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 13

ТВЕРЬ 2021

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: Издательство Тверского государственного университета, 2021. – Вып. 13. – 956 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, 2021

© Тверской государственнй университет, 2021

УДК 538.915

Оригинальная статья

ФОРМИРОВАНИЕ НОВОГО АЛМАЗОПОДОБНОГО БИСЛОЯ НА ОСНОВЕ ГРАФЕНА 5-7

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/2021.13.076

Аннотация: Выполнены первопринципные расчеты структуры и свойств орторомбического графена L_{5-7} и нового алмазоподобного бислоя, формируемого на его основе. Расчеты методом теории функционала плотности показали, что графен L_{5-7} , состоящий из топологических дефектов Стоуна-Уэльса, должен устойчиво существовать при нормальных условиях, и его структура должна волнообразно гофрироваться. При сильном одноосном сжатии бислойного графена L_{5-7} может происходить формирование нового алмазоподобного бислоя DL_{5-7} . Давление фазового перехода « $L_{5-7} \rightarrow DL_{5-7}$ » составляет 10,1 ГПа, когда межслоевое расстояние в бислойном графене уменьшается до 1,61 Å. Этот бислой имеет орторомбическую кристаллическую решетку ($pbam$) с параметрами $a=10,145$ Å и $b=5,270$ Å. Элементарная ячейка бислоя DL_{5-7} $pbam$ содержит 32 атома углерода. Длины связей изменяются в интервале от 1,5590 до 1,6226 Å, тогда как углы между связями принимают значения от 89,62 до 140,8°. Структура алмазоподобного бислоя должна быть стабильна до 270 К. Рассчитанные значения поверхностной плотности и разностной полной энергии этого бислоя относительно полной энергии алмаза равны $1,19 \cdot 10^{-5}$ г/см² и 1,31 эВ/атом, соответственно. Бислой DL_{5-7} $pbam$ должен быть полупроводником с шириной прямой запрещенной зоны 1,63 эВ.

Ключевые слова: графен, топологические дефекты, алмазоподобный слой, первопринципные расчеты, кристаллическая структура.

1. Введение

Графен – это двумерная структурная разновидность углерода, состоящая из трехкоординированных атомов. Графен обладает уникальными физико-химическими свойствами, поэтому материалы на его основе могут найти широкое применение в качестве молекулярных сит, а также при изготовлении молекулярных сенсоров, электродов в ионисторах и нанoeлектронных устройств [1-3]. Еще одной областью применения графена является использование в качестве предшественников для синтеза высокопрочных алмазоподобных соединений при высоких давлениях [4, 5]. При получении алмазоподобных соединений, как правило, происходит формирование трехмерных структур – политипов алмаза и его полиморфных разновидностей [4, 6-9]. Однако двумерные алмазоподобные наноструктуры, предложенные в работах [10, 11], еще не были синтезированы. Эти слоистые соединения могли бы найти практическое

применение при производстве высокопрочных конструкционных материалов и устройств полупроводниковой микро- и наноэлектроники. В результате первопринципных расчетов, выполненных в работах [12, 13], было установлено, что возможность получения алмазоподобных слоев заключается в сильном сжатии бислойного графена, причем давление фазового перехода графеновых слоев в алмазоподобные слои можно значительно уменьшить, используя в качестве предшественников графеновые слои с топологическими дефектами. Следовательно, данное исследование посвящено *ab initio* расчетам структуры и термической устойчивости графена 5–7 и нового алмазоподобного бислоя на его основе.

2. Методический раздел

В качестве исходной структуры графенового слоя 5–7 была использована структура пентагептита из работ [2, 14]. Расчеты структуры и свойств углеродных соединений были выполнены с помощью программного пакета Quantum ESPRESSO [15], используя метод теории функционала плотности (DFT) [16]. В методе DFT было использовано обобщенное градиентное приближение (GGA) [17]. Влияние ионных остовов атомов углерода учитывалось через сохраняющий норму псевдопотенциал. Расчеты для алмазоподобного бислоя проводились с использованием сетки из k -точек $25 \times 25 \times 1$. Волновые функции раскладывались по усеченному базисному набору плоских волн с энергией отсечки 820 эВ. Длина вектора элементарной трансляции c при геометрической оптимизации элементарной ячейки составляла 15 Å. Моделирование отжига углеродных слоев проводилось с помощью метода молекулярной динамики при использовании k -сеток $10 \times 10 \times 1$ с шагом 1 фс. Исследование прямого фазового перехода графеновых слоев в алмазоподобный бислой производилось по методике из работ [12, 18].

