Министерство науки и высшего образования
Российской Федерации
Федеральное государственное
бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Тверской государственный университет»

**ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ
ИЗУЧЕНИЯ КЛАСТЕРОВ,
НАНОСТРУКТУР
И НАНОМАТЕРИАЛОВ**

**PHYSICAL AND CHEMICAL ASPECTS
OF THE STUDY OF CLUSTERS,
NANOSTRUCTURES AND
NANOMATERIALS**

**FIZIKO-HIMIČESKIE ASPEKTY
IZUČENIÂ KLASTEROV,
NANOSTRUKTUR I NANOMATERIALOV**

выпуск 12

ТВЕРЬ 2020

УДК 620.22:544+621.3.049.77+539.216.2:537.311.322: 530.145

ББК Ж36:Г5+В379

Ф50

Рецензирование статей осуществляется на основании Положения о рецензировании статей и материалов для опубликования в журнале «Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов».

Официальный сайт издания в сети Интернет:

<https://www.physchemaspects.ru>

Ф50 Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов [Текст]. – Тверь: Твер. гос. ун-т, 2020. – Вып. 12. – 908 с.

Зарегистрирован Федеральной службой по надзору в сфере связи, информационных технологий и массовых коммуникаций, свидетельство о регистрации СМИ ПИ № ФС77-47789 от 13.12.2011.

Издание составлено из оригинальных статей, кратких сообщений и обзоров теоретического и экспериментального характера, отражающих результаты исследований в области изучения физико-химических процессов с участием кластеров, наноструктур и наноматериалов физики, включая межфазные явления и нанотермодинамику. Журнал предназначен для научных и инженерно-технических работников, преподавателей ВУЗов, студентов и аспирантов. Издание подготовлено на кафедре общей физики Тверского государственного университета.

Переводное название: Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials

Транслитерация названия: Fiziko-himičeskie aspekty izučeniâ klasterov, nanostruktur i nanomaterialov

УДК 620.22:544+621.3.049.77+539.216.2:537.311.322: 530.145

ББК Ж36:Г5+В379

Print ISSN 2226-4442

Online ISSN 2658-4360

© Коллектив авторов, 2020

© Тверской государственный университет, 2020

СТРУКТУРА И УСТОЙЧИВОСТЬ АЛМАЗОПОДОБНОГО ТЕТРАГОНАЛЬНОГО СЛОЯ: ПЕРВОПРИНЦИПНЫЕ РАСЧЕТЫ

В.А. Грешняков, Е.А. Беленков

ФБГОУ ВО «Челябинский государственный университет»

454001, Россия, Челябинск, ул. Братьев Кашириных, 129

greshnyakov@csu.ru, belenkov@csu.ru

DOI: 10.26456/pcascnn/2020.12.405

Аннотация: Методом теории функционала плотности было выполнено теоретическое исследование нового слоевого полиморфа алмаза DL_{4-8} , состоящего из двух полимеризованных тетрагональных графеновых слоев L_{4-8} . Установлено, что новый алмазоподобный слой имеет двумерную тетрагональную решетку с параметром $a = b = 0,3822$ нм и толщиной 0,1599 нм. Рассчитанные поверхностная плотность и ширина запрещенной зоны этого слоя равны 0,109 мкг/см² и 2,63 эВ, соответственно. Новый слой DL_{4-8} должен быть устойчивым, как минимум, до 220 К. Также установлено, что слой DL_{4-8} может быть получен при сильном одноосном сжатии двух графеновых слоев L_{4-8} при давлении 29,6 ГПа.

Ключевые слова: графен, алмазоподобный слой, первопринципные расчеты, кристаллическая структура, фазовые переходы.

