

УДК 538.911

Первопринципное исследование объемного сжатия автоинтеркалированной фазы из графиновых слоев

Павлик Виталий Вадимович

vitaliypavlik@mail.ru

SPIN-код: 4137-4902

Грешняков Владимир Андреевич^(*)

v.greshnyakov@yandex.ru

SPIN-код: 2627-5388

ФГБОУ ВО ЧелГУ, Челябинск, Россия

Аннотация. Методом теории функционала плотности рассчитана структура трехмерной фазы из вложенных стопок слоев α -графина-1 и исследованы ее механические свойства при гидростатическом сжатии до 12,5 ГПа. Установлено, что фаза во всем интервале давлений имеет тетрагональную элементарную ячейку и состоит из плоских слоев. В направлении оси c фаза имеет минимальную отрицательную сжимаемость, равную $-11,6 \text{ ТПа}^{-1}$. В направлении осей a и b максимальная линейная сжимаемость составляет $18,2 \text{ ТПа}^{-1}$. Объемный модуль фазы равен 33,7 ГПа.

Ключевые слова: графиновые слои, гидростатическое сжатие, отрицательная линейная сжимаемость, первопринципное моделирование

A first-line study of volumetric compression of an autointercalated phase from graphyne layers

Pavlik Vitaly Vadimovich

vitaliypavlik@mail.ru

SPIN-code: 4137-4902

Greshnyakov Vladimir Andreevich^(*)

v.greshnyakov@yandex.ru

SPIN-code: 2627-5388

FGBOU IN ChelSU, Chelyabinsk, Russia

Abstract. The structure of a three-dimensional phase consisting of nested stacks of alpha-graphyne-1 layers is calculated using the density functional theory method and its mechanical properties are studied under hydrostatic compression up to 12.5 GPa. It is established that the phase in the entire pressure range has a tetragonal unit cell and consists of flat layers. In the direction of the c axis, the phase has a minimum negative compressibility equal to -11.6 TPa^{-1} . In the direction of the a and b axes, the maximum linear compressibility is 18.2 TPa^{-1} . The volumetric phase modulus is 33.7 GPa.

Keywords: graphyne layers, hydrostatic compression, negative linear compressibility, basic modeling

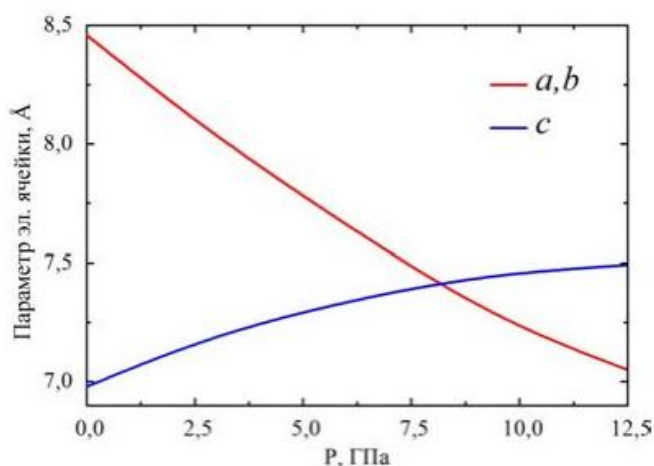
Введение. Теоретические и экспериментальные исследования структуры и свойств графиновых слоев указывают на возможность их потенциального использования для хранения электрического заряда, проектирования на их

основе сенсоров и пьезоэлектрических материалов [1, 2]. Карбиновые цепи в структуре графинов замыкаются в кольца, через которые могут проникать молекулы с малым поперечным сечением, по крайней мере, в одном направлении. Механизм взаимного проникновения кристаллических решеток слоев посредством цепей и колец может быть использован для модельного построения трехмерной фазы, состоящий из вложенных стопок графеновых слоев. Наноструктуры такого типа называют автоинтеркалированными (АИ) [3]. Термическая устойчивость фазы из автоинтеркалированных слоев α -графина-1 ранее была исследована в работах [4, 5]. Механические характеристики этой фазы прежде не были изучены и будут рассмотрены в этой работе впервые.

