УДК 538.915 *Оригинальная статья*

Структура и свойства нового гексагонального клатрата C_{108}

В.А. Грешняков[1,2]
[1]ФБГОУ ВО «Челябинский государственный университет»
454001, Россия, Челябинск, ул. Братьев Кашириных, 129
[2]ФГАОУ ВО «Балтийский федеральный университет им. Иммануила Канта»
236041, Россия, Калининград, ул. Александра Невского, 14
v.greshnyakov@yandex.ru

DOI: 10.26456/pcascnn/2026.18.223

Аннотация: Впервые изучена структура и свойства клатратной разновидности углерода C_{108} с помощью метода теории функционала плотности с обобщенным градиентным приближением. Новая наноструктурированная фаза имеет гексагональную кристаллическую решетку, относящуюся к пространственной группе $P6m2$, с параметрами $a = 6{,}813$ Å и $c = 18{,}07$ Å, которую можно рассматривать как промежуточную между решетками углеродного клатрата второго типа и гексагонального клатрата C_{40}. Структура клатрата C_{108} состоит из фуллереноподобных блоков C_{20}, C_{24}, C_{26} и C_{28}, из-за чего его плотность меньше алмазной на 13,8%. Поскольку полная энергия нового клатрата выше соответствующей величины для алмаза только на 0,10 эВ/атом, то предложенная фаза должна устойчиво существовать при нормальных условиях. Гексагональный клатрат C_{108} должен быть широкозонным полупроводником с высокими механическими характеристиками: объемным модулем 384 ГПа, модулем Юнга ~880-890 ГПа, твердостью по Виккерсу 81 ГПа. Также установлено, что структура клатрата C_{108} должна быть стабильна при сильном гидростатическом сжатии, как минимум, до 70 ГПа. Идентификация новой фазы возможна при использовании методов рентгеновской дифракции.

Ключевые слова: наноструктурированные соединения, углеродный клатрат, механические свойства, стабильность, первопринципные расчеты.

Грешняков Владимир Андреевич – д.ф.-м.н., доцент кафедры физики конденсированного состояния ФГБОУ ВО «Челябинский государственный университет»; ведущий научный сотрудник ФГАОУ ВО «Балтийский федеральный университет им. Иммануила Канта»

Original paper

Structure and properties of a novel hexagonal C_{108} clathrate

V.A. Greshnyakov[1,2]
[1]Chelyabinsk State University, Chelyabinsk, Russia
[2]Immanuel Kant Baltic Federal University, Kaliningrad, Russia

DOI: 10.26456/pcascnn/2026.18.223

Abstract: The structure and properties of a new clathrate variety of carbon (C_{108}) have been studied for the first time using density functional theory with a generalized gradient approximation. The new nanostructured phase has a hexagonal crystal lattice belonging to the $P6m2$ space group, with parameters $a = 6{,}813$ Å and $c = 18{,}07$ Å, which can be considered intermediate between the lattices of type II carbon clathrate and the hexagonal C_{40} clathrate. The structure of the C_{108} clathrate consists of fullerene-like blocks C_{20}, C_{24}, C_{26}, and C_{28}, due to which its density is 13,8% lower than that of diamond. Since the total energy of the new clathrate is only 0,10 eV/atom higher than that of diamond, the proposed phase should stably exist under normal conditions. The hexagonal C_{108} clathrate is expected to be a wide-bandgap semiconductor with high mechanical properties: a bulk modulus of 384 GPa, the Young's modulus of ~880-890 GPa, and a Vickers hardness of 81 GPa. It has also been established that the structure of the C_{108} clathrate should be stable under strong hydrostatic compression at least up to 70 GPa. Identification of the new phase is possible using X-ray diffraction methods.

Keywords: nanostructured compounds, carbon clathrate, mechanical properties, stability, first-

© В.А. Грешняков, 2026

principles calculations.

Vladimir A. Greshnyakov – Dr. Sc., Assistant Professor, Condensed Matter Physics Department, Chelyabinsk State University; Leading Researcher, Immanuel Kant Baltic Federal University, ORCID: 0000-0002-2686-374X

Поступила в редакцию/received: 05.09.2026; после рецензирования/revised: 27.09.2026; принята/accepted: 01.10.2026.