3. Результаты и обсуждение

На рис. 1 а приведена оптимизированная структура графенового слоя L_{5-7} , состоящего только из топологических дефектов Стоуна-Уэльса, при температуре 0 К. Элементарная ячейка этого слоя является простой прямоугольной с параметрами $a = 8,9919$ Å и $b = 4,6430$ Å. Поверхностная плотность графена L_{5-7} равна 76,4 мг/см², которая на 2,7% больше плотности обычного графена. Анализ показал, что атомы находятся в четырех неэквивалентных кристаллографических позициях. В графене L_{5-7} длины межатомных связей находятся в диапазоне от 1,3743 до 1,4449 Å, а углы между ковалентными связями принимают значения от 104,40 до

140,80°. Разностная полная энергия графена L_{5-7} относительно полной энергии гексагонального графена L_6 составляет 0,24 эВ/атом, поэтому необходимо оценить термическую устойчивость графена, состоящего из топологических дефектов. Имитация отжига производилась при температуре 400 К на протяжении 7 пс. График изменения полной энергии E_{total} от времени термической обработки представлен на рис. 2. В результате отжига графенового слоя L_{5-7} оказался устойчивым при температуре выше комнатной. Однако в процессе отжига наблюдается небольшая деформация структуры, выражающаяся в волнообразном искажении исходного плоского графенового слоя.

Рис. 1. Структуры углеродных слоев: а – орторомбического графена L_{5-7} , б – алмазоподобного бислоя DL_{5-7} *pbat*.

Структура новой слоевой разновидности алмаза может быть получена в результате сшивки двух параллельно расположенных графеновых слоев L_{5-7} . Если слои расположены не параллельно друг другу или их число превышает двух, то формируются структуры гибридных соединений, состоящих из 3- и 4-координированных атомов углерода. Геометрически оптимизированная структура нового алмазоподобного бислоя DL_{5-7} приведена на рис. 1 б. Наиболее вероятный способ синтеза бислоя DL_{5-7} может заключаться в сильном сжатии предшественников, подобных графиту, при низкой температуре [4, 5]. Анализ возможных способов синтеза показал, что прямоугольный бислой DL_{5-7} может быть сформирован в результате сжатия двух графеновых слоев L_{5-7} с упаковкой типа АА при вдоль оси, перпендикулярной плоскостям исходных графеновых слоев. Структурное преобразование начинается при сближении графеновых слоев на расстояние $\sim 1,787 \text{ \AA}$, когда давление на слои начинает превышать 10 ГПа, что можно наблюдать на рис. 3. Формирование структуры слоя DL_{5-7} заканчивается при уменьшении

межслоевого расстояния до 1,609 Å (см. рис. 3).

Рис. 2. Зависимость полной энергии E_{total} от времени термической обработки t графенового слоя L_{5-7} при 400 К. Фрагмент структуры графенового слоя после отжига приведен в правом верхнем углу.

Рис. 3. Зависимость разностной полной энергии от расстояния между графеновыми слоями для фазового перехода бислойного графена L_{5-7} в бислой $DL_{5-7} p_{bam}$.

Кристаллическая решетка нового алмазоподобного бислоя DL_{5-7} относится к слоевой группе симметрии p_{bam} . Прямоугольная (орторомбическая) элементарная ячейка бислоя DL_{5-7} имеет параметры $a = 10,145$ Å, $b = 5,270$ Å и содержит тридцать два атома. Атомы углерода в структуре алмазоподобного бислоя DL_{5-7} находятся в четырех

кристаллографически неэквивалентных позициях. Толщина бислоя составляет 1,6086 Å. Длины углерод-углеродных связей находятся в диапазоне значений от 1,5590 до 1,6226 Å. Длины связей в новом бислое на 0,6÷4,2% превышают расчетное значение длины связи в 3С алмазе. Углы между ковалентными связями изменяются от 89,62 до 140,8°. Поверхностная плотность бислоя DL_{5-7} составляет 0,24 мкг/см², которая больше плотности графена L_6 на 60% [19] и меньше плотности бислоя DL_6 на 3% [20]. Максимальный диаметр пор равен 2,183 Å. В структуре бислоя DL_{5-7} имеются звенья, подобные углеродным каркасам молекул пентапризмана, стабильных при нормальных условиях [21].