1. Введение

Углерод – это уникальный химический элемент, на основе которого может быть сформировано огромное множество неорганических соединений, обладающих значительно отличающимися структурами и свойствами [1-6]. Хотя равновесными формами углерода при нормальных условиях являются графит и алмаз [7], но за последние тридцать пять лет также были синтезированы различные молекулярные, трубчатые и слоевые углеродные наноструктуры, состоящие из sp^2 – или $sp^2 + sp$ – гибридизированных атомов [7-10]. Теоретически предсказана возможность существования гибридных слоевых $sp^2 + sp^3$ наноструктур, таких как пентаграфен [11]. Однако наноструктуры, состоящие только из sp^3 – гибридизированных атомов углерода, еще не были обнаружены.

Новые экспериментальные исследования по наноиндентированию тонких графеновых пленок показали, что двухслойные алмазоподобные наноструктуры могут формироваться при высоких одноосных напряжениях и демонстрируют высокую прочность, сопоставимую с таковой для алмаза [12]. Вероятно, такие бинарные углеродные слои могут состоять только из sp^3 – гибридизированных атомов углерода. Поскольку структура этих бинарных слоев еще не определена, поэтому данная работа была посвящена теоретическим расчетам возможной структуры, термической устойчивости и свойств новой двумерной структурной

разновидности алмаза, сформированной на основе двух тетрагональных графеновых слоев.

2. Методический раздел

Структурные и энергетические характеристики углеродных соединений были рассчитаны с помощью программного пакета Quantum ESPRESSO [13], используя метод теории функционала плотности (ТФП). В методе ТФП было использовано обобщенное градиентное приближение (ОГП) [14]. Влияние ионных остовов атомов углерода учитывалось через сохраняющий норму псевдопотенциал [15]. Расчет слоевых наноструктур проводился для следующих сеток из k -точек: $12 \times 12 \times 6$. Волновые функции раскладывались по усеченному базисному набору плоских волн. Энергия отсечки составляла 60 Ридберг. Геометрическая оптимизация элементарных ячеек полиморфов алмаза и графена выполнялась, пока величина сил, действующих на атом, и напряжений не станет меньше 10 мэВ/нм и 0,2 ГПа, соответственно. Моделирование отжига алмазоподобного слоя проводилось методом молекулярной динамики при использовании k -сетки $6 \times 6 \times 3$ с шагом 0,5 фс. Исследование прямого фазового перехода графена в алмазоподобный слой выполнялось по методике из работ [16, 17].

3. Результаты и обсуждение

Структура любого двумерного полиморфа алмаза, состоящего из sp^3 -гибридированных атомов углерода, может быть получена при использовании методики, предложенной в работе [1]. Согласно этой методике структуры бинарных алмазоподобных слоев могут быть модельно сформированы в результате образования связей между графеноподобными слоями-предшественниками. В данной работе тетрагональный графен L_{4-8} (см. рис. 1 а) был рассмотрен в качестве предшественника, в котором все атомы находятся в кристаллографически эквивалентных позициях [1]. Структура алмазоподобного слоя DL_{4-8} , полученная на основе двух слоев L_{4-8} , приведена на рис. 1 б.

Двумерная тетрагональная элементарная ячейка бинарного слоя DL_{4-8} с параметрами $a = b = 0,3822$ нм содержит восемь атомов углерода (см. рис. 1 б). Толщина слоя h составляет 0,1599 нм. В Таблице 1 представлены координаты атомов в долях параметров a, b и h . Все четырехкоординированные атомы в структуре алмазоподобного слоя DL_{4-8} находятся на двух параллельных плоскостях в кристаллографически эквивалентных позициях. Каждый углеродный атом имеет следующий

набор длин углерод-углеродных связей: $L_1 = 0,1599$ нм, $L_2 = 0,1555$ нм, $L_3 = L_4 = 0,1603$ нм. Длины связей в бинарном слое DL_{4-8} больше расчетной длины связи в кубическом алмазе на 0,7–3,8 %. Углы между связями принимают значения только 90 или 135°. Деформационные параметры Str и Def нового алмазоподобного слоя соответственно равны 0,0134 нм и 128,9°. Следовательно, этот слой можно отнести к сильно напряженным алмазоподобным структурам [18]. Поверхностная плотность бинарного графана равна 0,109 мкг/см², которая на 44 % больше плотности обычного графена [7]. В структуре слоя DL_{4-8} имеются звенья в форме восьмиугольных призм, диаметр пор в которых составляет 0,2568 нм.

