

УГЛЕРОДНЫЕ АЛМАЗОПОДОБНЫЕ ФАЗЫ: КЛАССИФИКАЦИЯ, УСТОЙЧИВОСТЬ, МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА

Баимова Ю.А., Рысаева Л.Х.

*Институт проблем сверхпластичности металлов Российской академии наук,
450001, Уфа, ул. Степана Халтурина, 39,
e-mail: julia.a.baimova@gmail.com*

Углерод и структуры на его основе обладают уникальными физико-химическими свойствами. Одной из таких структур на основе углерода являются алмазоподобные фазы, сформированные из четырехкоординированных атомов, имеющих sp^3 гибридизацию.

Углеродные алмазоподобные фазы (УАФ) делятся на три группы – фуллераны (на основе фуллереноподобных молекул), тубулены (на основе углеродных нанотрубок) и УАФ на основе листов графена. Подобные структуры могут быть полученные сшивкой или совмещением единичных структурных элементов – полиморфов углерода¹. Кристаллическая структура и свойства таких фаз существенно отличается от кубического алмаза. На данный момент предсказано около тридцати пяти алмазоподобных фаз.

В данной работе методом молекулярной динамики были изучены УАФ различной морфологии и показано, что при применении реалистичного межатомного потенциала из 35 фаз устойчивыми остаются только 14 структур. Показано, что данные структуры также устойчивы при комнатной температуре.

Численный эксперимент показал, что некоторые устойчивые УАФ могут быть гидростатически сжаты до плотностей близких к плотности алмаза². Получены новые закономерности деформирования и выявлены основные структурные механизмы деформации, найдены критические напряжения и показано влияние температуры на деформирование фаз, зависящие от морфологических особенностей. Кроме того, были обнаружены структуры-ауксетики, имеющие отрицательный коэффициент Пуассона.

Литература

1. Грешняков В.А., Беленков Е.А., Березин В.М. Кристаллическая структура и свойства углеродных алмазоподобных фаз. Челябинск: Издательский центр ЮУрГУ.-2012. -150 с.
2. Vaimova J.A., Rysava L.Kh., Rudskoy A.I. Diamond and related Materials, 2018, 81, 154.

Работа выполнена при финансовой поддержке грант Президента Российской Федерации для государственной поддержки молодых российских ученых - докторов наук (МД- 1651.2018.2).