

**ИССЛЕДОВАНИЕ АНИЗОТРОПИИ ДЕФОРМАЦИИ И ЖЕСТКОСТИ СВЯЗЕЙ
ВЫСОКОПЛОТНЫХ УГЛЕРОДНЫХ МАТЕРИАЛОВ: АЛМАЗА И Pn-C₁₀****В.В. Жуков, П.Б. Сорокин**

Владлен Вадимович Жуков (ORCID 0000-0002-4406-2903)*, Павел Борисович Сорокин (ORCID 0000-0001-5248-1799)

Технологический институт сверхтвердых и новых углеродных материалов, ул. Центральная, 7А, Троицк, Москва, Российская Федерация, 108840

Московский физико-технический институт, Институтский пер., 9, Долгопрудный, Московская область, Российская Федерация, 141701

E-mail: zhukov.vv@phystech.edu *, pbsorokin@tisnum.ru

Экспериментальные данные свидетельствуют о возможности получения материалов, превосходящих алмаз по твердости, таких как ультратвердые фуллериты и нанодиамамы. Однако эти данные расходятся с теоретическими предсказаниями. Тщательные расчеты не смогли обнаружить структур, демонстрирующих механические свойства, сопоставимые с экспериментально полученными. Возможно, причиной является локальная природа сверхтвердости углерода, связанная с образованием областей с химическими связями повышенной жесткости. Такие области, как ожидается, будут характеризоваться большей плотностью материала. Действительно, существуют экспериментальные данные о получении углеродных фаз с плотностью, превышающей плотность алмаза. Теоретические расчеты подтверждают, что возможно существование более плотных фаз, чем алмаз. Однако их модули упругости не превосходят соответствующие значения для алмаза. При этом модуль упругости не является идеальной характеристикой для материалов с неоднородной жесткостью. Более подходящей характеристикой в таких случаях выступает средняя жесткость связи. В данной работе была исследована связь между объемным модулем упругости и средней жесткостью связи для двух углеродных кристаллов высокой плотности: алмаза и Pn-C₁₀. Нас интересовала причина того, почему Pn-C₁₀, несмотря на большую плотность, демонстрирует более низкие значения модуля упругости. Такая анизотропная деформация Pn-C₁₀ при изотропном сжатии, в отличие от алмаза, проявляется из-за наличия в кристаллической структуре двух различных связей по 1,51 Å (короткие и более “жесткие”) и 1,65 Å (длинные и более “мягкие”). Значительно большей деформации подвергаются более длинные связи, что в конечном итоге ведет к более высокой анизотропии. И, следовательно, более низкому модулю объемной упругости для Pn-C₁₀.

Ключевые слова: углерод, алмаз, средняя жесткость связи, объемный модуль упругости, DFT

**STUDY OF THE STRAIN ANISOTROPY AND BOND STIFFNESS
OF HIGH-DENSITY CARBON MATERIALS: DIAMOND AND Pn-C₁₀****V.V. Zhukov, P.B. Sorokin**

Vladlen V. Zhukov (ORCID 0000-0002-4406-2903)*, Pavel B. Sorokin (ORCID 0000-0001-5248-1799)

Technological Institute for Superhard and New Carbon Materials, Tsentrlnaya st., 7A, Troitsk, Moscow, 108840, Russia

Moscow Institute of Physics and Technology, Institutskiy per., 9, Dolgoprudny, Moscow Reg., 141701, Russia