1. Введение

Углеродные соединения отличаются большим разнообразием фаз и наноструктур, свойства которых в значительной степени зависят от гибридизации составляющих их атомов [1]. Исходя из структурного разнообразия, особое внимание требуют неорганические алмазоподобные соединения, состоящие из sp^3-гибридизированных атомов углерода, для которых характерны явления политипизма [2, 3] и полиморфизма [4-7]. Структура полиморфов значительно отличается, что приводит к значимому изменению свойств [4-7], в отличие от политипов, которые отличаются только порядком чередования слоев [8]. Поэтому с фундаментальной точки зрения особую значимость имеет решение проблемы определения всевозможных полиморфных конфигураций алмаза. Особое внимание должно быть уделено поиску наиболее стабильных полиморфных разновидностей. На основе результатов первопринципного моделирования установлено, что наиболее стабильными полиморфами алмаза должны быть углеродные клатраты [9]. В клатратах происходит понижение плотности за счет формирования наноразмерных структурных блоков в виде полиэдров [9, 10], из-за чего полная энергия системы повышается в меньшей мере по сравнению с фазами высокой плотности [11]. Также углеродные клатраты должны обладать превосходными механическими характеристиками [9, 12, 13], а некоторые из них могут быть ауксетиками [14], что определяет их потенциал применения с практической точки зрения. Поэтому цель данной работы – теоретическое исследование структуры, свойств и возможности обнаружения нового углеродного клатрата, состоящего из наиболее стабильных полиэдрических звеньев.

2. Методический раздел

Начальная кристаллическая решетка новой алмазоподобной фазы была получена в рамках методики из работы [1]. Дальнейшее изучение структуры и свойств было выполнено при использовании программного комплекса Quantum ESPRESSO [15], в котором реализован метод теории функционала плотности в обобщенном градиентном приближении [16]. Псевдопотенциал Трулье-Мартинса, сохраняющий норму, был использован для учета влияния ионных остовов углерода. Расчеты для алмазоподобных фаз проводились с использованием сеток из k точек от

6×6×6 до 10×10×10. Волновые функции раскладывались по усеченному базисному набору плоских волн с энергией отсечки от 52 до 60 Ридберг. Адекватность выбранного приближения и параметров ранее была проверена при расчете структурных и энергетических характеристик графито- и алмазоподобных соединений [17, 18].

Моделирование отжига молекулярного фрагмента алмазоподобной фазы проводилось с помощью метода молекулярной динамики с шагом 1 фс при использовании ромбической ячейки с параметрами >12 Å и G-точки в зоне Бриллюэна. Расчеты порошковых рентгенограмм выполнялись по стандартной методике из работы [19] для $Cu-K_\alpha$ излучения. Объемные модули были вычислены из модифицированного уравнения Кумара-Шармы [20]. Твердость по Виккерсу была определена по формуле из статьи [21]. Анализ рассчитанной кристаллической структуры выполнен с помощью FINDSYM [22].

3. Результаты численного моделирования и обсуждение

Структура нового клатрата может быть получена в результате плотной упаковки фуллереноподобных блоков C_{20}, C_{24}, C_{26} и C_{28} (см. рис. 1). Кристаллическая решетка клатрата C_{108} имеет гексагональную ячейку с параметрами a = 6,813 Å и c = 18,07 Å (пространственная группа – $P6m2$ № 187), в которой находится 108 атомов углерода (см. рис. 1). Структура характеризуется 20 атомными позициями Уайкова. Клатрат содержит нанопоры с максимальным диаметром 5,18 Å, соответствующие полиэдрическим структурным единицам C_{28}. В структуре клатрата C_{108} имеются напряженные области, в которых одна межатомная связь имеет достаточно большую длину (1,696 Å) по сравнению с алмазной (1,556 Å). Однако это локальное увеличение длины связи компенсируется значительным уменьшением длины близлежащих связей до 1,510 Å. Углы между $C-C$ связями находятся в пределах от 105,7 до 124,2°. Средние параметры напряжений <*Def*> и <*Str*>, введенные в работе [23], принимают значения 17,5° и 0,076 Å, соответственно. Эти величины, несмотря на значительное увеличение длин некоторых связей, меньше деформационных параметров для практически всех алмазоподобных фаз с эквивалентными позициями атомов [4]. Понижение общей деформации структуры клатрата C_{108} можно объяснить наличием в его структуре углеродных циклов только из 5 и 6 звеньев, углы между связями в которых наиболее близки к таковым для алмаза. Стоит отметить, что новый клатрат C_{108} можно рассматривать как промежуточную фазу между кубическим клатратом II типа C_{34} [9] и гексагональным клатратом C_{40} [24].

Поскольку гексагональный клатрат C_{108} имеет пористую структуру,

то его плотность (2,966 г/см^3) на 13,8% меньше плотности $3C$ алмаза. Механическая стабильность клатрата C_{108} изучалась в процессе сильного гидростатического сжатия до давления ~70 ГПа без ограничения на симметрию. В результате расчетов установлено, что структура C_{108} является стабильной, однако при давлении выше 45 ГПа происходит небольшое изменение кристаллической решетки, выражающееся в уменьшении жесткости, из-за чего изменение объема новой фазы приближается к таковому для клатрата C_{24} (см. рис. 2 а), изученного в работе [10]. В свою очередь, энтальпия новой фазы при сжатии постепенно увеличивается (см. рис. 2 б) без значительных изменений в производной по давлению. Модуль объемного сжатия (B_0) клатрата C_{108} равен 384 ГПа, который на 18% меньше B_0 для $3C$ алмаза и на 2% выше соответствующей величины для клатрата C_{24}. В результате растяжения структуры вдоль кристаллографических осей [100], [110] и [001] гексагонального клатрата C_{108} соответственно установлены модули Юнга 880,4, 879,6 и 889,6 ГПа. Коэффициенты Пуассона новой фазы положительны и изменяются в пределах от 0,078 до 0,084. Клатрат C_{108} обладает твердостью по Виккерсу ~ 81 ГПа, которая лишь на 11% меньше алмазной и фактически совпадает с твердостью клатрата II и C_{40}.

