

УДК 541.7/73

**СТРУКТУРА И НЕКОТОРЫЕ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА
УГЛЕРОДНОЙ И КРЕМНИЕВОЙ ФАЗ С АЛМАЗОПОДОБНОЙ РЕШЕТКОЙ LA3****Е.А. Беленков, В.А. Грешняков***Челябинский государственный университет, Россия*

E-mail: belenkov@csu.ru

Статья поступила 16 апреля 2015 г.

Расчеты структуры и свойств двух алмазоподобных фаз C-LA3 и Si-LA3 с кристаллографически эквивалентными позициями атомов выполнены методом теории функционала плотности с обменно-корреляционным потенциалом в обобщенном градиентном приближении (DFT-GGA). Для этих фаз определены структурные характеристики, энергии когезии, плотности электронных состояний (DOS), объемные модули и рассчитаны порошковые рентгенограммы. Установлено, что энергии когезии, ширина запрещенных зон и объемные модули фаз C-LA3 и Si-LA3 меньше соответствующих значений для кубического алмаза и кремния. Также в статье выполнен анализ возможных путей экспериментального получения алмазоподобных фаз C-LA3 и Si-LA3.

DOI: 10.15372/JSC20160506

Ключевые слова: моделирование, алмаз, кремний, алмазоподобные фазы, атомная структура, электронные свойства, фазовый переход.

ВВЕДЕНИЕ

Для технических приложений требуются материалы с различными электронными свойствами [1]. Свойства материалов можно варьировать не только за счет изменения химического состава, но и за счет изменения структуры при полиморфных превращениях [2, 3]. Диапазон варьирования свойств за счет изменения структуры определяется набором полиморфных модификаций, которые могут устойчиво существовать. Наибольшее разнообразие полиморфных разновидностей наблюдается для углеродных и кремниевых соединений с преимущественно ковалентным типом связей. В настоящее время проводятся интенсивные экспериментальные [4–6] и теоретические [7–16] исследования структуры, свойств и способов получения новых полиморфных разновидностей кубического алмаза и кремния. Теоретически установлена возможность устойчивого существования 35 углеродных и кремниевых алмазоподобных фаз (в число которых не входит кубический алмаз и кремний Si I) [2, 3, 9, 11, 15], состоящих из атомов, находящихся в кристаллографически эквивалентных позициях. Из таких фаз к настоящему времени получены только три углеродные [17–21] и две кремниевые фазы [22, 23].

Наиболее изученной из синтезированных углеродных алмазоподобных фаз является лонсдейлит (2H политип алмаза, пр. гр. $P6_3/mmc$) [17–19]. Лонсдейлит впервые был синтезирован из графита при давлении 13 ГПа и температуре, превышающей 1270 К [17]. Лонсдейлит также был обнаружен в остатках метеоритов [18] и межпланетной пыли [19]. Среди всех политипов алмаза только лонсдейлит (наряду с кубическим алмазом) содержит атомы, находящиеся в эквивалентных кристаллографических состояниях. Вторая из углеродных алмазоподобных фаз была впервые экспериментально получена из графита при $P > 15$ ГПа и низких

температурах ($T > 180$ К) [20]. В работе [24] была расшифрована структура этой фазы, характеризующаяся простой кубической решеткой ($Pm\bar{3}m$), образованной из кластеров в виде усеченных октаэдров. Углеродная фаза высокой плотности C_8 ($Ia\bar{3}$) — третья из углеродных алмазоподобных фаз с эквивалентными атомными позициями, синтезированная в результате осаждения углерода из плазмы в вакууме на поверхность монокристалла KCl [21].

Первая кремниевая фаза Si III (BC8) с алмазоподобной структурой получена экспериментально при декомпрессии (от 12 ГПа до комнатного давления) кремния с кристаллической решеткой типа β -Sn [22]. Si III имеет кубическую объемно-центрированную кристаллическую решетку ($Ia\bar{3}$) [22, 23]. При нагреве Si III выше 470 К происходит образование другой алмазоподобной фазы, Si IV, со структурой, подобной алмазному политипу 2H ($P6_3/mmc$) [22, 23].