E-mail: zhukov.vv@phystech.edu *, pbsorokin@tisnum.ru

Experimental data indicate that it is possible to obtain materials superior to diamond in hardness, such as ultra-hard fullerites and nanodiamonds. However, these data are at odds with theoretical predictions. Careful calculations have failed to find structures exhibiting mechanical

properties comparable to those experimentally obtained. A possible reason is the local nature of carbon ultrahigh hardness associated with the formation of regions with chemical bonds of increased rigidity. Such regions are expected to be characterized by a higher density of the material, consistent with the data on obtaining superhard carbon phases with a density exceeding that of diamond. Theoretical calculations confirm the possibility of existence of denser phases than diamond. However, their elastic moduli do not exceed the corresponding values for diamond. The modulus of elasticity is not an ideal characteristic for materials with inhomogeneous stiffness. A more appropriate characteristic in such cases is the average bond stiffness. In this work, the relationship between bulk modulus of elasticity and average bond stiffness was investigated for two high-density carbon crystals: diamond and Pn-C₁₀. We were interested in the reason why Pn-C₁₀ shows lower values of bulk modulus despite its higher density. Such anisotropic deformation of Pn-C₁₀ under isotropic compression, unlike diamond, is manifested due to the presence in the crystal structure of two different bonds of 1.51 Å (short and more “rigid”) and 1.65 Å (long and more “soft”). Longer bonds are subject to significantly greater deformation, which ultimately leads to higher anisotropy and, consequently, to a lower bulk modulus of elasticity for Pn-C₁₀.

Key words: carbon, diamond, average bond stiffness, bulk modulus, DFT

Для цитирования:

Жуков В.В., Сорокин П.Б. Исследование анизотропии деформации и жесткости связей высокоплотных углеродных материалов: алмаза и Pn-C₁₀. *Изв. вузов. Химия и хим. технология*. 2024. Т. 67. Вып. 10. С. 16–21. DOI: 10.6060/ivkkt.20246710.9y.

For citation:

Zhukov V.V., Sorokin P.B. Study of the strain anisotropy and bond stiffness of high-density carbon materials: diamond and Pn-C₁₀. *ChemChemTech [Izv. Vyssh. Uchebn. Zaved. Khim. Khim. Tekhnol.]*. 2024. V. 67. N 10. P. 16–21. DOI: 10.6060/ivkkt.20246710.9y.

ВВЕДЕНИЕ

Кристалл алмаза известен благодаря ряду его привлекательных свойств. В частности, у алмаза один из самых высоких объемных модулей упругости, его твердость наибольшая среди всех кристаллов [1]. Интересным вопросом является поиск материалов, превосходящих алмаз по жесткости. Действительно, углерод, благодаря гибкости образования связей с различной гибридизацией, способен образовывать различные стабильные структуры [2-6]. При этом имеется ряд экспериментальных данных о получении ультратвердого фуллерита [7-10] и наноалмазов [11-14], чьи механические характеристики превосходят алмаз.

Эти экспериментальные данные противоречат теории, поскольку подробные *ab initio* расчеты с использованием продвинутых алгоритмов поиска глобального минимума энергии не смогли найти структуры, демонстрирующие сопоставимые механические свойства [15]. Возможно, причиной этого является локальная природа ультратвердого углерода, а именно формирование областей с химическими связями, имеющими повышенную жесткость [16, 17]. Можно предположить, что в этих областях углеродный материал с такими связями будет иметь большую плотность. При этом

существуют экспериментальные данные об образовании углеродных фаз с большей плотностью, чем у алмаза. Так, в этом диапазоне давлений 55-115 ГПа при ударном сжатии монокристаллического графита [18] наблюдалась фаза с плотностью большей на 2%, чем у алмаза. В работе [19] предполагалось, что такая структура может состоять из онионов со слоями, соединенными sp³-гибридизованными связями, которые и могут являться элементами ультратвердого фуллерита.

Возможность существования фаз с большей плотностью, чем у алмаза, подтверждается теорией [20, 21], однако модули упругости предложенных структур не превосходят соответствующие значения для алмаза. Стоит отметить, что модуль упругости является неудобной мерой в случае, если жесткость материала меняется в объеме (как предполагается в ультратвердом фуллерите [16, 17]). Более подходящей характеристикой для таких случаев является средняя жесткость связи.