Рис. 4. Проекция кристаллической решетки бислоя DL_{5-7} *pbam* после 7 пс отжига.

Средние параметры деформации *Def* и *Str* бислоя DL_{5-7} *pbam* принимают значения 94,3° и 0,124 Å, соответственно. Поэтому новый бислой следует отнести к метастабильным углеродным наноструктурам [4]. Разностная полная энергия бислоя DL_{5-7} относительно полной энергии 3С алмаза составляет 1,31 эВ/атом. Так как данная величина превосходит соответствующие величины для алмазоподобных фаз [4, 22], кроме как для бислоев DL_{3-12} , DL_{4-8} и DL_{4-6-12} [12, 13], то необходимо исследовать термическую устойчивость нового бислоя. Моделирование отжига структуры слоя DL_{5-7} было выполнено с помощью метода молекулярной динамики в течение 7 пс при 270 К. В процессе отжига разрушение структуры бислоя DL_{5-7} *pbam* не наблюдалось (см. рис. 4), поэтому новый бислой должен быть устойчивым, как минимум, до 270 К.

Для исследования электронных свойств алмазоподобного бислоя DL_{5-7} *pbam* был выполнен расчет зонной структуры, которая изображена на рис. 5 а. Энергии электронов были вычислены на интервалах между четырьмя точками высокой симметрии (Г, X, Y и S) в зоне Бриллюэна для

простой орторомбической решетки. Наименьшая величина прямой запрещенной зоны составляет 1,63 эВ, которая на 71% меньше соответствующей расчетной величины для 3С алмаза. Также был проведен расчет плотности электронных состояний (см. рис. 5 б), который показал, что минимальная разница в значениях энергий электронов дна зоны проводимости и вершины валентной зоны составляет 1,45 эВ. Следовательно, новый бислой $DL_{5-7} pbat$ должен быть полупроводником.

Рис. 5. Рассчитанные зонная структура (а) и плотность электронных состояний (ПЭС) (б) алмазоподобного бислоя $DL_{5-7} pbat$.

4. Заключение

С помощью метода теории функционала плотности выполнено моделирование структуры и свойств графена, состоящего из топологических дефектов 5 и 7, и нового алмазоподобного бислоя на его

основе. Установлено, что графен L_{5-7} устойчив при температуре 400 К, однако наблюдается небольшое гофрирование. В процессе одноосного сжатия бислойного графена L_{5-7} при низких температурах до 10,1 ГПа возможно формирование нового орторомбического алмазоподобного бислоя DL_{5-7} . Структура бислоя DL_{5-7} *рбат* должна быть устойчива до 270 К. Новый бислой имеет поверхностную плотность 0,119 мкг/см² и должен быть широкозонным полупроводником с шириной прямой запрещенной зоны ~1,6 эВ.

Библиографический список:

1. **Geim, A.K.** The rise of graphene / A.K. Geim, K.S. Novoselov // *Nature Materials*. – 2007. – V. 6. – I. 3. – P. 183-191. DOI: 10.1038/nmat1849.
2. **Ивановский, А.Л.** Графеновые и графеноподобные материалы / А.Л. Ивановский // *Успехи химии*. – 2012. – Т. 81. – Вып. 7. – С. 571-605. DOI: 10.1070/RC2012v081n07ABEH004302.
3. **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.
4. **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.
5. **Zhai, J.** A review on the structure of cold-compressed graphite phase / J. Zhai, A. Wan, W. Wu // *Modern Physics Letters B*. – 2015. – V. 29. – № Supplement 1. – P. 1530011-1-1530011-16. DOI: 10.1142/S0217984915300112.
6. **Bundy, F.P.** The pressure-temperature phase and transformation diagram for carbon; updated through 1994 / F.P. Bundy, W.A. Bassett, M.S. Weathers et al. // *Carbon*. – 1996. – V. 34. – I. 2. – P. 141-153. DOI: 10.1016/0008-6223(96)00170-4.
7. **Грешняков, В.А.** Исследование формирования лонсдейлита из графита / В.А. Грешняков, Е.А. Беленков // *Журнал экспериментальной и теоретической физики*. – 2017. – Т. 151. – Вып. 2. – С. 310-321. DOI: 10.7868/S0044451017020092.
8. **Баимова, Ю.А.** Деформационное поведение трехмерных углеродных структур при гидростатическом сжатии / Ю.А. Баимова, Л.Х. Рысаева // *Журнал структурной химии*. – 2018. – Т. 59. – № 4. – С. 921-928. DOI: 10.26902/JSC20180419.
9. **Geng, P.** Atomistic insights on the pressure-induced multi-layer graphene to diamond-like structure transformation / P. Geng, P.S. Branicio // *Carbon*. – 2021. – V. 175. – P. 243-253. DOI: 10.1016/j.carbon.2021.01.007.
10. **Беленков, Е.А.** Классификация структурных разновидностей углерода / Е.А. Беленков, В.А. Грешняков // *Физика твердого тела*. – 2013. – Т. 55. – Вып. 8. – С. 1640-1650.
11. **Ohno, K.** Exploration of carbon allotropes with four-membered ring structures on quantum chemical potential energy surfaces / K. Ohno, H. Satoh, T. Iwamoto, H. Tokoyama, H. Yamakado // *Journal of Computational Chemistry*. – 2019. – V. 40. – I. 1. – P. 14-28. DOI: 10.1002/jcc.25556.
12. **Грешняков, В.А.** Структура и устойчивость алмазоподобного тетрагонального слоя: первопринципные расчеты / В.А. Грешняков, Е.А. Беленков // *Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов*. – 2020. – Вып. 12. – С. 405-414. DOI: 10.26456/pcascnn/2020.12.405.
13. **Грешняков, В.А.** Теоретическое исследование устойчивости и способов получения слоистых алмазоподобных наноструктур / В.А. Грешняков, Е.А. Беленков // *Письма о материалах*. – 2020. – Т. 10. – Вып. 4. – С. 457-462. DOI: 10.22226/2410-3535-2020-4-457-462.
14. **Deza, M.** Pentaheptite modifications of the graphite sheet / M. Deza, P.W. Fowler, M. Shtogrin, K. Vietze // *Journal of Chemical Information and Computer Sciences*. – 2000. – V. 40. – I. 6. – P. 1325-1332. DOI: 10.1021/ci000010j.
15. **Giannozzi, P.** QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials / P. Giannozzi, S. Baroni, N. Bonini et al. // *Journal of Physics: Condensed Matter*. – 2009. – V. 21. – №. 39. – P. 395502-1-395502-19. DOI: 10.1088/0953-8984/21/39/395502.

16. **Hohenberg, P.** Inhomogeneous electron gas / P. Hohenberg, W. Kohn // *Physical Review*. – 1964. – V. 136. – I. 3B. – P. B864-B871. DOI: 10.1103/physrev.136.b864.
17. **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.
18. **Беленков, Е.А.** Моделирование фазовых переходов графитов в алмазоподобные фазы / Е.А. Беленков, В.А. Грешняков // *Физика твердого тела*. – 2018. – Т. 60. – Вып. 7. – С. 1290-1297. DOI: 10.21883/FTT.2018.07.46111.363.
19. **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.
20. **Грешняков, В.А.** Первопринципные расчеты углеродных бислоев с алмазоподобными структурами / В.А. Грешняков, Е.А. Беленков // *Журнал структурной химии*. – 2020. – Т. 61. – Вып. 6. – С. 887-895. DOI: 10.26902/JSC_id57675
21. **Eaton, P.E.** Pentaprismane / P.E. Eaton, Y.S. Or, S.J. Branca // *Journal of the American Chemical Society*. – 1981. – V. 103. – I. 8. – P. 2134-2136. DOI: 10.1021/ja00398a062.
22. **Zhou, Y.** Three new tetragonal superhard sp^3 carbon allotropes / Y. Zhou, X. Chen, S.-L. Liu, L.-H. Gan // *Solid State Communications*. – 2020. – V. 323. – Art. no. 114095. – 10 p. DOI: 10.1016/j.ssc.2020.114095.