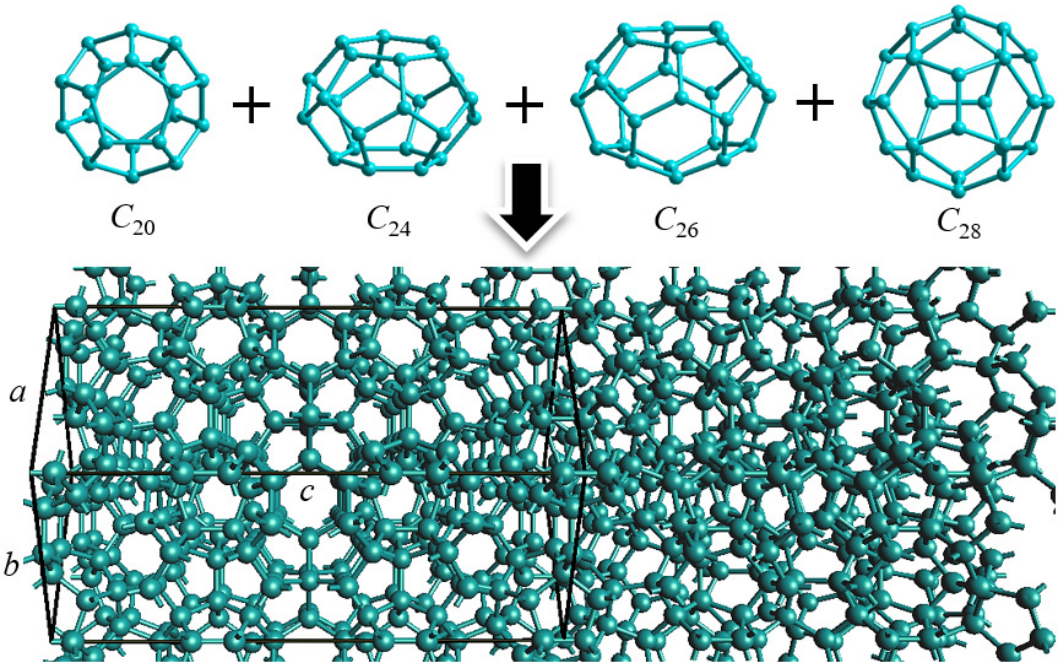


Рис. 1. Структурные составляющие и кристаллическая решетка клатрата C_{108}.

Алмазоподобные углеродные соединения, как правило, являются диэлектриками, однако в зависимости от напряженности структурных звеньев гипотетические фазы могут проявлять свойства полупроводников [4-7, 9, 10, 12, 13]. Деформационные параметры относят новую фазу к

диэлектрикам [4], однако для более точной оценки электронных свойств клатрата C_{108} был выполнен расчет зонной структуры, изображенной на рис. 3 а. Расчет энергий электронов произведен на интервалах между точками высокой симметрии A, G, H, K и M в зоне Бриллюэна, соответствующей гексагональной элементарной ячейке. Минимальное значение прямой запрещенной зоны равно 3,77 эВ, которое на 32,8% ниже соответствующего значения для кубического алмаза, а максимальное значение – 4,88 эВ. Полная плотность электронных состояний клатрата C_{108} приведена на рис. 3 б. Установлено, что ширина непрямой запрещенной зоны составляет 3,76 эВ, которая меньше значения непрямой зоны алмаза на 12,1%, поэтому новый гексагональный клатрат должен быть широкозонным полупроводником.