Данная величина является удобной для описания материалов, свойства которых сильно меняются в объеме. Например, модули упругости наноматериалов являются фактически неопределенными величинами из-за отсутствия однозначного определения объема наноструктуры. Так, эта проблема широко обсуждалась для углеродных

нанотрубок (УНТ) и фуллеренов, и было предложено множество различных способов определения их объема. Чаще всего УНТ описывались как полые структуры с определенной толщиной оболочки. Ее значения принято выбирать как расстояние между слоями в графите (3,4 Å) [22, 23]. Однако существует альтернативный подход, предложенный Якобсоном [24], основанный на теории упругости оболочек, который дает значение 0,66 Å. В дальнейшем было рассмотрено множество других подходов к определению толщины оболочки [22, 23, 25].

В работе [26] мы предложили среднюю жесткость связи k_0 в качестве первичной механической характеристики изотропного сжатия на наномасштабе. Константы жесткости связи и раньше часто использовались в исследованиях механических свойств наноструктур, в основном для пересчета их в модули упругости [27] с различными предположениями об объеме, как упоминалось выше, однако наш метод позволил однозначно определить механическую жесткость углеродного материала, без использования неопределенной величины объема.

В данной статье мы изучили связь между объемным модулем упругости и средней жесткостью связи для двух углеродных кристаллов высокой плотности: алмаза и $Pn-C_{10}$, после чего выяснили почему $Pn-C_{10}$, имеющий более высокую плотность, чем алмаз, тем не менее имеет меньшее значение объемного модуля упругости.

МЕТОДЫ ИССЛЕДОВАНИЯ

Расчет атомной структуры свойств углеродных структур проводился с помощью метода теории функционала электронной плотности (DFT) [28, 29] в рамках метода присоединенных плоских волн [30, 31] с применением периодических граничных условий и функционала метода обобщенного градиента (GGA-PBE) в параметризации Пердью, Бурке и Эрнзерхофа [32], реализованного в программном пакете VASP [33-35]. Энергия обрезания плоских волн была выбрана равной 520 эВ. Для обеспечения достаточной точности при оптимизации был выбран набор k -точек $14 \times 10 \times 6$ в первой зоне Бриллюэна. Критерий сходимости для полной энергии был выбран равным 10^{-3} эВ.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Средняя жесткость связи определяется следующим образом:

$$k = \frac{1}{N_b} \left(\frac{\partial^2 E}{\partial l^2} \right),$$

где E – полная энергия, N_b и l – число химических связей в структуре и их средняя длина соответственно.

Средняя жесткость связи k и объемный модуль упругости B связаны следующим соотношением [26]:

$$k = \frac{V_0}{N_b l^2} \left[\frac{B}{1 + \delta} \left(\frac{\partial \delta}{\partial \epsilon} \right)^2 - P \left(\frac{\partial^2 \delta}{\partial \epsilon^2} \right) \right],$$

где $\epsilon = \frac{l-l_0}{l_0}$ и $\delta = \frac{V-V_0}{V_0}$ – это линейная и объемная деформация, соответственно. При $P = 0$ это уравнение может быть записано следующим образом:

$$B_0^{est} = k_0 \frac{N_b l_0^2}{V_0 \left(\frac{\partial \delta}{\partial \epsilon} \right)_{\epsilon=0}^2} \quad (1)$$

Мы оценили механическую жесткость двух материалов. Первый из них – это недавно предложенная [20] углеродная структура $Pn-C_{10}$ (пространственная группа симметрии $Pnnn$) (рисунок). Особенность данной структуры состоит в том, что ее плотность больше, чем у кристалла алмаза. Мы успешно подтвердили результаты работы [20], получив меньшее значение объема, приходящегося на один атом (5,62 Å³/атом), чем у алмаза (5,70 Å³/атом). Сама структура представляет собой соединение атомов углерода, имеющих sp^3 -гибридизацию, при этом сама алмазоподобная решетка является сильно искаженной, что видно из существенного отклонения средней величины тетраэдрического угла на 10,2° от значения 109,47°, характерного для идеальной sp^3 -гибридизованной структуры алмаза.

