение

Равновесные алмазоподобные кластеры со структурами CA4, CA6, CA7 и CA9, полученные сшивкой фуллеренов C_{24} и C_{48} , были исследованы методом молекулярной динамики.

Обнаружено, что релаксация идеализированных исходных форм алмазоподобных кластеров CA4 и CA6, полученных сшивкой фуллеренов C_{24} , не приводит к разрыву валентных связей, но приводит к понижению симметрии за счет отклонения углов между валентными связями от 90° (см. рис. 1 и 2). Формирование равновесной структуры в процессе релаксации алмазоподобного кластера CA9, также полученного сшивкой фуллеренов C_{24} , приводит к разрыву некоторых валентных связей между атомами с координационным числом $k = 4$ и к формированию симметричного кластера, в котором все атомы углерода имеют три валентные связи (см. рис. 3).

При релаксации алмазоподобной молекулы CA4, полученной сшивкой фуллеренов C_{48} по квадратным граням, всегда происходит разрыв нескольких связей между атомами с координационным числом $k = 4$, но часть атомов сохраняет четыре валентные связи (см. рис. 4). Разрывы валентных связей не наблюдались в равновесной структуре CA7, полученной сшивкой фуллеренов C_{48} по восьмигранникам (см. рис. 5).

В исходной идеализированной структуре всех исследуемых алмазоподобных кластеров углы между некоторыми валентными связями прямые, но релаксация структуры привела к отклонению всех таких углов от 90° . Квадратные грани могут трансформироваться либо в параллелограммы, либо в равнобедренные трапеции.

Анализ показал, что после релаксации структуры минимальной величиной потенциальной энергии на атом обладают алмазоподобные кластеры CA4, получаемые сшивкой фуллеренов C_{24} или C_{48} по ребру и, следовательно, такая сшивка фуллеренов является энергетически более выгодной по сравнению со сшивкой по любой из граней.

Отметим, что различные фуллерены могут сшиваться валентными связями для создания двумерных и трехмерных квазипериодических структур, формируя так называемые алмазоподобные фазы. Полученные нами данные дают представление о возможных путях релаксации подобных структур на примере парных кластеров. Свойства объемных систем на основе фуллеренов довольно хорошо исследованы, однако функциональные свойства структур, где фуллерены или фуллереноподобные молекулы соединены ковалентной, а не ван-дер-ваальсовой связью, могут сильно отличаться от свойств традиционных фуллеритов. Интересными свойствами таких алмазоподобных фаз являются большая площадь поверхности и пористость, что открывает перспективы их применения в качестве материалов для создания катализаторов, хранения и транспортировки водорода.

Представленные в настоящей работе результаты являются предварительными. Более точный расчет равновесных конфигураций алмазоподобных фаз должен быть выполнен более точным и существенно более затратным методом, опирающимся на теорию функционала плотности. Из сравнения представленных здесь результатов с результатами первопринципных расчетов можно будет сделать выводы о точности межатомного потенциала AIREBO. Однако, полученные данные хорошо согласуются с уже известными из литературы экспериментальными результатами, полученными для других фуллеренов, например C_{60} [24,25]. В экспериментальных работах также были получены устойчивые димеры фуллеренов, а также другие устойчивые структуры на основе фуллеренов. Экспериментальные исследования таких структур довольно активно проводятся в последние десятилетия, однако касаются лишь хорошо известных фуллеренов C_{60} и C_{70} , поэтому теоретические исследования, направленные на описание димеров из других фуллереноподобных молекул, являются важной и актуальной задачей.

Список литературы

- [1] H.W. Kroto, H.R. Heath, S.C. O'Brien, R.F. Curl, R.E. Smalley. Nature **318**, 162 (1985).
- [2] P.A. Warda, J.A. Teprovich, jr., R.N. Compton, V. Schwartz, G.M. Veith, R. Zidan. Int. J. Hydrogen Energy **40**, 6, 2710 (2015).