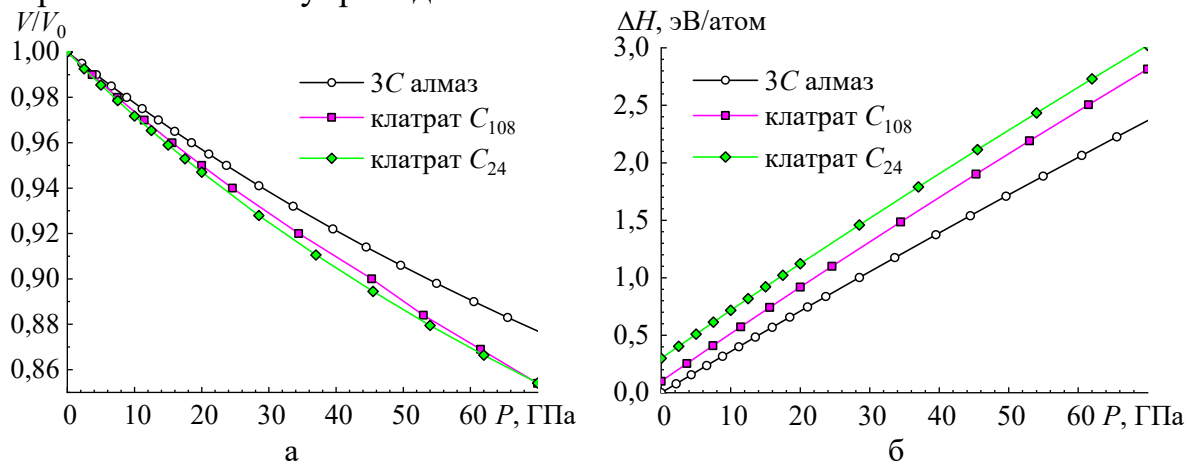


Рис. 2. Зависимости относительного объема от давления (а) и энтальпии от давления (б) для алмаза и углеродных клатратов.

Поскольку расчетная внутренняя энергия нового клатрата при отсутствии давления выше внутренней энергии кубического алмаза только на 0,10 эВ/атом, то клатрат C_{108} должен быть метастабильной фазой при нормальных условиях. Несмотря на относительно низкие значения разностной внутренней энергии и средних параметров деформации <*Def*> и <*Str*> бислоя по сравнению с другими алмазоподобными фазами [4, 10, 23], в структуре клатрата C_{108} имеются плоские 6-членные звенья с межатомным расстоянием 1,696 Å, которые могут быть потенциальными центрами разрушения структуры на границе фазы. Следовательно, необходимо изучить изменение структуры наиболее напряженных звеньев клатрата при температуре, близкой к комнатной. Имитация отжига при 300 K была выполнена с помощью метода молекулярной динамики для наиболее напряженной гибридной молекулы $C_{39}H_{28}$, исходная структура которой приведена на рис. 4 а. После 7 пс отжига происходит вращение молекулы с небольшим искажением ее структуры (см. рис. 4б и 4в). Так как в процессе отжига разрушение структуры молекулы $C_{39}H_{28}$ не

наблюдается, то при получении новый гексагональный клатрат может быть стабильным при комнатной температуре.

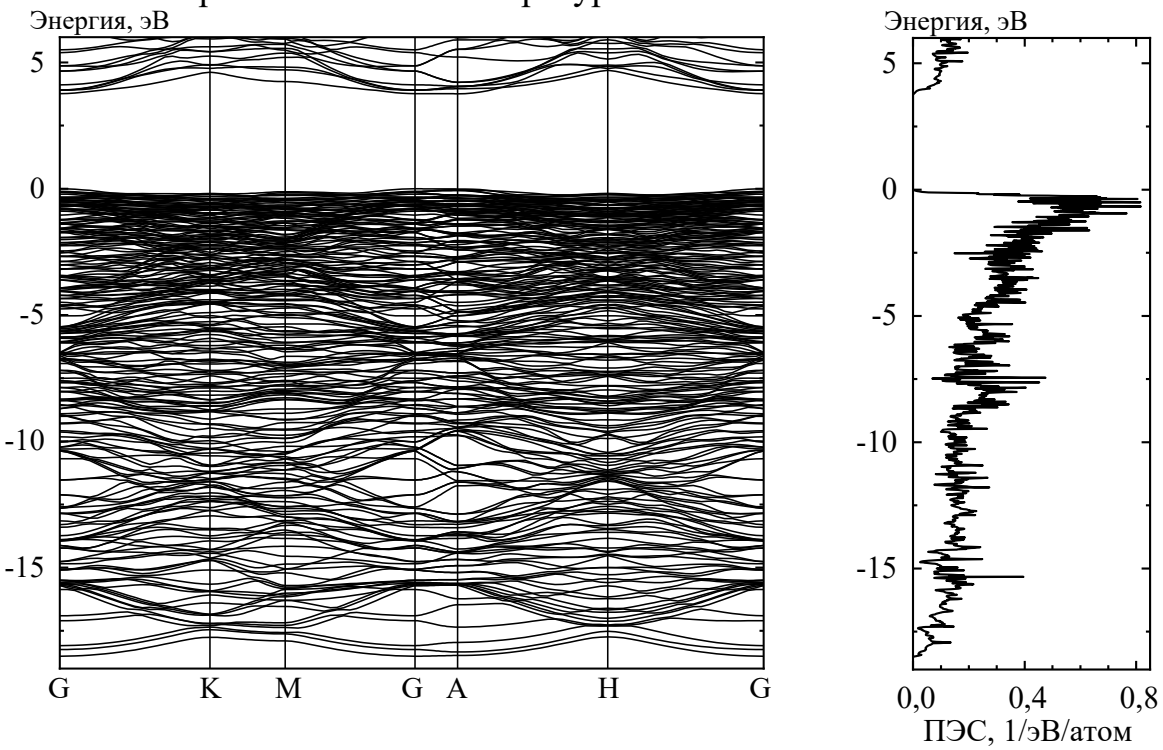
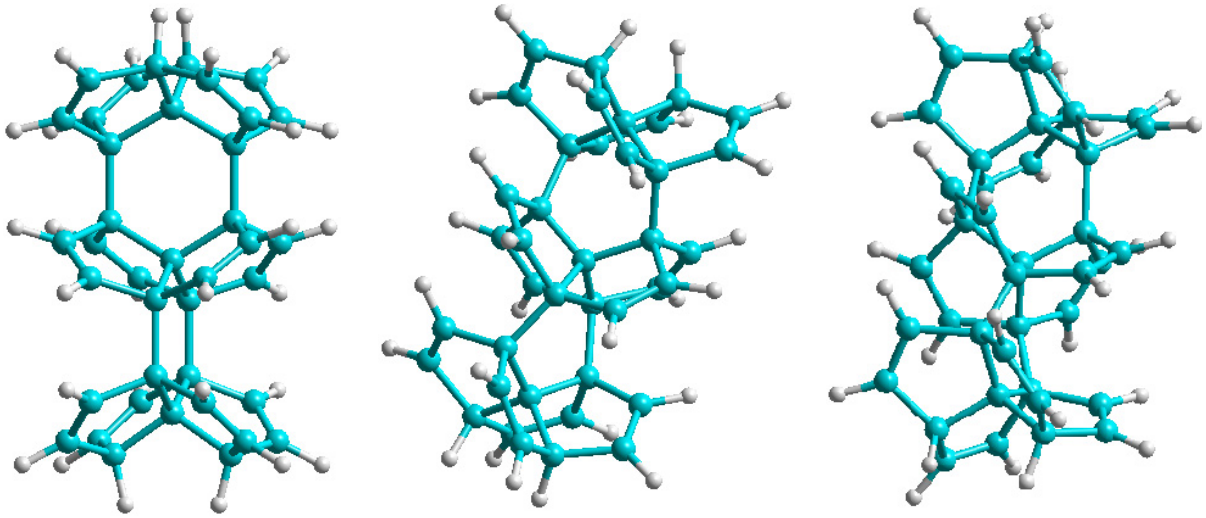