References:

1. Geim A.K., Novoselov K.S. The rise of graphene, *Nature Materials*, 2007, vol. 6, issue 3, pp. 183-191. DOI: 10.1038/nmat1849.
2. Ivanovskii A.L. Graphene-based and graphene-like materials, *Russian Chemical Reviews*, 2012, vol. 81, issue 7, pp. 571-605. DOI: 10.1070/RC2012v081n07ABEH004302.
3. Babicheva R.I., Dmitriev S.V., Korznikova E.A., Zhou K. Mechanical properties of two-dimensional sp^2 – carbon nanomaterials, *Journal of Experimental and Theoretical Physics*, 2019, vol. 129, issue 1, pp. 66-71. DOI: 10.1134/S1063776119070021.
4. Belenkov E.A., Greshnyakov V.A. Structure, properties, and possible mechanisms of formation of diamond-like phases, *Physics of the Solid State*, 2016, vol. 58, issue 10, pp. 2145-2154. DOI: 10.1134/S1063783416100073.
5. Zhai J., Wan A., Wu W. A review on the structure of cold-compressed graphite phase, *Modern Physics Letters B*, 2015, vol. 29, no. supplement 1, pp. 1530011-1-1530011-16. DOI: 10.1142/S0217984915300112.
6. Bundy F.P., Bassett W.A., Weathers M.S. et al. The pressure-temperature phase and transformation diagram for carbon; updated through 1994, *Carbon*, 1996, vol. 34, issue 2, pp. 141-153. DOI: 10.1016/0008-6223(96)00170-4.
7. Greshnyakov V.A., Belenkov E.A. Investigation on the formation of lonsdaleite from graphite, *Journal of Experimental and Theoretical Physics*, 2017, vol. 124, issue 2, pp. 265-274. DOI: 10.1134/S1063776117010125.
8. Baimova J.A., Rysaeva L.K. Deformation behavior of three-dimensional carbon structures under hydrostatic compression, *Journal of Structural Chemistry*, 2018, vol. 59, issue 4, pp. 884-890. DOI: 10.1134/S0022476618040200.
9. Geng P., Brancio P.S. Atomistic insights on the pressure-induced multi-layer graphene to diamond-like structure transformation, *Carbon*, 2021, vol. 175, pp. 243-253. DOI: 10.1016/j.carbon.2021.01.007.
10. Belenkov E.A., Greshnyakov V.A. Classification of structural modifications of carbon, *Physics of the Solid State*, 2013, vol. 55, issue 8, pp. 1754-1764. DOI: 10.1134/S1063783413080039.
11. Ohno K., Satoh H., Iwamoto T., Tokoyama H., Yamakado H. Exploration of carbon allotropes with four-membered ring structures on quantum chemical potential energy surfaces, *Journal of Computational Chemistry*, 2019, vol. 40, issue 1, pp. 14-28. DOI: 10.1002/jcc.25556.
12. Greshnyakov V.A., Belenkov E.A. Структура и устойчивость тетрагонального алмазоподобного слоя: первопринципные расчеты [Structure and stability of a tetragonal diamond-like layer: first-principle calculations], *Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов* [Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials], 2019, issue 12, pp. 405-414. DOI: 10.26456/pcascnn/2020.12.405. (In Russian).
13. Greshnyakov V.A., Belenkov E.A. Теоретическое исследование устойчивости и способов получения слоевых алмазоподобных наноструктур [Theoretical study of the stability and formation methods of layer diamond-like nanostructures], *Письма о материалах* [Letters on Materials], 2020, vol. 10, issue 4, pp. 457-462. DOI: 10.22226/2410-3535-2020-4-457-462. (In Russian).
14. Deza M., Fowler P.W., Shtogrin M., Vietze K. Pentaheptite modifications of the graphite sheet, *Journal of Chemical Information and Computer Sciences*, 2000, vol. 40, issue 6, pp. 1325-1332. DOI: 10.1021/ci000010j.