Таблица 1. Относительные координаты атомов в двумерной тетрагональной элементарной ячейке алмазоподобного слоя DL_{4-8} .

№ атома	x_a	y_b	z_h	№ атома	x_a	y_b	z_h
1	0,20341	0,50000	0,38582	5	0,50000	0,20341	0,38582
2	0,20341	0,50000	0,61418	6	0,50000	0,20341	0,61418
3	0,50000	0,79659	0,38582	7	0,79659	0,50000	0,38582
4	0,50000	0,79659	0,61418	8	0,79659	0,50000	0,61418

Рис. 1. Структуры углеродных слоевых соединений: а – тетрагонального графена L_{4-8} , б – бинарного алмазоподобного слоя DL_{4-8} .

Величина разностной полной энергии алмазоподобного слоя DL_{4-8} , рассчитанная как разность полных энергий этого слоя и кубического алмаза, составляет 1,55 эВ/атом. Данное значение превосходит рассчитанные значения разностных энергий всех изученных алмазоподобных фаз и наноструктур [18-20], кроме одномерных полипризматов [21], поэтому необходима оценка термической

устойчивости нового алмазоподобного слоя. Имитация отжига структуры слоя DL_{4-8} была выполнена с помощью метода молекулярной динамики при 220 К. График изменения полной энергии от времени отжига приведен на рис. 2 а. В результате отжига на протяжении 7 пс не наблюдается ни деструкции, ни сильной деформации структуры (см. рис. 2 б-г), что указывает на устойчивость тетрагонального слоя при температурах вблизи 220 К.

Рис. 2. Зависимость полной энергии от времени термической обработки алмазоподобного слоя DL_{4-8} при 220 К (а). Фрагмент структуры слоя DL_{4-8} во время отжига: б – 150 фс, в – 3500 фс, г – 7100 фс.

Анализ электронных свойств алмазоподобного слоя DL_{4-8} был выполнен в результате расчетов зонной структуры и плотности

электронных состояний (ПЭС). Расчет электронной структуры проводился в зоне Бриллюэна простой тетрагональной решетки. Зонная структура этого слоя была рассчитана на интервалах между пятью точками высокой симметрии (Γ , М, Х, R и Z) и приведена на рис. 3 а. Минимальная разница в значениях энергий электронов дна зоны проводимости и вершины валентной зоны равна 2,96 эВ. Данное значение на 49% меньше соответствующего расчетного значения для кубического алмаза. На рис. 3 б приведена плотность электронных состояний. Анализ спектра электронных состояний показал, что рассчитанное значение не прямой запрещенной зоны тетрагонального алмазоподобного слоя составляет 2,63 эВ. Поэтому новый алмазоподобный слой DL_{4-8} должен быть полупроводником.

Рис. 3. Зонная структура (а) и плотность электронных состояний (ПЭС) (б) алмазоподобного слоя DL_{4-8} , рассчитанные методом ТФП-ОГП.

На последнем этапе работы была исследована возможность получения алмазоподобного слоя DL_{4-8} . Наиболее вероятный механизм формирования алмазоподобной структуры заключается в сильном сжатии графитоподобных предшественников [7, 16, 17, 20]. Установлено, что тетрагональный слой DL_{4-8} может быть сформирован на основе двух графеновых слоев L_{4-8} с относительным расположением типа АА при их сжатии вдоль кристаллографического направления, перпендикулярного плоскости слоев. Фазовый переход начинается при сближении графеновых слоев на расстояние 0,176 нм, когда давление на слои превышает 29,6 ГПа (см. рис. 4). Формирование структуры слоя DL_{4-8} заканчивается при уменьшении межслоевого расстояния до 0,171 нм (см. рис. 4).

Рис. 4. Зависимость разностной полной энергии от расстояния между графеновыми слоями для прямого структурного перехода «графен $L_{4-8} \rightarrow$ слой DL_{4-8} », рассчитанная методом ТФП-ОГП.