Рис. 3. Рассчитанные зонная структура и плотность электронных состояний (ПЭС) гексагонального клатрата C_{108}.



а б в

Рис. 4. Молекулярный фрагмент клатрата C_{108} в процессе отжига: а – $t = 0$ пс; б – $t = 4{,}0$ пс; в – $t = 8{,}0$ пс.

Так как углеродные соединения отличаются огромным разнообразием в рамках одного аллотропа (в частности, алмаза) [2-13], то для возможности однозначной идентификации необходимы новые фазы в микроскопических объемах. В таком случае можно использовать методы рентгеновской дифракции. Для материала из порошка с размером

наночастиц клатрата C_{108} ~ 50 нм расчетная рентгенограмма приведена на рис. 5 а. Все основные дифракционные максимумы новой фазы находятся в области 2θ от 4 до 87°, среди которых одиннадцать наиболее интенсивных максимумов находятся на удвоенных углах дифракции 4,89, 9,79, 14,71, 15,02, 26,16, 28,98, 30,14, 30,71, 31,91, 47,94 и 50,94° (см. рис. 5 а). Также для сопоставления были рассчитаны рентгенограммы кубических алмаза (см. рис. 5 б) и клатрата II типа (см. рис. 5 в) и гексагонального клатрата C_{40} (см. рис. 5 г), структурные звенья которых образуют новый гексагональный клатрат C_{108}. Установлено, что даже при наличии этих дополнительных фаз наблюдается полное перекрытие только четырех максимумов нового клатрата с одним максимумом клатрата II и тремя максимумами клатрата C_{40}. Следовательно, клатрат C_{108} может быть однозначно идентифицирован по одному дифракционному максимуму высокой интенсивности, трем максимумах средней интенсивности и трем максимумам низкой интенсивности (см. рис. 5).