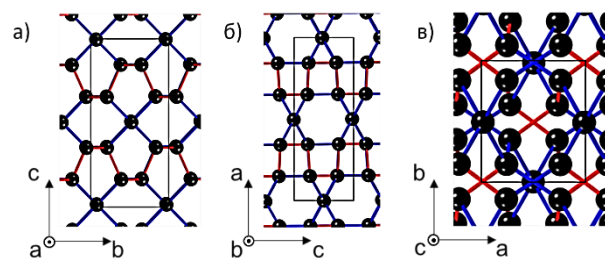


Рис. 1. Структура $Pn-C_{10}$. Связи длиной 1,51 Å и 1,65 Å выделены красным и синим цветом, соответственно. На рис. а, б, в $Pn-C_{10}$ представлена в различных ориентациях

Fig. 1. Structure of $Pn-C_{10}$. Bonds of lengths 1.51 Å and 1.65 Å are highlighted in red and blue, respectively. In fig. a, b, c $Pn-C_{10}$ is shown in different orientations

Для кристалла был рассчитан объемный упругий модуль и средняя жесткость связи. Они имеют значения 398,6 ГПа и 434,2 Н/м, соответственно. Эти значения ниже, чем у кристалла алмаза (440,0 ГПа и 472,0 Н/м, соответственно). При этом возникает вопрос, почему такая структура демонстрирует худшие механические характеристики, чем у алмаза, несмотря на большую плот-

ность. Для этой цели мы изучили поведение структуры под воздействием изотропной деформации. В частности, известно, что анизотропия поведения отдельных компонент структуры при изотропном воздействии может приводить к большему значению объемного модуля упругости, как, например, было получено для случая нанополикристаллов алмаза [36]. Мерой, отражающей такую анизотропию, является производная $\left(\frac{\partial\delta}{\partial\epsilon}\right)^2$ (в дальнейшем она будет называться анизотропией деформации). Эта величина входит в уравнение (1), связывающее объемный модуль упругости и среднюю жесткость связи. Полученное значение $\left(\frac{\partial\delta}{\partial\epsilon}\right)^2 = 9,8$ свидетельствует о существенно анизотропном поведении структуры при изотропной деформации, у алмаза $\left(\frac{\partial\delta}{\partial\epsilon}\right)^2 = 9$. При этом средняя длина связи структуры больше, чем у алмаза, и составляет 1,59 Å. Объяснение этого противоречия кроется в анализе распределения связей структуры, имеющих существенно разные значения (рисунок). Так, чуть меньше половины связей имеют длину 1,51 Å (меньше, чем у алмаза), однако большая часть связей имеют длину 1,65 Å, существенно больше алмазной (1,55 Å), что и приводит к большему среднему значению при итоговой большей плотности, чем у алмаза. Таким образом, при изотропной деформации структуры более длинные и более мягкие связи деформируются в большей степени, в то время как более жесткие связи мало меняют свое значение. Так, при деформации на 1%, длинные связи (1,65 Å) уменьшаются на 0,02 Å, а короткие связи только на 0,01 Å. Это приводит к большему значению анизотропии деформации с меньшим итоговым объемным модулем упругости.

Свойства углеродной структуры Pn-C₁₀ и алмаза можно сравнить в следующей таблице.