Другие из 35 алмазоподобных фаз с эквивалентными позициями атомов пока экспериментально не получены, поэтому необходимы модельные расчеты их свойств и анализ того, как структура полиморфов влияет на их свойства. Среди теоретически предсказанных алмазоподобных фаз большой интерес представляет фаза LA3, имеющая тетрагональную объемно-центрированную кристаллическую решетку [2, 3]. Фазы такого типа должны быть наиболее устойчивыми по сравнению с другими алмазоподобными фазами, и, вероятно, именно они будут синтезированы в первую очередь в ближайшее время [2, 3]. Поэтому целью данной работы было детальное теоретическое исследование структуры и свойств углеродной и кремниевой алмазоподобных фаз C-LA3 и Si-LA3.

МЕТОДЫ РАСЧЕТА

Геометрическая оптимизация структур и расчет энергетических характеристик и электронных свойств углеродных и кремниевых алмазоподобных фаз были выполнены в результате первопринципных расчетов программным пакетом QuantumEspresso [25] методом DFT [26] в обобщенном градиентном приближении (GGA) [27]. Гибридный функционал обменно-корреляционной энергии B3LYP [28] был использован при расчетах. Влияние ионных остовов учитывали через сохраняющие норму псевдопотенциалы. Для вычисления полных энергий и плотностей электронных состояний использовали базисный набор плоских волн с энергией отсечки 60 Ридберг и сетки из k точек $12 \times 12 \times 12$ в зонах Бриллюэна. Ошибка расчетов при данных значениях параметров не превышала 0,001 эВ. Сходимость расчетов при геометрической оптимизации проверяли по относительной разнице полных энергий, приходящихся на элементарную ячейку. Критерием окончания расчетов было значение градиента энергии 0,005 эВ/Å.

Для оценки устойчивости и определения условий, при которых возможен синтез углеродной алмазоподобной фазы C-LA3, были выполнены модельные исследования фазового перехода графит—C-LA3. Для этих расчетов в кристаллических решетках структурной модификации графита $P6/mmm$ и алмазоподобной фазы C-LA3 были выбраны элементарные ячейки, содержащие одинаковое количество атомов ($Z = 8$) и относящиеся к орторомбической сингонии. Для элементарной ячейки графита изменяли параметр c , а для фазы C-LA3 — параметр a . Траектория структурного превращения при расчетах была выбрана в направлении, соответствующем ориентации наиболее напряженных связей L_3 или L_4 , деформировать которые можно при минимальных значениях напряжений. При заданных значениях параметров рассчитывались геометрически оптимизированные структуры ряда переходных элементарных ячеек и их полные энергии. За точку фазового превращения принимали точку пересечения графиков зависимостей полной энергии графита и фазы C-LA3 от параметров решетки c и a соответственно. Изменения параметров решетки интерпретировались как результат одноосного сжатия и/или растяжения. При сжатии выполнялись расчеты величины давления, которое должно вызвать соответствующее изменение параметров решеток, что позволило определить давление фазового перехода.

Объемные модули алмазоподобных фаз были найдены по методике, которая была предложена и описана в работе [29]. Абсолютные значения атомарных объемов и полных энергий, необходимые для определения объемных модулей, были рассчитаны методом B3LYP-GGA.

Для расчета порошковых рентгенограмм по стандартной методике [30] были использованы структурные параметры алмазоподобных фаз, найденные методом B3LYP-GGA.

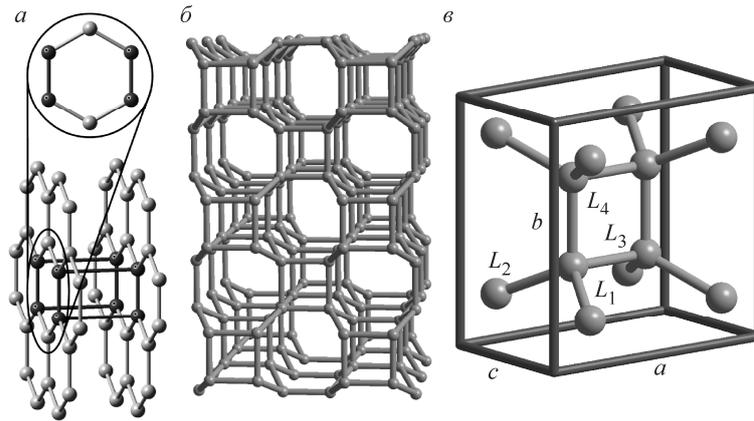


Рис. 1. Схема, иллюстрирующая модельный механизм сшивки графеновых слоев для получения структуры фазы C-LA3 (а), а также изображения фрагмента геометрически оптимизированной структуры фазы C-LA3 (б) и ее элементарной ячейки (в)

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Выполненные в данной работе модельные расчеты и теоретический анализ показали возможность существования двух алмазоподобных фаз со структурой LA3 из атомов углерода и кремния. Углеродная фаза C-LA3 получается в результате сшивки графеновых слоев L_6 (рис. 1, а) и геометрической оптимизации [31, 32]. Кристаллическая структура фазы C-LA3 приведена на рис. 1, б. Кремниевая фаза Si-LA3 получается из углеродной C-LA3 заменой атомов углерода на атомы кремния с последующей геометрической оптимизацией.