4. Заключение

В рамках метода теории функционала плотности проведено исследование равновесной структуры, термической устойчивости, электронных свойств и структурообразования бинарного алмазоподобного слоя DL_{4-8} , состоящего из двух полимеризованных графеновых слоев L_{4-8} . Установлено, что этот бинарный слой с алмазоподобной структурой имеет двумерную тетрагональную решетку, поверхностная плотность которой составляет 0,109 мкг/см². Новый бинарный алмазородобный слой должен быть широкозонным полупроводником с шириной прямой запрещенной зоны ~ 3 эВ. Молекулярно-динамические расчеты показали, что слоевой

полиморф алмаза DL_{4-8} может устойчиво существовать до 220 К. Наиболее вероятный способ получения тетрагонального слоя DL_{4-8} – сильное сжатие двух тетрагональных графеновых слоев при давлениях, превышающих 29,6 ГПа.

Библиографический список:

1. **Беленков, Е.А.** Классификация структурных разновидностей углерода / Е.А. Беленков, В.А. Грешняков // Физика твердого тела. – 2013. – Т. 55. – Вып. 8. – С. 1640-1650.
2. **Лисовенко, Д.С.** Равновесные структуры из углеродных алмазоподобных кластеров и их упругие свойства / Д.С. Лисовенко, Ю.А. Баймова, Л.Х. Рысаева, В.А. Городцов, С.В. Дмитриев // Физика твердого тела. – 2017. – Т. 59. – Вып. 4. – С. 801-809. DOI: 10.21883/FTT.2017.04.44286.100.
3. **Грешняков, В.А.** Фазовые превращения полиморфов алмаза $LA3$ и $LA5$ / В.А. Грешняков, Е.А. Беленков // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. – 2019. – Вып. 11. – С. 458-465. DOI: 10.26456/pcascnn/2019.11.458.
4. **Kang, S.** Mechanical properties, lattice thermal conductivity, infrared and Raman spectrum of the fullerite C_{24} / S. Kang, Z. Xiang, H. Mu, Y. Cai // Physics Letters A. – 2019. – V. 384. – I. 1. – Art. № 126035. – 5 p. DOI: 10.1016/j.physleta.2019.126035.
5. **Бабичева, Р.И.** Механические свойства двумерных sp^2 – углеродных наноматериалов / Р.И. Бабичева, С.В. Дмитриев, Е.А. Корзникова, К. Жоу // Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 2019. – Т. 156. – Вып. 1 (7). – С. 79-86. DOI: 10.1134/S0044451019070083.
6. **Rysaeva, L.Kh.** Elastic properties of diamond-like phases based on carbon nanotubes / L.Kh. Rysaeva, J.A. Baimova, S.V. Dmitriev, D.S. Lisovenko, V.A. Gorodtsov, A.I. Rudskoy // Diamond & Related Materials. – 2019. – V. 97. – Art. № 107411. – 12 p. DOI: 10.1016/j.diamond.2019.04.034.
7. **Pierson, H.O.** Handbook of carbon, graphite, diamond, and fullerenes: Properties, processing and applications / H.O. Pierson. – Park Ridge, New Jersey: Noyes Publications, 1994. – 419 p.
8. Carbon nanotubes: Synthesis, structure, properties, and applications / ed. by M.S. Dresselhaus, G. Dresselhaus, Ph. Avouris // In series: Topics in Applied Physics. – V. 80. – Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag, 2001. – XV, 448 p. DOI: 10.1007/3-540-39947-X.
9. **Novoselov, K.S.** Electric field effect in atomically thin carbon films / K.S. Novoselov, A.K. Geim, S.V. Morozov, et al. // Science. – 2004. – V. 306. – I. 5696. – P. 666-669. DOI: 10.1126/science.1102896.
10. **Li, G.** Architecture of graphdiyne nanoscale films / G. Li, Y. Li, H. Liu, et al. // Chemical Communications. – 2010. – V. 46. – I. 19. – P. 3256-3258. DOI: 10.1039/B922733D.
11. **Zhang, S.** Penta-graphene: A new carbon allotrope / S. Zhang, J. Zhou, Q. Wang, et al. // Proceedings of the National Academy of Sciences. – 2015. – V. 112. – I. 8. – P. 2372-2377. DOI: 10.1073/pnas.1416591112.
12. **Gao, Y.** Ultrahard carbon film from epitaxial two-layer graphene / Y. Gao, T. Cao, F. Cellini, et al. // Nature Nanotechnology. – 2018. – V. 13. – I. 2. – P. 133-138. DOI:

10.1038/s41565-017-0023-9.

13. **Giannozzi, P.** QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials / P. Giannozzi, S. Baroni, N. Bonini // *Journal of Physics: Condensed Matter*. – 2009. – V. 21. – №. 39. – P. 395502-1-395502-19. DOI: 10.1088/0953-8984/21/39/395502.

14. **Perdew, J.P.** Generalized gradient approximation made simple / J.P. Perdew, K. Burke., M. Ernzerhof // *Physical Review Letters*. – 1996. – V. 77. – I. 18. – P. 3865-3868. DOI: 10.1103/physrevlett.77.3865.

15. **Troullier, N.** Efficient pseudopotentials for plane-wave calculations / N. Troullier, J.L. Martins // *Physical Review B*. – 1991. – V. 43. – I. 3. –P. 1993-2006. DOI: 10.1103/physrevb.43.1993.

16. **Грешняков, В.А.** Моделирование фазового перехода графита в алмазоподобную фазу *LA3* / В.А. Грешняков, Е.А. Беленков // *Журнал технической физики*. – 2016. – Т. 86. – Вып. 10. – С. 20-24.

17. **Greshnyakov, V.A.** Theoretical investigation of phase transitions of graphite and cubic 3C diamond into hexagonal 2H diamond under high pressures / V.A. Greshnyakov, E.A. Belenkov, M.M. Brzhezinskaya // *Physica Status Solidi B*. – 2019. – V. 256. – I. 7. – P. 1800575-1-1800575-8. DOI: 10.1002/pssb.201800575.

18. **Беленков, Е.А.** Структура, свойства и возможные механизмы формирования алмазоподобных фаз / Е.А. Беленков, В.А. Грешняков // *Физика твердого тела*. – 2016. – Т. 58. – Вып. 10. – С. 2069-2078.

19. **Belenkov, E.A.** Structures and properties of diamond-like phases derived from carbon nanotubes and three-dimensional graphites / E.A. Belenkov, V.A. Greshnyakov // *Journal of Materials Science*. – 2015. – V. 50. – I. 23. – P. 7627-7635. DOI: 10.1007/s10853-015-9325-1.

20. **Грешняков, В.А.** Расчет физико-химических характеристик новой ромбической структурной разновидности алмаза / В.А. Грешняков, Е.А. Беленков // *Неорганические материалы*. – 2018. – Т. 54. – Вып. 2. – С. 124-129. DOI: 10.7868/S0002337X18020021.

21. **Maslov, M.M.** Carbon vs silicon polyprismanes: a comparative study of metallic sp^3 – hybridized allotropes / M.M. Maslov, K.S. Grishakov, M.A. Gimaldinova, K.P. Katin // *Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures*. – 2019. – V. 28. – I. 2. – P. 97-103. DOI: 10.1080/1536383X.2019.1680974.

References:

1. **Belenkov, E.A.** Classification of structural modifications of carbon / E.A. Belenkov, V.A. Greshnyakov // *Physics of the Solid State*. – 2013. – V. 55. – I. 8. – P. 1754-1764. DOI: 10.1134/S1063783413080039.

2. **Lisovenko, D.S.** Equilibrium structures of carbon diamond-like clusters and their elastic properties / D.S. Lisovenko, V.A. Gorodtsov, Y.A. Baimova, L.K. Rysaeva, S.V. Dmitriev // *Physics of the Solid State*. – 2017. – V. 59. – I. 4. – P. 820-828. DOI: 10.1134/S106378341704014X.