Таблица
Свойства углеродной структуры Pn-C₁₀ в сравнении с алмазом

Table. Properties of the Pn-C₁₀ carbon structure in comparison with diamond

Средняя длина связей	Алмаз	Pn-C ₁₀
	1,55 Å	1,59 Å
Объем, приходящийся на один атом	5,70 Å ³ /атом	5,62 Å ³ /атом
Объемный упругий модуль	440,0 ГПа	398,6 ГПа
Жесткость связей	472,0 Н/м	434,2 Н/м
Отклонения средней величины тетраэдрического угла	0°	10,2°
Анизотропия деформации	9	9,8

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе мы изучили механические свойства двух углеродных кристаллов, имеющих высокую плотность: алмаз и Pn-C₁₀. Хотя Pn-C₁₀ имеет более высокую плотность, чем алмаз, его модуль объемной упругости имеет меньшее значение. Далее мы проанализировали основные причины этого расхождения. Наши расчеты показывают, что средняя жесткость связи Pn-C₁₀ также ниже по сравнению с алмазом.

Более детальный анализ выявил причину такого поведения: анизотропная деформация Pn-C₁₀ при изотропном сжатии. В отличие от равномерной деформации алмаза, Pn-C₁₀ демонстрирует более сложное поведение. Кристаллическая структура Pn-C₁₀ содержит два различных типа углерод-углеродных связей – короткие «жесткие» связи (1,51 Å) и длинные «мягкие» связи (1,65 Å). При изотропном сжатии длинные связи испытывают в разы большую деформацию по сравнению с короткими. Эта преимущественная деформация длинных связей приводит к более высокой анизотропии и, следовательно, к более низкому модулю объемной упругости для Pn-C₁₀.

БЛАГОДАРНОСТИ

Исследования выполнены с использованием оборудования ЦКП «Исследования наноструктурных, углеродных и сверхтвердых материалов» (ЦКП ФГБНУ ТИСНУМ). Авторы благодарят межведомственный суперкомпьютерный центр РАН и сотрудников отдела информационных технологий Московского физико-технического института и выражают признательность группе центра обработки данных за помощь в проведении квантово-химических расчетов. Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФ в рамках научного проекта № 20-12-00097.

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов, требующего раскрытия в данной статье.

The studies were carried out using the equipment of the Center for Collective Use "Research of nanostructured, carbon and superhard materials" (Center for Collective Use FGBNU TISNUM). The authors are grateful to the Interdepartmental Supercomputer Center of the Russian Academy of Sciences and the staff of the Information Technology Department of the Moscow Institute of Physics and Technology, and are grateful to the data center group for their help in carrying out quantum chemical calculations. The research was carried out with the financial support of the

Russian Science Foundation within the framework of the scientific project No. 20-12-00097.

The authors declare the absence a conflict of interest warranting disclosure in this article.