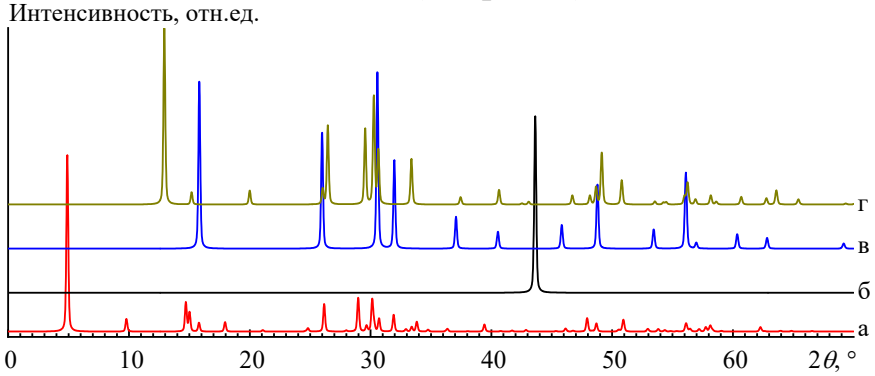


Рис. 5. Расчетные рентгенограммы алмазоподобных соединений: а – клатрат C_{108}; б – кубический алмаз; в – клатрат II типа; г – клатрат C_{40}.

4. Заключение

В данной работе впервые выполнено первопринципное исследование структуры и свойств нового углеродного гексагонального клатрата C_{108}, состоящего из полиэдрических блоков C_{20}, C_{24}, C_{26} и C_{28}. Новый клатрат может быть рассмотрен как промежуточная фаза между клатратом II типа [9] и гексагональным клатратом C_{40} [24]. Гексагональный клатрат C_{108} должен быть сверхтвердой фазой, стабильной при комнатной температуре, поэтому может найти практическое применение в качестве низкосжимаемых сверхтвердых материалов или защитных покрытий. Новый клатрат без допирования отличается от алмаза меньшей запрещенной зоной (на 11%), что относит его к широкозонным полупроводникам. Возможный способ получения клатрата C_{108} может заключаться в послойном росте гибридных ячеистых углеродных слоев

[10]. Идентификацию новой фазы можно осуществить при использовании расчетной рентгенограммы. Структурный тип клатрата C_{108} также должен быть характерен для кремниевого аналога, поскольку Si клатрат II является одной из наиболее стабильных кремниевых фаз [25].

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 25-72-31032 (https://rscf.ru/project/25-72-31032/).

Библиографический список:

1. **Belenkov, E.A.** Classification schemes of carbon phases and nanostructures / E.A. Belenkov, V.A. Greshnyakov // New Carbon Materials. 2013. – V. 28. – I. 4. – P. 273-283. DOI: 10.1016/S1872-5805(13)60081-5.
2. **Bean, J.J.** Resolving Lonsdaleite's decade-long controversy: Atomistic insights into a metastable diamond polymorph / J.J. Bean, N.K. Katiyar, R.M. Forrest, et al. // Diamond and Related Materials. – 2025. – V. 157. – Art. № 112405. – 9 p. DOI: 10.1016/j.diamond.2025.112405.
3. **Yu, T.** Hexagonal diamond formation mechanism: A review / T. Yu, S. Zhu // Matter and Radiation at Extremes. – 2026. – V. 11. – I. 3. – Art. № 033801. – 12 p. DOI: 10.1063/5.0310909.
4. **Беленков, Е.А.** Структура, свойства и возможные механизмы формирования алмазоподобных фаз / Е.А. Беленков, В.А. Грешняков // Физика твердого тела. – 2016. – Т. 58. – № 10. – С. 2069-2078.
5. **Kou, J.** sp^3-Hybridized superhard trigonal carbon allotropes: A first principle study / J. Kou, Y. Zhou, P. Luo, L.-H. Gan // Computational Materials Science. – 2021. – V. 190. – Art. № 110269. – 8 p. DOI: 10.1016/j.commatsci.2020.110269.
6. **Gao, Q.** Architecture design of novel carbon family: Polyhedra as building blocks / Q. Gao, L. Ou, Z. Hu // Carbon Trends. – 2023. – V. 11. – Art. № 100256. – 8 p. DOI: 10.1016/j.cartre.2023.100256.
7. **Wan, T.** Design and physical property study of seven novel carbon allotropes by random methods combined group and graph theories / T. Wan, Q. Fan, M. Wei et al. // Computational Materials Science. – 2024. – V. 244. – Art. № 113179. – 14 p. DOI: 10.1016/j.commatsci.2024.113179.
8. **Беленков, Е.А.** Структурные разновидности политипов / Е.А. Беленков, В.А. Грешняков // Физика твердого тела. – 2017. – Т. 59. – Вып. 10. – С. 1905-1913. DOI: 10.21883/FTT.2017.10.44957.088.
9. **Zhu, J.** Carbon clathrates as strong lightweight structures / J. Zhu, Ke Xu, Z. Zhang, et al. // International Journal of Mechanical Sciences. – 2021. – V. 202-203. – Art. № 106509. – 9 p. DOI: 10.1016/j.ijmecsci.2021.106509.
10. **Greshnyakov, V.A.** Carbon clathrates C_{24}, C_{28} and CA6: Structure formation and properties / V.A. Greshnyakov, V.V. Pavlik, M.E. Belenkov, et al. // Letters on Materials. – 2026. – V. 16. – I. 1. – P. 23-29. DOI: 10.48612/letters/2026-1-23-29.
11. **Li, S.** Dense as diamond: Pn-C_{10}, a superhard sp^3 carbon allotrope / S. Li, J. Zhang, J. Wang, et al. // Applied Physics Letters. – 2021. – V. 118. – I. 1. – Art. № 012107. – 6 p. DOI: 10.1063/5.0032528.
12. **Li, Z.** Superhard superstrong carbon clathrate / Z. Li, M. Hu, M. Ma et al. // Carbon. – 2016. – V. 105. – P. 151-155. DOI: 10.1016/j.carbon.2016.04.038.
13. **Liu, H.** Four superhard tetragonal carbon allotropes: First-principles calculations / H. Liu, M. Xing, Q. Fan // Diamond and Related Materials. – 2023. – V. 135. – Art. № 109854. – 9 p. DOI: 10.1016/j.diamond.2023.109854.
14. **Baimova, J.A.** An overview of mechanical properties of diamond-like phases under tension / J.A. Baimova // Nanomaterials. – 2024. – V. 14. – I. 2. – Art. № 129. – 16 p. DOI: 10.3390/nano14020129.
15. **Giannozzi, P.** Advanced capabilities for materials modelling with Quantum ESPRESSO / P. Giannozzi, O. Andreussi, T. Brumme, et al. // Journal of Physics: Condensed Matter. – 2017. – V. 29. – № 46. – Art. № 465901. – 31 p. DOI: 10.1088/1361-648X/aa8f79.
16. **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.
17. **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.
18. **Грешняков, В.А.** Формирование нового алмазоподобного бислоя на основе графена 5-7 / В.А. Грешняков, Е.А. Беленков // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и