15. Giannozzi P., Baroni S., Bonini N. et al. QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials, *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2009, vol. 21, no. 39, pp. 395502-1-395502-19. DOI: 10.1088/0953-8984/21/39/395502.
16. Hohenberg P., Kohn W. Inhomogeneous electron gas, *Physical Review*, 1964, vol. 136, issue 3B, pp. B864-B871. DOI: 10.1103/physrev.136.b864.
17. Perdew J.P., Burke K., Ernzerhof M. Generalized gradient approximation made simple, *Physical Review Letters*, 1996, vol. 77, issue 18, pp. 3865-3868. DOI: 10.1103/physrevlett.77.3865.
18. Belenkov E.A., Greshnyakov V.A. Modeling of phase transitions of graphites to diamond-like phases, *Physics of the Solid State*, 2018, vol. 60, issue 7, pp. 1294-1302. DOI: 10.1134/S1063783418070065.
19. Pierson H.O. Handbook of carbon, graphite, diamond, and fullerenes: Properties, processing and applications. – Park Ridge, New Jersey: Noyes Publications, 1994, 419 p.
20. Greshnyakov V.A., Belenkov E.A. Ab initio calculations of carbon bilayers with diamond-like structures, *Journal of Structural Chemistry*, 2020, vol. 61, issue 6, pp. 835-843. DOI: 10.1134/S0022476620060013.
21. Eaton, P.E. Or Y.S., Branca S.J. Pentaprismene, *Journal of the American Chemical Society*, 1981, vol. 103, issue 8, pp. 2134-2136. DOI: 10.1021/ja00398a062.
22. Zhou Y., Chen X., Liu S.-L., Gan L.-H. Three new tetragonal superhard sp^3 carbon allotropes, *Solid State Communications*, 2020, vol. 323, art. no. 114095, 10 p. DOI: 10.1016/j.ssc.2020.114095.

Original paper

FORMATION OF A NOVEL DIAMOND-LIKE BILAYER BASED ON 5-7 GRAPHENE

V.A. Greshnyakov, E.A. Belenkov

Chelyabinsk State University, Chelyabinsk, Russia

DOI: 10.26456/pcascnn/2021.13.076

Abstract: First-principle calculations of the structure and properties of orthorhombic L_{5-7} graphene and a novel diamond-like bilayer formed on its basis are performed. The calculations using the density functional theory method showed that L_{5-7} graphene of Stone-Wales defects should exist stably under normal conditions, and its structure should be corrugated in a wave-like manner. Under strong uniaxial compression of bilayer L_{5-7} graphene, the formation of the novel diamond-like DL_{5-7} bilayer can occur. The pressure of the « $L_{5-7} \rightarrow DL_{5-7}$ » phase transition is 10,1 GPa, when the interlayer distance in bilayer graphene decreases to 1,61 Å. This bilayer has an orthorhombic crystal lattice (*pbam*) with the parameters $a = 10,145$ Å and $b = 5,270$ Å. The unit cell of the DL_{5-7} *pbam* bilayer contains 32 carbon atoms. The bond lengths vary in the range from 1,5590 to 1,6226 Å, while the angles between these bonds range from 89,62 to 140,8°. The structure of the diamond-like bilayer should be stable up to 270 K. The calculated values of the surface density and the difference total energy of this bilayer relative to the diamond total energy are $1,19 \cdot 10^{-5}$ g/cm² and 1,31 eV/atom, respectively. The DL_{5-7} *pbam* bilayer should be a semiconductor with a straight bandgap of 1,63 eV.

Keywords: *graphene, topological defects, diamond-like layer, ab initio calculations, crystal structure.*

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, Condensed Matter Physics Department, Chelyabinsk State University

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

Поступила в редакцию/received: 06.09.2021; после рецензирования/revised: 06.10.2021; принята/accepted 09.10.2021.