ЛИТЕРАТУРА
REFERENCES

1. **Gilman J.J.** Why Diamond Is Very Hard. *Philos. Mag. A*. 2002. 82. P. 1811–1820. DOI: 10.1080/01418610208235692.
2. **Жуков В.В., Сорокин П.Б., Бланк В.Д.** Модель промежуточной углеродной фазы на основе дефектов внедрения в графите. *Изв. вузов. Химия и хим. технология*. 2021. Т. 64. Вып. 12. С. 24–27.
Zhukov V.V., Sorokin P.B., Blank V.D. Model of the Intermediate Carbon Phase Based on Interstitial Defects in Graphite. *ChemChemTech [Izv. Vyssh. Uchebn. Zaved. Khim. Khim. Tekhnol.]*. 2021. V. 64. N 12. P. 24–27. DOI: 10.6060/ivkkt.20216412.7y.
3. **Буга С.Г., Галкин А.С., Кузнецов М.С., Корнилов Н.В., Лупарев Н.В., Приходько Д.Д., Тарелкин С.А., Бланк В.Д.** Двуслойные пластины из синтетических монокристаллов алмаза, легированных азотом, для высокотемпературных диодов шоттки п-типа. *Изв. вузов. Химия и хим. технология*. 2022. Т. 65. Вып. 11. С. 27–33.
Buga S.G., Galkin A.S., Kuznetsov M.S., Kornilov N.V., Luparev N.V., Prikhodko D.D., Tarelkin S.A., Blank V.D. Double-layer plates from synthetic diamond single-crystals doped with nitrogen for high-temperature n-type schottky diodes. *ChemChemTech [Izv. Vyssh. Uchebn. Zaved. Khim. Khim. Tekhnol.]*. 2022. V. 65. N 11. P. 27–33. DOI: 10.6060/ivkkt.20226511.7y.
4. **Хан Ю.А., Дьячкова Т.П., Буракова Е.А., Сухинин А.А., Титов Г.А., Дегтярев А.А.** Формирование гибридных частиц при взаимодействии углеродных наноструктур различной морфологии. *Изв. вузов. Химия и хим. технология*. 2023. Т. 66. Вып. 10. С. 59–65.
Khan Yu.A., Dyachkova T.P., Burakova E.A., Sukhinin A.A., Titov G.A., Degtyarev A.A. Formation of hybrid particles in the interaction of different carbon nanostructures. *ChemChemTech [Izv. Vyssh. Uchebn. Zaved. Khim. Khim. Tekhnol.]*. 2023. V. 66. N 10. P. 59–65. DOI: 10.6060/ivkkt.20236610.6907.
5. **Спиридонова Е.А., Морозова В.Ю., Подвизников М.Л., Самонин В.В.** Влияние диспергирования фуллерена на сорбционные свойства модифицированных фуллеренами активных углей. *Изв. вузов. Химия и хим. технология*. 2021. Т. 64. Вып. 10. С. 125–131.
Spiridonova E.A., Morozova V.Yu., Podvyaznikov M.L., Samonin V.V. Effect of fullerene dispersion on the sorption properties of activated carbons modified with fullerenes. *ChemChemTech [Izv. Vyssh. Uchebn. Zaved. Khim. Khim. Tekhnol.]*. 2021. V. 64. N 10. P. 125–131. DOI: 10.6060/ivkkt.20216410.6351.
6. **Братков И.В., Иванов А.Д., Колчин А.Д., Савицкий И.А., Смирнов Н.Н.** Исследование влияния механохимической активации в ударно-отражательной мельнице на кристаллическую структуру природного графита. *Изв. вузов. Химия и хим. технология*. 2023. Т. 66. Вып. 4. С. 68–74.
Bratkov I.V., Ivanov A.D., Kolchin A.D., Savitsky I.A., Smirnov N.N. Investigation of the effect of mechanochemical activation in a shock-reflective mill on the crystal structure of natural graphite. *ChemChemTech [Izv. Vyssh. Uchebn. Zaved. Khim. Khim. Tekhnol.]*. 2023. V. 66. N 4. P. 68–74. DOI: 10.6060/ivkkt.20236604.6795.