наноматериалов. – 2021. – Вып. 13. – С. 76-84. DOI: 10.26456/pcascnn/2021.13.076.
19. **Уманский, Я.С.** Кристаллография, рентгенография и электронная микроскопия / Я.С. Уманский, Ю.А. Скаков, А.Н. Иванов, Л.Н. Расторгуев. – М.: Металлургия, 1982. – 632 с.
20. **Грешняков, В.А.** Методика расчета модуля объемной упругости / В.А. Грешняков, Е.А. Беленков // Известия вузов. Физика. – 2014. – Т. 57. – № 6. – С. 24-29.
21. **Gao, F.** Hardness of covalent crystals / F. Gao, J. He, E. Wu, et al. // Physical Review Letters. – 2003. – V. 91. – I. 1. – Art. № 015502. – 4 p. DOI: 10.1103/PhysRevLett.91.015502.
22. **Stokes, H.T.** Program for identifying the space group symmetry of a crystal / H.T. Stokes, D.M. Hatch // Journal of Applied Crystallography. – 2005. – V. 38. – I. 1. – P. 237-238. DOI: 10.1107/s0021889804031528.
23. **Грешняков, В.А.** Расчет физико-химических характеристик новой ромбической структурной разновидности алмаза / В.А. Грешняков, Е.А. Беленков // Неорганические материалы. – 2018. – Т. 54. – № 2. – С. 124-129. DOI: 10.7868/S0002337X18020021.
24. **Wang, J.-T.** Phase stability of carbon clathrates at high pressure / J.-T. Wang, C. Chen, D.-S. Wang et al. // Journal of Applied Physics. – 2010. – V. 107. – I. 6. – Art. № 063507. – 4 p. DOI: 10.1063/1.3359682.
25. **Vollondat, R.** Synthesis and characterization of silicon clathrates of type I Na_8Si_{46} and type II Na_xSi_{136} by thermal decomposition / R. Vollondat, S. Roques, C. Chevalier et al. // Journal of Alloys and Compounds. – 2022. – V. 903. – Art. № 163967. – 7 p. DOI: 10.1016/j.jallcom.2022.163967.

References:

1. Belenkov E.A., Greshnyakov V.A. Classification schemes of carbon phases and nanostructures, *New Carbon Materials*, 2013, vol. 28, issue 4, pp. 273-283. DOI: 10.1016/S1872-5805(13)60081-5.
2. Bean J.J., Katiyar N.K., Forrest R.M. et al. Resolving Lonsdaleite's decade-long controversy: Atomistic insights into a metastable diamond polymorph, *Diamond and Related Materials*, 2025, vol. 157, art. no. 112405, 9 p. DOI: 10.1016/j.diamond.2025.112405.
3. Yu T., Zhu S. Hexagonal diamond formation mechanism: a review, *Matter and Radiation at Extremes*, 2026, vol. 11, issue 3, art. no. 033801, 12 p. DOI: 10.1063/5.0310909.
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. Kou J., Zhou Y., Luo P., Gan L.-H. sp^3-Hybridized superhard trigonal carbon allotropes: A first principle study, *Computational Materials Science*, 2021, vol. 190, art. no. 110269, 8 p. DOI: 10.1016/j.commatsci.2020.110269.
6. Gao Q., Ou L., Hu Z. Architecture design of novel carbon family: Polyhedra as building blocks, *Carbon Trends*, 2023, vol. 11, art. no. 100256, 8 p. DOI: 10.1016/j.cartre.2023.100256.
7. Wan T., Fan Q., Wei M. et al. Design and physical property study of seven novel carbon allotropes by random methods combined group and graph theories, *Computational Materials Science*, 2024, vol. 244, art. no. 113179, 14 p. DOI: 10.1016/j.commatsci.2024.113179.
8. Belenkov E.A., Greshnyakov V.A. Structural varieties of polytypes, *Physics of the Solid State*, 2017, vol. 59, issue 10, pp. 1926-1933. DOI: 10.1134/S1063783417100055.
9. Zhu J., Xu Ke, Zhang Z. et al. Carbon clathrates as strong lightweight structures, *International Journal of Mechanical Sciences*, 2021, vol. 202-203, art. no. 106509, 9 p. DOI: 10.1016/j.ijmecsci.2021.106509.
10. Greshnyakov V.A., Pavlik V.V., Belenkov M.E. et al. Carbon clathrates C_{24}, C_{28} and CA6: Structure formation and properties, *Letters on Materials*, 2026, vol. 16, issue 1, pp. 23-29. DOI: 10.48612/letters/2026-1-23-29.
11. Li S., Zhang J., Wang J. et al. Dense as diamond: Pn-C_{10}, a superhard sp^3 carbon allotrope, *Applied Physics Letters*, 2021, vol. 118, issue 1, art. no. 012107, 6 p. DOI: 10.1063/5.0032528.
12. Li Z., Hu M., Ma M. et al. Superhard superstrong carbon clathrate, *Carbon*, 2016, vol. 105, pp. 151-155. DOI: 10.1016/j.carbon.2016.04.038.
13. Liu H., Xing M., Fan Q. Four superhard tetragonal carbon allotropes: First-principles calculations, *Diamond and Related Materials*, 2023, vol. 135, art. no. 109854, 9 p. DOI: 10.1016/j.diamond.2023.109854.
14. Baimova J.A. An overview of mechanical properties of diamond-like phases under tension, *Nanomaterials*, 2024, vol. 14, issue 2, art. no. 129, 16 p. DOI: 10.3390/nano14020129.
15. Giannozzi P., Andreussi O., Brumme T. et al. Advanced capabilities for materials modelling with Quantum ESPRESSO, *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2017, vol. 29, no. 46, art. no. 465901, 31 p. DOI: 10.1088/1361-648X/aa8f79.
16. 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.

17. 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.
18. Greshnyakov V.A., Belenkov E.A. Formirovanie novogo almazopodobnogo bisloya na osnove grafena 5-7 [Formation of a novel diamond-like bilayer based on 5-7 graphene], *Fiziko-khimicheskie aspekty izucheniya klasterov, nanostruktur i nanomaterialov [Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials]*, 2021, issue 13, pp. 76-84. DOI: 10.26456/pcascnn/2021.13.076. (In Russian).
19. Umanskii Ya.S., Skakov Yu.A., Ivanov A.N., Rastorguev L.N. Kristallografiya, rentgenografiya i elektronnaya mikroskopiya. Moscow, Metallurgiya Publ., 1982, 632 p. (In Russian).
20. Greshnyakov V.A., Belenkov E.A. Technique for calculating the bulk modulus, *Russian Physics Journal*, 2014, vol. 57, issue 6, pp. 731-737. DOI: 10.1007/s11182-014-0297-4.
21. Gao F., He J., Wu E. et al. Hardness of covalent crystals, Phys. Rev. Lett., 2003, vol. 91, issue 1, art. no. 015502, 4 p. DOI: 10.1103/PhysRevLett.91.015502.
22. Stokes H.T., Hatch D.M. Program for identifying the space group symmetry of a crystal, *Journal of Applied Crystallography*, 2005, vol. 38, issue 1, pp. 237-238. DOI: 10.1107/s0021889804031528.
23. Greshnyakov V.A., Belenkov E.A. Calculation of the physicochemical characteristics of a new orthorhombic form of diamond, *Inorganic Materials*, 2018, vol. 54, issue 2, pp. 111-116. DOI: 10.1134/S0020168518020061.
24. Wang J.-T., Chen C., Wang D.-S. et al. Phase stability of carbon clathrates at high pressure, *Journal of Applied Physics*, 2010, vol. 107, issue 6, art. no. 063507, 4 p. DOI: 10.1063/1.3359682.
25. Vollondat R., Roques S., Chevalier C. et al. Synthesis and characterization of silicon clathrates of type I Na_8Si_{46} and type II Na_xSi_{136} by thermal decomposition, *Journal of Alloys and Compounds*, 2022, vol. 903, art. no. 163967, 7 p. DOI: 10.1016/j.jallcom.2022.163967.