Измерения длин межатомных связей, выполненные для фаз C-LA3 и Si-LA3, показали, что четыре связи, образуемые каждым атомом, отличаются длинами: $L_1 = L_2$, $L_3 = L_4$ (табл. 1). Если в кубическом алмазе и кремнии все углы между ковалентными связями составляют $109,47^\circ$, то в фазах C-LA3 и Si-LA3 имеются три различных значения углов между связями: β_{12} , β_{34} и $\beta_{13} = \beta_{14} = \beta_{23} = \beta_{24}$, которые приведены в табл. 1. В результате фазы C-LA3 и Si-LA3 имеют три независимых структурных параметра: L_1 , L_3 и β_{12} . Остальные углы β_{ij} являются либо константами, либо определяются через независимые параметры:

$$\beta_{13} = \pi / 2 + \arcsin(\sqrt{2} \cos(\beta_{12} / 2) / 2),$$

$$\beta_{34} = \pi / 2.$$

Элементарные ячейки фаз C-LA3 и Si-LA3 принадлежат тетрагональной сингонии (табл. 2). Параметры элементарной ячейки выражаются через независимые структурные параметры и рассчитываются по следующим формулам:

$$a = \sqrt{2}L_1 \cos(\beta_{12} / 2) + 2L_3,$$

$$c = L_1 \sin(\beta_{12} / 2).$$

Т а б л и ц а 1

Длины связей (L_i , Å) и углы между связями (β_{ij} , град.) в структурах C-LA3 и Si-LA3 фаз

β_{12}	β_{13}	β_{14}	β_{23}	β_{24}	β_{34}	L_1	L_2	L_3	L_4
C-LA3									
111,03	113,60	113,60	113,60	113,60	90,00	1,5319	1,5319	1,5871	1,5871
Si-LA3									
109,88	113,97	113,97	113,97	113,97	90,00	2,4023	2,4023	2,4472	2,4472

Т а б л и ц а 2

Структурные характеристики C и Si алмазоподобных фаз (a и b , Å; Z , ат.; Def, град.; Str, Å)

Фаза	Пр. группа	Позиция Уайкова ($x/a, y/b, z/c$)	a	c	Z	Rng	Def	Str
C-LA1	$Fd\bar{3}m$	(0,0000, 0,0000, 0,0000)	3,597	3,597	8	6^6	0,00	0,000
Si-LA1		(0,0000, 0,0000, 0,0000)	5,583	5,583			0,00	0,000
C-LA3	$I4/mmm$	(0,1803, 0,1803, 0,0000)	4,401	2,525	8	4^16^5	37,55	0,110
Si-LA3		(0,1787, 0,1787, 0,0000)	6,840	3,934			37,86	0,090

Значения параметров элементарных ячеек новых фаз, рассчитанные при использовании метода B3LYP-GGA, приведены в табл. 2. Одновременно были вычислены параметры элементарных ячеек кубического алмаза (C-LA1) и кремния (Si-LA3), для которых наблюдается хорошее соответствие между расчетными и экспериментально определенными ($a_{\text{diam}} = 3,567 \text{ \AA}$ [33], $a_{\text{Si-I}} = 5,4306 \text{ \AA}$ [34]) параметрами ячеек. Поскольку все позиции атомов в структурах алмазоподобных фаз типа LA3 кристаллографически эквивалентные, они могут быть описаны одной позицией Уайкова $8h$ (см. табл. 2).

Для алмазоподобных фаз также были определены пространственные группы, кольцевые (Rng [2]) и деформационные параметры (Def [2] и Str [35]), значения которых приведены в табл. 2.

Плотности углеродных и кремниевых фаз рассчитаны и представлены в табл. 3. Значение плотности фазы C-LA3 на 4,8 % меньше соответствующего значения для кубического алмаза. Плотность фазы Si-LA3 на 5,5 % уступает плотности кремния с ГЦК решеткой алмазного типа.