7. **Popov M., Mordkovich V., Perfilov S., Kirichenko A., Kulnitskiy B., Perezhagin I., Blank V.** Synthesis of Ultrahard Fullerite with a Catalytic 3D Polymerization Reaction of C₆₀. *Carbon*. 2014. 76. P. 250–256. DOI: 10.1016/j.carbon.2014.04.075.
8. **Blank V., Buga S., Dubitsky G., Serebryanaya N., Popov M., Prokhorov V.** Properties and Applications of Superhard and Ultrahard Fullerenes. Perspectives of Fullerene Nanotechnology. 2002. P. 223–233. In: Osawa, E. (eds) Perspectives of Fullerene Nanotechnology. Springer, Dordrecht. https://doi.org/10.1007/978-94-010-9598-3_19
9. **Wang L., Liu B., Li H., Yang W., Ding Y., Sinogeikin S.V., Meng Y., Liu Z., Zeng X.C., Mao W.L.** Long-Range Ordered Carbon Clusters: A Crystalline Material with Amorphous Building Blocks. *Science*. 2012. 337. P. 825–828. DOI: 10.1126/science.1220522.
10. **Shang Y., Yao M., Liu Z., Fu R., Yan L., Yang L., Zhang Z., Dong J., Zhai C., Hou X.** Enhancement of Short/Medium-Range Order and Thermal Conductivity in Ultrahard sp³ Amorphous Carbon by C₇₀ Precursor. *Nat. Commun.* 2023. 14. P. 7860. DOI: 10.1038/s41467-023-42195-5.
11. **Dubrovinskaia N., Dubrovinsky L., Crichton W., Langenhorst F., Richter A.** Aggregated Diamond Nanorods, the Densest and Least Compressible Form of Carbon. *Appl. Phys. Lett.* 2005. 87. P. 083106. DOI: 10.1063/1.2034101.
12. **Irifune T., Kurio A., Sakamoto S., Inoue T., Sumiya H.** Ultrahard Polycrystalline Diamond from Graphite. *Nat. Commun.* 2003. 421, P. 599–600. DOI: 10.1038/421599b.
13. **Tanigaki K., Ogi H., Sumiya H., Kusakabe K., Nakamura N., Hirao M., Ledbetter H.** Observation of Higher Stiffness in Nanopolycrystal Diamond than Monocrystal Diamond. *Nat. Commun.* 2013. 4. P. 2343. DOI: 10.1038/ncomms3343.
14. **Huang Q., Yu D., Xu B., Hu W., Ma Y., Wang Y., Zhao Z., Wen B., He J., Liu Z.** Nanotwinned Diamond with Unprecedented Hardness and Stability. *Nat. Commun.* 2014. 510. P. 250–253. DOI: 10.1038/nature13381.
15. **Blatov V.A., Yang C., Tang D., Zeng Q., Golov A.A., Kabanov A.A.** High-Throughput Systematic Topological Generation of Low-Energy Carbon Allotropes. *Npj. Comput. Mater.* 2021. 7. P. 1–7. DOI: 10.1038/s41524-021-00491-y.
16. **Kvashnina Yu.A., Kvashnin A.G., Popov M.Yu., Kulnitskiy B.A., Perezhagin I.A., Tyukalova E.V., Chernozatonskii L.A., Sorokin P.B., Blank V.D.** Toward the Ultra-Incompressible Carbon Materials. Computational Simulation and Experimental Observation. *J. Phys. Chem. Lett.* 2015. 6. P. 2147–2152. DOI: 10.1021/acs.jpcclett.5b00748.
17. **Kvashnina Y.A., Kvashnin A.G., Chernozatonskii L.A., Sorokin P.B.** Fullerite-Based Nanocomposites with Ultrahigh Stiffness. Theoretical Investigation. *Carbon*. 2017. 115. P. 546–549. DOI: 10.1016/j.carbon.2017.01.028.
18. **Gust W.H.** Phase Transition and Shock-Compression Parameters to 120 GPa for Three Types of Graphite and for Amorphous Carbon. *Phys. Rev. B*. 1980. 22. P. 4744–4756. DOI: 10.1103/PhysRevB.22.4744.
19. **Blank V.D., Churkin V.D., Kulnitskiy B.A., Perezhagin I.A., Kirichenko A.N., Erohin S.V., Sorokin P.B., Popov M.Y.** Pressure-Induced Transformation of Graphite and Diamond to Onions. *Crystals*. 2018. 8. P. 68. DOI: 10.3390/cryst8020068.