- [3] M. Ghorbanzadeh Ahangari, A. Fereidoon, M. Darvish Ganji, N. Sharifi. *Physica B* **423**, 1 (2013).
- [4] N. Politakos, I. Zalakain, B. Fernandez d'Arlas, A. Eceiza, G. Kortaberria. *Mater. Chem. Phys.* **142**, 1, 387 (2013).
- [5] K. Kurotobi, Y. Murata. *Science*, **333**, 6042, 613 (2011).
- [6] B. Xu, X. Chen. *Phys. Rev. Lett.* **110**, 156 103 (2013).
- [7] V.N. Bakunin, A.Y. Suslov, G.N. Kuzmina, O.P. Parenago, A.V. Topchiev. *J. Nanopart. Res.* **6**, 2–3, 273 (2004).
- [8] X. Zhang, K.K. Yeung, Z. Gao, J. Li, H. Sun, H. Xu, K. Zhang, M. Zhang, Z. Chen, M.M.F. Yuen, S. Yang. *Carbon* **66**, 201 (2014).
- [9] D. Wei, J. Kivioja. *Nanoscale* **5**, 10 108 (2013).
- [10] Р.Р. Мулюков, Ю.А. Баимова. Углеродные наноматериалы. РИЦ БашГУ, Уфа (2015). 160 с.
- [11] В.А. Плотников, Д.Г. Богданов, С.В. Макаров. Детонационный наноалмаз. Изд-во Алтайского гос. ун-та, Барнаул (2014). 224 с.
- [12] В.Ю. Долматов. Ультрадисперсные алмазы детонационного синтеза. Получение, свойства, применения. Изд-во ГПУ, СПб. (2003). 344 с.
- [13] H.O. Pierson. *Handbook of carbon, graphite, diamond, and fullerenes: properties, processing, and applications*. Noyes, Park Ridge (1993). 402 p.
- [14] B. Wen, J. Zhao, M.J. Bucknum, P. Yao, T. Li. *Diamond Rel. Mater.* **17**, 356 (2008).
- [15] В.В. Покропивный, А.В. Покропивный. *ФТТ* **46**, 2, 380 (2004).
- [16] В.Л. Бекенев, В.В. Покропивный. *ФТТ* **48**, 7, 1324 (2006).
- [17] J. Crain, S.J. Clark, G.J. Ackland, M.C. Payne, V. Milman, P.D. Hatton, B.J. Reid. *Phys. Rev. B* **49**, 8, 5329 (1994).
- [18] Е.А. Беленков, В.А. Грешняков. *ФТТ* **55**, 8, 1640 (2013).
- [19] Е.А. Беленков, В.А. Грешняков. *ФТТ* **57**, 1, 192 (2015).
- [20] Е.А. Беленков, В.А. Грешняков. *ЖЭТФ* **140**, 1, 99 (2011).
- [21] Е.А. Беленков, В.А. Грешняков. *ФТТ* **57**, 6, 1229 (2015).
- [22] H.S. Domingos. *J. Phys.: Condens. Matter.* **16**, 9083 (2004).
- [23] Е.А. Беленков, И.В. Шахова. *ФТТ* **53**, 11, 2265 (2011).
- [24] K. Komatsu, K. Fujiwara, T. Tanaka, Y. Murata. *Carbon* **38**, 1529 (2000).
- [25] V.A. Davydov, L.S. Kashevarova, A.V. Rakhmanina, V. Agafonov, H. Alloachi, R. Céolin, A.V. Dzyabchenko, V.M. Senyavin, H. Szwarc, T. Tanaka, K. Komatsu. *J. Phys. Chem. B* **103**, 11, 1800 (1999).
- [26] P.-A. Persson, U. Edlund, P. Jacobsson, D. Johnels, A. Soldatov, B. Sundqvist. *Chem. Phys. Lett.* **258**, 540 (1996).
- [27] Л.И. Овсянникова, В.В. Покропивный, В.Л. Бекенев. *ФТТ* **51**, 10, 2070 (2009).
- [28] В.А. Грешняков, Е.А. Беленков, В.М. Березин. Кристаллическая структура и свойства углеродных алмазоподобных фаз. Издательский центр ЮУрГУ, Челябинск. (2012). 150 с.
- [29] V. Nikos. *Mechan. Mater.* **67**, 79 (2013).
- [30] L. Xiong, Q. Deng, G.J. Tucker, D.L. McDowell, Y. Chen. *Int. J. Plasticity* **38**, 86 (2012).
- [31] Y. Cheng, M.X. Shi, Y.W. Zhang. *Int. J. Solids Structures* **49**, 23–24, 3345 (2012).
- [32] К.А. Букреева, Р.И. Бабичева, С.В. Дмитриев, К. Zhou, Р.Р. Мулюков. *Письма в ЖЭТФ* **98**, 100 (2013).
- [33] К.А. Букреева, Р.И. Бабичева, С.В. Дмитриев, К. Zhou, Р.Р. Мулюков. *ФТТ* **55**, 9, 1847 (2013).
- [34] R.I. Babicheva, K.A. Bukreeva, S.V. Dmitriev, R.R. Mulyukov, K. Zhou. *Int.* **43**, 171 (2013).
- [35] Ю.А. Баимова, Р.Т. Мурзаев, С.В. Дмитриев. *ФТТ* **56**, 10, 1946 (2014).
- [36] J.A. Baimova, B. Liu, S.V. Dmitriev, K. Zhou. *Phys. Status Solidi — RRL* **8**, 4, 336 (2014).
- [37] К.А. Букреева, А.М. Искандаров, С.В. Дмитриев, Y. Umeno. *Письма о материалах* **3**, 4, 318 (2013).
- [38] T.-H. Liu, G. Gajewski, C.-W. Pao, C.-C. Chang. *Carbon* **49**, 7, 2306 (2011).
- [39] J. Han, S. Ryu, D. Sohn, S. Im. *Carbon* **68**, 250 (2014).
- [40] <http://lammps.sandia.gov/>
- [41] S. Stuart, A. Tutein, J. Harrison. *J. Chem. Phys.* **112**, 6472 (2000).
- [42] D.W. Brenner. *Phys. Rev. B* **42**, 9458 (1990).
- [43] A.K. Singh, R.G. Hennig. *Phys. Rev. B* **87**, 094 112 (2013).
- [44] S. Costamagna, M. Neek-Amal, J.H. Los, F.M. Peeters. *Phys. Rev. B* **86**, 041 408 (2012).
- [45] J.A. Baimova, B. Liu, S.V. Dmitriev, N. Srikanth, K. Zhou. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **16**, 19 505 (2014).
- [46] M.A.N. Dewapriya, A.S. Phani, R.K.N.D. Rajapakse. *Proceedings of the 23rd CANCAM, Vancouver, Canada* (2011); V. Vijayaraghavan, C.H. Wong. *Comp. Mater. Sci.* **71**, 184 (2013).