В табл. 3 также приведены рассчитанные энергии когезии (E_{coh}) и разностные полные энергии (ΔE_{tot}) относительно кубического алмаза (C-LA1) и кубического кремния (Si-LA1). Значения полных энергий фаз C-LA3 и Si-LA3 превосходят E_{tot} C-LA1 и Si-LA1 на 0,21 и 0,13 эВ/атом соответственно. Расчетные энергии когезии кубического алмаза и Si-LA1 хорошо согласуются с экспериментально установленными энергиями (7,37 [33, 36] и 4,63 эВ/атом [37] соответственно), что указывает на корректность рассчитанных значений E_{coh} для новых фаз C-LA3 и Si-LA3.

Расчетные плотности электронных состояний в зонах Бриллюэна углеродных и кремниевых алмазоподобных фаз, а также кубического алмаза и кремния с ГЦК решеткой алмазного типа представлены на рис. 2. Значения ширины запрещенных зон (Δ) в C-LA1 и Si-LA1, рассчитанные методом DFT, составляют 5,44 и 1,45 эВ соответственно (см. табл. 3) и находятся в хорошем соответствии с экспериментальными значениями 5,48 [33] и 1,11 эВ [38]. Ширину запрещенных зон новых фаз также определяли из расчетных плотностей состояний (см. табл. 3). Установлено, что ширина запрещенной зоны для фазы C-LA3 меньше ширины запрещенной зоны в кубическом алмазе на 21 %, тогда как Δ для Si-LA3 на 35 % меньше соответствующего значения для Si-LA1. Достаточно большое значение ширины запрещенной зоны $\Delta = 4,3 \text{ эВ}$ для фазы C-LA3 указывает, что эта фаза должна проявлять диэлектрические свойства. Ширина запрещенной зоны для фазы Si-LA3 значительно меньше ($\Delta = 0,94 \text{ эВ}$), поэтому данная фаза должна быть полупроводником. Кроме интегральных плотностей состояний были рассчитаны парциальные DOS для s - и p -состояний (см. рис. 2). Установлено, что отличия графиков полных плотностей состояний обусловлены отличиями в парциальных плотностях p -состояний,

Т а б л и ц а 3

Рассчитанные свойства алмазоподобных фаз

Фаза	ρ	ΔE_{tot}	E_{coh}	Δ	B_0
C-LA1	3,428	0,00	7,86	5,44	445,1
C-LA3	3,262	0,21	7,64	4,30	439,9
Si-LA1	2,144	0,00	5,53	1,45	79,5
Si-LA3	2,027	0,13	5,40	0,94	73,1

Примечание. Плотность ρ , г/см³; разностная полная энергия ΔE_{tot} , эВ/атом; энергия когезии E_{coh} , эВ/атом; ширина запрещенной зоны Δ , эВ; объемный модуль B_0 , ГПа.