3. **Greshnyakov, V.A.** Fazovye prevrashcheniya polimorfov almaza *LA3* i *LA5* [Phase transformations of *LA3* and *LA5* diamond polymorphs] / V.A. Greshnyakov, E.A. Belenkov // *Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials*. – 2019. – I. 11. – P. 458-465. DOI: 10.26456/pcascnn/2019.11.458. (In Russian).

4. **Kang, S.** Mechanical properties, lattice thermal conductivity, infrared and Raman spectrum

- of the fullerite C_{24} / S. Kang, Z. Xiang, H. Mu, Y. Cai // *Physics Letters A*. – 2019. – V. 384. – I. 1. – Art. № 126035. – 5 p. DOI: 10.1016/j.physleta.2019.126035.
5. **Babicheva, R.I.** Mechanical properties of two-dimensional sp^2 – carbon nanomaterials // *Journal of Experimental and Theoretical Physics*. – 2019. – V. 129. – I. 1. – P. 66-71. DOI: 10.1134/S1063776119070021
6. **Rysaeva, L.Kh.** Elastic properties of diamond-like phases based on carbon nanotubes / L.Kh. Rysaeva, J.A. Baimova, S.V. Dmitriev, D.S. Lisovenko, V.A. Gorodtsov, A.I. Rudskoy // *Diamond & Related Materials*. – 2019. – V. 97. – Art. № 107411. – 12 p. DOI: 10.1016/j.diamond.2019.04.034.
7. **Pierson, H.O.** Handbook of carbon, graphite, diamond, and fullerenes: Properties, processing and applications / H.O. Pierson. – Park Ridge, New Jersey: Noyes Publications, 1994. – 419 p.
8. Carbon nanotubes: Synthesis, structure, properties, and applications / ed. by M.S. Dresselhaus, G. Dresselhaus, Ph. Avouris // In series: Topics in Applied Physics. – V. 80. – Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag, 2001. – XV, 448 p. DOI: 10.1007/3-540-39947-X.
9. **Novoselov, K.S.** Electric field effect in atomically thin carbon films / K.S. Novoselov, A.K. Geim, S.V. Morozov, et al. // *Science*. – 2004. – V. 306. – I. 5696. – P. 666-669. DOI: 10.1126/science.1102896.
10. **Li, G.** Architecture of graphdiyne nanoscale films / G. Li, Y. Li, H. Liu, et al. // *Chemical Communications*. – 2010. – V. 46. – I. 19. – P. 3256-3258. DOI: 10.1039/B922733D.
11. **Zhang, S.** Penta-graphene: A new carbon allotrope / S. Zhang, J. Zhou, Q. Wang, et al. // *Proceedings of the National Academy of Sciences*. – 2015. – V. 112. – I. 8. – P. 2372-2377. DOI: 10.1073/pnas.1416591112.
12. **Gao, Y.** Ultrahard carbon film from epitaxial two-layer graphene / Y. Gao, T. Cao, F. Cellini, et al. // *Nature Nanotechnology*. – 2018. – V. 13. – I. 2. – P. 133-138. DOI: 10.1038/s41565-017-0023-9.
13. **Giannozzi, P.** QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials / P. Giannozzi, S. Baroni, N. Bonini // *Journal of Physics: Condensed Matter*. – 2009. – V. 21. – №. 39. – P. 395502-1-395502-19. DOI: 10.1088/0953-8984/21/39/395502.
14. **Perdew, J.P.** Generalized gradient approximation made simple / J.P. Perdew, K. Burke., M. Ernzerhof // *Physical Review Letters*. – 1996. – V. 77. – I. 18. – P. 3865-3868. DOI: 10.1103/physrevlett.77.3865.
15. **Troullier, N.** Efficient pseudopotentials for plane-wave calculations / N. Troullier, J.L. Martins // *Physical Review B*. – 1991. – V. 43. – I. 3. –P. 1993-2006. DOI: 10.1103/physrevb.43.1993.
16. **Greshnyakov, V.A.** Simulation of the phase transition of graphite to the diamond-like $LA3$ phase / V.A. Greshnyakov, E.A. Belenkov // *Technical Physics. The Russian Journal of Applied Physics*. – 2016. – V. 61. – I 10. – P. 1462-1466. DOI: 10.1134/S1063784216100133.
17. **Greshnyakov, V.A.** Theoretical investigation of phase transitions of graphite and cubic $3C$ diamond into hexagonal $2H$ diamond under high pressures / V.A. Greshnyakov, E.A. Belenkov, M.M. Brzhezinskaya // *Physica Status Solidi B*. – 2019. – V. 256. – I. 7. – P. 1800575-1-1800575-8. DOI: 10.1002/pssb.201800575.
18. **Belenkov, E.A.** Structure, properties, and possible mechanisms of formation of diamond-like phases / E.A. Belenkov, V.A. Greshnyakov // *Physics of the Solid State*. – 2016. – V. 58. – I. 10. – P. 2145-2154. DOI: 10.1134/S1063783416100073.