Методы исследования. Структурная модель АИ фазы представляет собой вложенные друг в друга перпендикулярно ориентированные стопки слоев α -графина с АВ упаковкой слоев. Взаимное проникновение слоев осуществлялось вдоль примитивных векторов трансляции. Расчет структуры АИ фазы проводился при использовании метода теории функционала электронной плотности и функционала vdW-DF в программном пакете Quantum ESPRESSO [6]. Гидростатическое сжатие проводилось в интервале давлений от 0 до 12,5 ГПа с шагом в 2,5 ГПа. Для расчета объемного модуля упругости использовалось уравнение состояния Кумара — Шарма [7].

Результаты. В результате релаксации структуры АИ фазы из α -графина-1 установлено, что кристаллическая решетка этой фазы имеет тетрагональную элементарную ячейку из 32 атомов с параметрами $a = b = 8,459 \text{ \AA}$, $c = 6,980 \text{ \AA}$. Слои α -графина-1 при релаксации структуры сохраняют плоскую форму и взаимно перпендикулярную ориентацию.

При гидростатическом сжатии фазы до 12,5 ГПа элементарная ячейка остается тетрагональной, а параметры принимают значения $a = b = 7,052 \text{ \AA}$, $c = 7,492 \text{ \AA}$. Наблюдаемый из расчетов рост параметра c (рисунок) показывает, что рассматриваемая фаза характеризуется отрицательной линейной сжимаемостью вдоль соответствующей оси. Наибольшие линейные сжимаемости вдоль кристаллографических осей a и b равны $18,2 \text{ ТПа}^{-1}$, вдоль оси c минимальное значение этой характеристики равно $-11,6 \text{ ТПа}^{-1}$.



Изменение параметров элементарной ячейки АИ α -графина-1

При использовании уравнения состояния Кумара — Шарма найдены значения объемного модуля упругости $B_0 = 33.7$ ГПа и его первой производной $B'_0 = 2.45$. Расчетное значение объемного модуля АИ фазы ниже расчетного модуля для 2Н-графита на 31 %.

Заключение. Трехмерная фаза из вложенных слоев α -графина-1 имеет пористую структуру и характеризуется плотностью $1,28$ г/см³, объемным модулем, сопоставимым с модулем 2Н-графита, и отрицательной линейной сжимаемостью вдоль одной из кристаллографических осей. Потенциальное практическое применение автоинтеркалированной фазы может быть реализовано в датчиках давления.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Челябинской области (грант ГЗ № 075-00186-25-00).

СПИСОК ИСТОЧНИКОВ

- [1] Gao X., Liu H., Wang D., Zhang J. Graphdiyne: synthesis, properties, and applications. Chem. Soc. Rev., 2019, vol. 48, no. 3, pp. 908–936. <https://doi.org/10.1039/c8cs00773j>
- [2] Belenkov E.A., Greshnyakov V.A., Mavrinskii V.V. Ab initio calculations of layered compounds consisting of sp³ or sp+sp² hybridized carbon atoms. Nanosystems: Physics, Chemistry, Mathematics, 2021, vol. 12, no. 6, pp. 672–679. <https://doi.org/10.17586/2220-8054-2021-12-6-672-679>
- [3] Еняшин А.Н., Ивановский А.Л. Новые автоинтеркалированные гипералмазы C₂₈, Ti@C₂₈ и Zn@C₂₈: кристаллическая структура, упругие и электронные свойства. Письма в ЖЭТФ, 2007, т. 86 (8), с. 609–615. <https://doi.org/10.1134/S002136400720009X>
- [4] Greshnyakov V.A., Pavlik V.V. Calculations of the structure and properties of autointercalated graphyne layers. Letters on Materials, 2023, vol. 13, no. 4, pp. 323–328. <https://doi.org/10.22226/2410-3535-2023-4-323-328>
- [5] Грешняков В.А., Павлик В.В. Новые наноструктурированные углеродные соединения на основе графиновых слоев. Челябинский физико-математический журнал, 2025, т. 10, вып. 1, с. 147–157. <https://doi.org/10.47475/2500-0101-2025-10-1-147-157>
- [6] Giannozzi P., Andreussi O., Brumme T., Bunau O., Buongiorno Nardelli M. et al. Advanced capabilities for materials modeling with Quantum ESPRESSO. Journal of Physics: Condensed Matter, 2017, vol. 29, art. no. 465901. <https://doi.org/10.1088/1361-648X/aa8f79>
- [7] Sharma Uma D., Kumar M., Effect of pressure on nanomaterials. Physica B, 2010, vol. 405, no. 16, pp. 2820–2826. <https://doi.org/10.1016/j.physb.2010.04.005>