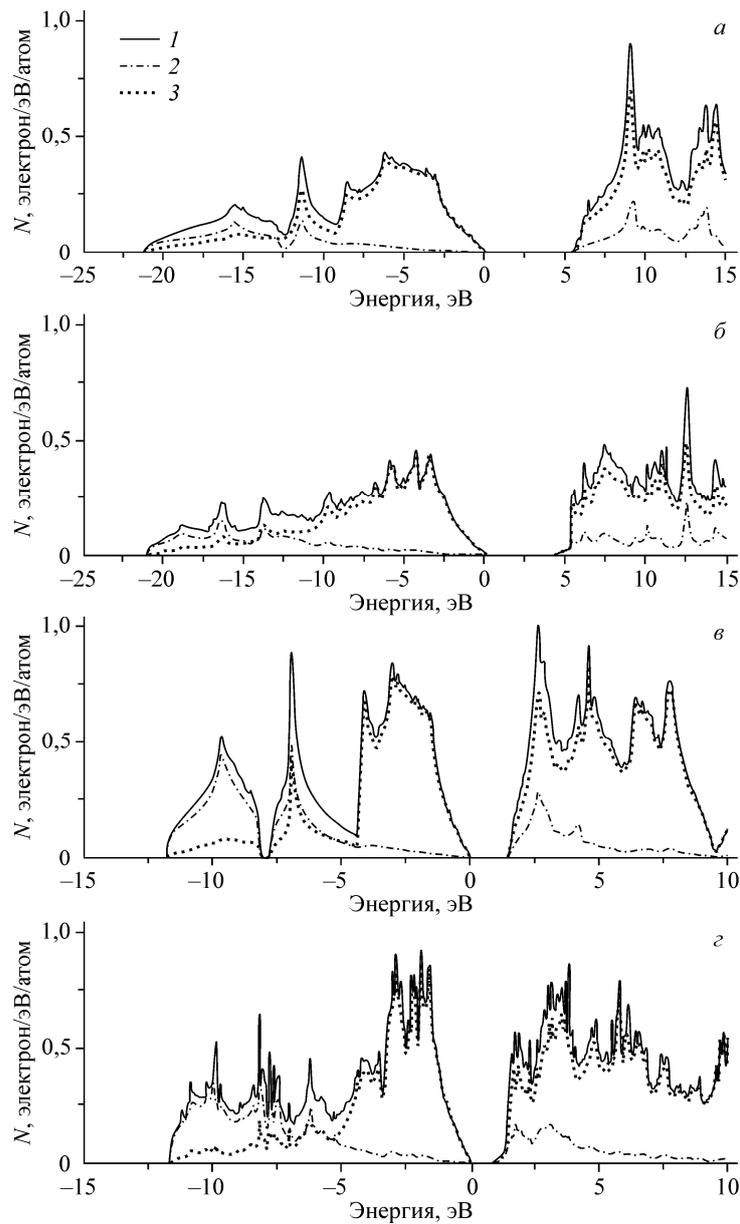


Рис. 2. Плотность электронных состояний углеродных и кремниевых алмазоподобных фаз (1 — полная плотность состояний; 2 и 3 — вклады s - и p -состояний соответственно): C-LA1 (а), C-LA3 (б), Si-LA1 (в), Si-LA3 (г)

тогда как электронные спектры s -состояний отличаются незначительно. Таким образом, при формировании структуры LA3 происходит существенное изменение плотности состояний p -электронов.

Результаты расчетов модулей объемной упругости при всесторонне равномерном сжатии для фаз C-LA1, Si-LA1, C-LA3 и Si-LA3 представлены в табл. 2 и 3. Вычисленные в данной работе объемные модули кубического алмаза ($B_0 = 445,1$ ГПа) и кубического кремния ($B_0 = 79,5$ ГПа) достаточно хорошо согласуются с экспериментально установленными величинами (446 [39] и 97,8 ГПа [40] соответственно). Значение B_0 для фазы C-LA3 уступает алмазному значению только 1,2%. В свою очередь, значение B_0 для фазы Si-LA3 меньше соответствующего значения для Si-LA1 на 8%. Объемные модули также были найдены в области высоких давлений и нелинейных упругих деформаций при равномерном всестороннем сжатии (табл. 4).

Т а б л и ц а 4

Объемные модули (B , ГПа) алмазоподобных фаз

V/V_0	C-LA1		C-LA3		Si-LA1		Si-LA3	
	P	B	P	B	P	B	P	B
1,000	0,00	445,1	0,00	439,9	0,00	79,5	0,00	73,1
0,988	2,57	451,0	2,69	445,0	0,45	80,7	0,43	74,1
0,976	7,89	456,6	8,14	449,9	1,41	81,8	1,34	75,0
0,964	13,56	461,9	13,60	454,4	2,46	82,8	2,26	75,9

Примечание. V/V_0 — относительное изменение объема;
 P — давление, ГПа.

На рис. 3 приведена зависимость полной энергии E_{tot} от параметра решетки для графита и алмазоподобной фазы C-LA3. По графикам на рис. 3 можно оценить высоту энергетического барьера, который необходимо преодолеть для структурного перехода графита в C-LA3. Его величина составляет 0,15 эВ/атом для DFT-GGA расчетов. Найденное значение высоты энергетического барьера является минимальным, так как траектория структурного превращения при расчетах была выбрана в направлении, соответствующем ориентации наиболее напряженных связей, деформировать которые можно при меньших значениях напряжений. Атомарный объем V_{at} графита в точке фазового преобразования составляет $6,52 \text{ \AA}^3/\text{атом}$ при $c = 4,861 \text{ \AA}$ (см. рис. 3). По этим значениям можно найти давление, при котором происходит фазовый переход. Давление было рассчитано по следующей формуле: $P = -\Delta E_{\text{tot}}/\Delta V_{\text{at}}$. Структурное преобразование графита в алмазоподобную фазу C-LA3 является фазовым переходом первого рода, при котором происходит скачкообразное увеличение плотности на 11,7 % при 76 ГПа.