19. **Belenkov, E.A.** Structures and properties of diamond-like phases derived from carbon nanotubes and three-dimensional graphites / E.A. Belenkov, V.A. Greshnyakov // *Journal of Materials Science*. – 2015. – V. 50. – I. 23. – P. 7627-7635. DOI: 10.1007/s10853-015-9325-1.
20. **Greshnyakov, V.A.** Calculation of the physicochemical characteristics of a new orthorhombic form of diamond / V.A. Greshnyakov, E.A. Belenkov // *Inorganic Materials*. – 2018. – V. 54. – I. 2. – P. 111-116. DOI: 10.1134/S0020168518020061.
21. **Maslov, M.M.** Carbon vs silicon polyprismanes: a comparative study of metallic sp^3 -hybridized allotropes / M.M. Maslov, K.S. Grishakov, M.A. Gimaldinova, K.P. Katin // *Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures*. – 2019. – V. 28. – I. 2. – P. 97-103. DOI: 10.1080/1536383X.2019.1680974.

Original paper

**STRUCTURE AND STABILITY OF A TETRAGONAL DIAMOND-LIKE LAYER:
FIRST-PRINCIPLE CALCULATIONS**

V.A. Greshnyakov, E.A. Belenkov

Chelyabinsk State University, Chelyabinsk, Russia

DOI: 10.26456/pcascnn/2020.12.405

Abstract: Using the density functional theory method, a theoretical study of a novel layered DL_{4-8} polymorph of diamond, consisting of two polymerized tetragonal graphene L_{4-8} layers, was performed. It was established that the new diamond-like layer has a two-dimensional tetragonal lattice with the parameter $a = b = 0,3822$ nm and a thickness of 0,1599 nm. The calculated surface density and band gap of this layer are 0,109 $\mu\text{g}/\text{cm}^2$ and 2,63 eV, respectively. The new DL_{4-8} layer must be stable up to at least 220 K. It was also found that the DL_{4-8} layer can be obtained by strong uniaxial compression of two graphene L_{4-8} layers at a pressure of 29,6 GPa.

Keywords: *graphene, diamond-like layer, ab initio calculations, crystal structure, phase transitions.*

Грешняков Владимир Андреевич – к.ф.-м.н., доцент кафедры физики конденсированного состояния, физический факультет ФГБОУ ВО «Челябинский государственный университет»

Беленков Евгений Анатольевич – д.ф.-м.н., профессор кафедры физики конденсированного состояния, физический факультет ФГБОУ ВО «Челябинский государственный университет»

Vladimir A. Greshnyakov – Ph. D., Assistant Professor of Condensed Matter Physics Department, Chelyabinsk State University

Evgeny A. Belenkov – Dr. Sc., Full Professor of Condensed Matter Physics Department, Chelyabinsk State University

Поступила в редакцию/received: 10.07.2020; после рецензирования/revised: 20.07.2020; принята/accepted 26.07.2020.