20. **Li S., Zhang J., Wang J., Guan S., Li Y.** Dense as Diamond: Pn-C10, a Superhard sp^3 Carbon Allotrope. *Appl. Phys. Lett.* 2021. 118. P. 012107. DOI: 10.1063/5.0032528.
21. **Zhu Q., Oganov A.R., Salvadó M.A., Pertierra P., Lyakhov A.O.** Denser than Diamond: Ab Initio Search for Superdense Carbon Allotropes. *Phys. Rev. B.* 2011. 83. P. 193410(4). DOI: 10.1103/PhysRevB.83.193410.
22. **Huang Y., Wu J., Hwang K.C.** Thickness of Graphene and Single-Wall Carbon Nanotubes. *Phys. Rev. B.* 2006. 74. P. 245413. DOI: 10.1103/PhysRevB.74.245413.
23. **Wang C.Y., Zhang L.C.** A Critical Assessment of the Elastic Properties and Effective Wall Thickness of Single-Walled Carbon Nanotubes. *Nanotechnology.* 2008. 19. P. 075705. DOI: 10.1088/0957-4484/19/7/075705.
24. **Yakobson B.I., Avouris P.** Mechanical Properties of Carbon Nanotubes. *Carbon Nanotubes.* 2001. 80. P. 287–327. DOI: 10.1007/3-540-39947-X_12.
25. **Cai J., Wang C.Y., Yu T., Yu S.** Wall Thickness of Single-Walled Carbon Nanotubes and Its Young's Modulus. *Phys. Scr.* 2009. 79. P. 025702. DOI: 10.1088/0031-8949/79/02/025702.
26. **Khabibrakhmanov A., Sorokin P.** Carbon at the Nanoscale: Ultrastiffness and Unambiguous Definition of Incompressibility. *Carbon.* 2020. 160. P. 228–235. DOI: 10.1016/j.carbon.2019.12.071.
27. **Li C., Chou T.-W.** A Structural Mechanics Approach for the Analysis of Carbon Nanotubes. *Int. J. Solids Struct.* 2003. 40. P. 2487–2499. DOI: 10.1016/S0020-7683(03)00056-8.
28. **Hohenberg P., Kohn W.** Inhomogeneous Electron Gas. *Phys. Rev.* 1964. 136. P. B864–B871. DOI: 10.1103/PhysRev.136.B864.
29. **Kohn W., Sham L.J.** Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects. *Phys. Rev.* 1965. 140. P. A1133–A1138. DOI: 10.1103/PhysRev.140.A1133.
30. **Blöchl P.E.** Projector Augmented-Wave Method. *Phys. Rev. B.* 1994. 50. P. 17953–17979. DOI: 10.1103/PhysRevB.50.17953.
31. **Kresse G., Joubert D.** From Ultrasoft Pseudopotentials to the Projector Augmented-Wave Method. *Phys. Rev. B.* 1999. 59. P. 1758–1775. DOI: 10.1103/PhysRevB.59.1758.
32. **Perdew J.P., Burke K., Ernzerhof M.** Generalized Gradient Approximation Made Simple. *Phys. Rev. Lett.* 1996. 77. P. 3865–3868. DOI: 10.1103/PhysRevLett.77.3865.
33. **Kresse G., Furthmüller J.** Efficient Iterative Schemes for Ab Initio Total-Energy Calculations Using a Plane-Wave Basis Set. *Phys. Rev. B.* 1996. 54. P. 11169–11186. DOI: 10.1103/PhysRevB.54.11169.
34. **Kresse G., Furthmüller J.** Efficiency of Ab-Initio Total Energy Calculations for Metals and Semiconductors Using a Plane-Wave Basis Set. *Comput. Mater. Sci.* 1996. 6. P. 15–50. DOI: 10.1016/0927-0256(96)00008-0.
35. **Kresse G., Hafner J.** Ab Initio Molecular-Dynamics Simulation of the Liquid-Metal-Amorphous-Semiconductor Transition in Germanium. *Phys. Rev. B.* 1994. 49. P. 14251–14269. DOI: 10.1103/PhysRevB.49.14251.
36. **Erohin S.V., Sorokin P.B.** Elastic Properties of Nanopolycrystalline Diamond: The Nature of Ultrahigh Stiffness. *Appl. Phys. Lett.* 2015. 107. P. 121904. DOI: 10.1063/1.4931493.

Поступила в редакцию 24.04.2024

Принята к опубликованию 07.06.2024

Received 24.04.2024

Accepted 07.06.2024