По структурным параметрам, найденным в результате DFT расчетов, были рассчитаны теоретические порошковые рентгенограммы алмазоподобных фаз, изображения которых приведены на рис. 4. Угловое положение (2θ) 100 и 86 % пиков фазы C-LA3 отличается от положения главного дифракционного пика кубического алмаза (C-LA1) на $2,9$ и $2,7^\circ$ [41], положение третьего по максимальной интенсивности пика этой фазы практически совпадает ($\Delta 2\theta = 0,5^\circ$) с положением 35 % пика C-LA1 [41]. Для кремниевой фазы Si-LA3 позиция максимального дифракционного пика сильно отличается ($\Delta 2\theta > 10^\circ$) от позиций наиболее интенсивных пиков кремния с ГЦК решеткой алмазного типа (Si-LA1) [42], угловое положение 91 и 86 % макси-

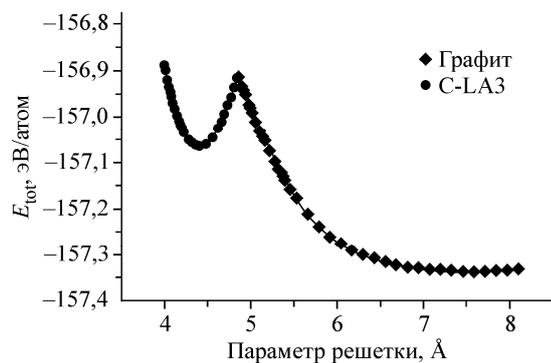


Рис. 3. График зависимости полной энергии E_{tot} от величины параметра кристаллической решетки c для графита $P6/mmm$ и a для алмазоподобной фазы C-LA3

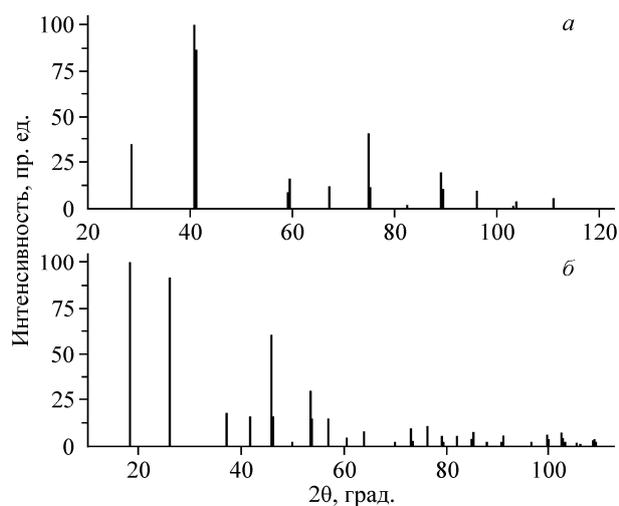


Рис. 4. Расчетные рентгенограммы алмазоподобных фаз C-LA3 (а) и Si-LA3 (б)

мумов достаточно близко ($\Delta 2\theta \approx 2,4^\circ$) к положению главного дифракционного максимума Si-LA1 [42].

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В результате выполненных исследований методом DFT-GGA найдены геометрически оптимизированные структуры кубического алмаза (C-LA1), кремния с ГЦК решеткой алмазного типа (Si-LA1) и двух алмазоподобных фаз C-LA3 и Si-LA3. Для всех фаз рассчитаны различные структурные характеристики, плотности, энергии когезии, объемные модули, плотности электронных состояний и порошковые рентгенограммы.

Теоретическое исследование фазового перехода графита в алмазоподобную фазу C-LA3 при сильном одноосном сжатии показало, что графит может быть преобразован в C-LA3 при давлении ~ 76 ГПа. Данный результат хорошо согласуется с экспериментальными данными получения алмаза и алмазоподобных фаз из графита [6, 43], а также с тем, что в области меньших давлений наблюдаются в основном промежуточные углеродные соединения с 3- и 4-координированными атомами [44–46]. Другой способ получения фазы C-LA3 может заключаться в полимеризации гипотетических графеновых слоев, состоящих только из 4- и 8-членных колец [47].

Наиболее вероятный путь синтеза кремниевой фазы Si-LA3 состоит в воздействии сдвиговыми напряжениями на кремний с ГЦК решеткой алмазного типа по направлениям в плоскости [111]. Другой возможный способ синтеза фазы Si-LA3 — полимеризация силицена, который был получен экспериментально [48].

Выполненные расчеты значений модулей объемной упругости алмазоподобных фаз показали, что фаза C-LA3 должна обладать высокими прочностными характеристиками, так как значение ее объемного модуля всего лишь на 1,2 % уступает значению модуля кубического алмаза. Значение ширины запрещенной зоны фазы C-LA3 достаточно большое (4,3 эВ), поэтому углеродный материал с такой структурой можно считать широкозонным полупроводником. Расчетная ширина запрещенной зоны фазы Si-LA3 (0,94 эВ) и, следовательно, материалы на основе этой фазы должны быть полупроводниками.

Рассчитанные в данной работе порошковые рентгенограммы можно использовать для идентификации фаз C-LA3 и Si-LA3 в синтезированных углеродных материалах. Теоретические рентгенограммы фаз C-LA3 и Si-LA3 достаточно сильно отличаются от рентгенограмм кубического алмаза и кремния с ГЦК решеткой алмазного типа, поэтому их идентификация не должна быть затруднительной.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Лебедев А.И. Физика полупроводниковых приборов. – М.: Физматлит, 2008.
2. Грешняков В.А., Беленков Е.А. // ЖЭТФ. – 2011. – **140**, № 1. – С. 99. [Greshnyakov V.A., Belenkov E.A. // J. Exp. Theor. Phys. – 2011. – **113**, N 1. – P. 86.]
3. Грешняков В.А., Беленков Е.А., Березин В.М. Кристаллическая структура и свойства углеродных алмазоподобных фаз. – Челябинск: ЮУрГУ, 2012.
4. Pimenov S.M., Khomich A.A., Vlasov I.I. et al. // Appl. Phys. A. – 2014. – **116**, N 2. – P. 545.
5. Wang Y., Panzik J.E., Kiefer B. et al. // Sci. Rep. – 2014. – **2**. – P. 520.
6. Wang Z., Zhao Y., Tait K. et al. // Proc. Natl. Acad. Sci. USA. – 2004. – **101**, N 38. – P. 13699.
7. Nguyen M.C., Zhao X., Wang C.-Z. et al. // Phys. Rev. B. – 2014. – **89**. – P. 184112.
8. Cheng C., Lv Z.-L., Chenga Y. et al. // Diam. Relat. Mater. – 2014. – **43**. – P. 49.
9. Беленков Е.А., Грешняков В.А. // Журн. структур. химии. – 2014. – **55**, № 3. – С. 439. [Belenkov E.A., Greshnyakov V.A. // J. Struct. Chem. – 2014. – **55**, N 3. – P. 409.]
10. Liu Y., Lu M., Zhang M. // Phys. Lett. A. – 2014. – **378**, N 45. – P. 3326.
11. Беленков Е.А., Грешняков В.А. // ЖЭТФ. – 2014. – **146**, № 1. – С. 116. [Belenkov E.A., Greshnyakov V.A. // J. Exp. Theor. Phys. – 2014. – **119**, N 1. – P. 101.]
12. Bai Y., Zhao X., Li T. et al. // Carbon. – 2014. – **78**. – P. 70.
13. Connetable D. // Phys. Rev. B. – 2011. – **83**. – P. 035206.
14. Zhao Z., Tian F., Dong X. et al. // J. Am. Chem. Soc. – 2012. – **134**. – P. 12362.

15. Грешняков В.А., Беленков Е.А. // Вестник ЧелГУ. Физика. – 2012. – **14**, № 30. – С. 5.
16. Zhai J., Yu D., Luo K. et al. // J. Phys.: Condens. Matter. – 2012. – **24**. – P. 405803.
17. Bundy F.P., Kasper J.S. // J. Chem. Phys. – 1967. – **46**, N 9. – P. 3437.
18. Hanneman R.E., Strong H.M., Bundy F.P. // Science. – 1967. – **155**, N 3765. – P. 995.
19. Rietmeijer F.J.M., Mackinnon I.D.R. // Nature. – 1987. – **326**, N 6109. – P. 162.
20. Aust R.B., Drickamer H.G. // Science. – 1963. – **140**, N 3568. – P. 817.
21. Матюшенко Н.Н., Стрельницкий В.Е., Гусев В.А. // Письма в ЖЭТФ. – 1979. – **30**, № 4. – С. 218. [Matyushenko N.N., Strel'nitskii V.E., Gusev V.A. // JETP Lett. – 1979. – **30**, N 4. – P. 199.]
22. Wentorf R.H., Kasper J.S. // Science. – 1963. – **139**. – P. 338.
23. Besson J.M., Mokhtari E.H., Gonzalez J. et al. // Phys. Rev. Lett. – 1987. – **59**. – P. 473.
24. Покропивный В.В., Покропивный А.В. // Физика твердого тела. – 2004. – **46**, № 2. – С. 380. [Pokropivny V.V., Pokropivny A.V. // Phys. Solid State. – 2004. – **46**, N 2. – P. 392.]
25. Giannozzi P., Baroni S., Bonini N. et al. // J. Phys.: Condens. Matter. – 2009. – **21**, N 39. – P. 395502.
26. Hohenberg P., Kohn W. // Phys. Rev. – 1964. – **136**, N 3B. – P. 864.
27. Perdew J.P., Wang Y. // Phys. Rev. B. – 1992. – **45**, N 23. – P. 13244.
28. Арбузников А.В. // Журн. структур. химии. – 2007. – **48**. – S5. [Arbuznikov A.V. // J. Struct. Chem. – 2007. – **48**. – S1.]
29. Грешняков В.А., Беленков Е.А. // Изв. вузов. Физика. – 2014. – **57**, № 6. – С. 24. [Greshnyakov V.A., Belenkov E.A. // Russ. Phys. J. – 2014. – **57**, N 6. – P. 731.]
30. Уманский Я.С., Скаков Ю.А., Иванов А.Н., Расторгуев Л.Н. Кристаллография, рентгенография и электронная микроскопия. – М.: Металлургия, 1982.
31. Беленков Е.А., Грешняков В.А. // Физика твердого тела. – 2013. – **55**, № 8. – С. 1640. [Belenkov E.A., Greshnyakov V.A. // Phys. Solid State. – 2013. – **55**, N 8. – P. 1754.]
32. Belenkov E.A., Greshnyakov V.A. // New Carbon Mater. – 2013. – **28**, N 4. – P. 273.
33. Pierson H.O. Handbook of carbon, graphite, diamond, and fullerenes: properties, processing and applications. – Park Ridge: Noyes, 1993.
34. Godwod F., Kowalczyk R., Szmíd Z. // Phys. Status Solidi A. – 1974. – **21**, N 1. – P. 227.
35. Беленков Е.А., Грешняков В.А. // Физика твердого тела. – 2015. – **57**, № 6. – С. 1229. [Belenkov E.A., Greshnyakov V.A. // Phys. Solid State. – 2015. – **57**, N 6. – P. 1257.]
36. Fahy S., Louie S.G. // Phys. Rev. B. – 1987. – **36**, N 6. – P. 3373.
37. Yin M.T., Cohen M.L. // Phys. Rev. B. – 1982. – **26**, N 10. – P. 5668.
38. Физические величины: Справочник / Ред. И.С. Григорьева, Е.З. Мейлихова. – М.: Энергоатомиздат, 1991.
39. Ocellli F., Loubeyre P., Letoullec R. // Nat. Mater. – 2003. – **2**, N 3. – P. 151.
40. McSkimin H.J. // J. Appl. Phys. – 1953. – **24**, N 8. – P. 988.
41. Swanson H.E., Fuyat R.K. // Natl. Bur. Stand. (Washington, D.C.: National Bureau of Standards). – 1953. – Circ. 539, V. II. – P. 5.
42. Morris M.C., McMurdie H.F., Evans E.H. et al. // National Bureau of Standards Monograph 25 (Washington, D.C.: National Bureau of Standards). – 1976. – Sec. **13**. – P. 35.
43. Bundy F.P., Bassett W.A., Weathers M.S. et al. // Carbon. – 1996. – **34**. – P. 141.
44. Yamada K. // Carbon. – 2003. – **41**. – P. 1309.
45. Takano K.J., Harashima H., Wakatsuki M. // Jpn. J. Appl. Phys. – 1991. – **30**, N 5A. – P. L860.
46. Гончаров А.Ф., Макаренко И.Н., Стушов С.М. // ЖЭТФ. – 1989. – **96**. – С. 670. [Goncharov A.F., Makarenko I.N., Stishov S.M. // Sov. Phys. JETP. – 1989. – **69**, N 2. – P. 380.]
47. Enyashin A.N., Ivanovskii A.L. // Phys. Status Solidi B. – 2011. – **248**, N 8. – P. 1879.
48. De Padova P., Quaresima C., Olivieri B. et al. // Appl. Phys. Lett. – 2011. – **98**. – P. 081909.