

DOI: <https://doi.org/10.30898/1684-1719.2026.4.12>

УДК: 538.915

ПЕРВОПРИНЦИПНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕРМИЧЕСКОЙ СТАБИЛЬНОСТИ УГЛЕРОДНЫХ АЛМАЗОПОДОБНЫХ СОЕДИНЕНИЙ

В.А. Грешняков, В.В. Павлик

Челябинский государственный университет,
454001, Челябинск, ул. Братьев Кашириных, 129

Статья поступила в редакцию 8 апреля 2026 г.

Аннотация. В данной статье проведено первопринципное исследование термической устойчивости восьми гипотетических алмазоподобных углеродных соединений, являющихся полупроводниками, в которых все атомные позиции являются кристаллографически эквивалентными. Имитация отжига структуры этих соединений была проведена в рамках молекулярно-динамического моделирования при использовании метода теории функционала плотности в обобщенно-градиентном приближении. Установлено, что фазы структурных типов $TA1$, $TA3$, $CA1$, $CA2$, TB и $SA4$ должны быть устойчивы при 300 К, поэтому материалы на их основе могут быть использованы при разработке электронных устройств. Структура гексагональной алмазоподобной фазы высокой плотности $SA2$ ($hP3$) разрушается с последующей аморфизацией, как минимум, при 200 К. Также установлено, что гипотетический ромбоэдрический алмазоподобный полупроводник $LA9$ ($rh6$) с минимальной запрещенной зоной неустойчив при 300 К. Отжиг структуры этой фазы приводит к разрыву наименее прочных межатомных связей с ее последующей трансформацией в одну из двух новых упорядоченных фаз, кристаллические решетки которых имеют $Cmmm$ и $R3m$

симметрию. Ромбическая фаза $Sttt$ является гибридной и состоит из 3- и 4-координированных атомов углерода в соотношении 1:2, тогда как ромбоэдрическая $R3t$ фаза состоит только из 3-координированных атомов. Фазы $R3t$ и $Sttt$ должны быть проводниками с промежуточной плотностью от 2.5 до 3.1 г/см³ и размерами максимальных пор, не превышающих 4.15 Å. Анализ порошковых рентгенограмм показал, что набор дифракционных максимумов двух новых фаз значительно отличаются от таковых для гексагонального графита и фазы $LA9$ и, что может быть использовано для идентификации фаз $Sttt$ и $R3t$ в углеродных материалах, а также при изучении конфигурационного перехода $LA9$ в новые кристаллические фазы.

Ключевые слова: полиморфные разновидности алмаза, кристаллическая структура, молекулярно-динамические расчеты.

Финансирование: исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Челябинской области (грант ГЗ № 075-00186-26-00).

Автор для переписки: Грешняков Владимир Андреевич, greshnyakov@csu.ru

Введение

Алмаз представляет собой аллотропную разновидность углерода, сформированную из атомов в состояниях sp^3 гибридизации [1]. Ковалентные связи в кристаллической структуре алмаза характеризуются высокими значениями энергии и силовой постоянной [1], поэтому алмазные материалы благодаря своим превосходным механическим свойствам и высокой теплопроводности находят широкое практическое применение в качестве защитных покрытий, абразивных материалов и теплоотводов [2-6]. С точки зрения электронных свойств алмаз является диэлектриком с большой шириной запрещенной зоны ~ 5.5 эВ при комнатной температуре [7], что значительно ограничивает его применение при изготовлении устройств микро- и наноэлектроники, кроме редких случаев, когда устройство должно работать в экстремальных условиях (например, при высокой температуре или давлении)

[8,9]. Обычно изменять электронные свойства исходного соединения можно в процессе допирования, однако в углеродных неорганических соединениях проводимость может изменяться без изменения химического состава за счет изменения степени гибридизации атомов [1,7]. Поэтому в углеродных материалах электронные свойства могут варьироваться при наличии полиморфных разновидностей [10-12]. В частности, теоретически исследован ряд полиморфных разновидностей алмаза с шириной запрещенной зоны в полупроводниковом диапазоне, благодаря чему алмазоподобные соединения *LA9*, *CA1*, *CA2*, *TA1*, *TA3*, *TB*, *SA2* и *SA4* могут быть использованы в микроэлектронике [10, 12]. Одной из основных проблем при поиске перспективных гипотетических соединений является определение условий их устойчивого существования. Наиболее значительное воздействие на полупроводниковые элементы на основе новых алмазоподобных материалов будет оказывать температура внешней среды, однако к настоящему времени детальное исследование стабильности при нормальных условиях выполнено только для соединений *CA2*, *TA1*, *TA3* и *TB* при использовании эмпирических потенциалов [13-15]. Поэтому необходимо оценить устойчивость кристаллической структуры ряда полупроводниковых алмазоподобных соединений при комнатной температуре в рамках первопринципного моделирования.

1. Методика расчетов

Кристаллическая структура и электронные характеристики углеродных алмазоподобных и графитоподобных фаз были определены при использовании метода теории функционала плотности (ТФП), представленного в программном комплексе Quantum ESPRESSO [16]. Расчеты методом ТФП производились, используя приближение обобщенного градиента и функционал обменно-корреляционной энергии Педью-Бурке-Эрнзерхофа [17]. Псевдопотенциалы Труллье-Мартинса, сохраняющие норму, были применены для учета влияния ионных остовов [18]. Для вычислений в зоне Бриллюэна при температуре 0 К

использовалась сетка из k -точек $12 \times 12 \times 12$ и энергия отсечки кинетической энергии в 850 эВ. Релаксация исходной структуры производилась, пока величина силы, действующей на один атом, не будет меньше 0.005 эВ/Å, а напряжение не станет меньше 0.5 кбар. Энергия когезии углеродной фазы рассчитывалась как разность полных энергий атома в конкретной фазе и в изолированном состоянии. Оценка устойчивости структур новых фаз была выполнена в рамках метода ТФП при использовании молекулярно-динамического моделирования с варьируемой элементарной ячейкой в программном пакете Quantum ESPRESSO [16]. Расчеты были проведены с использованием ячеек от 48 до 96 атомов, сеток от $4 \times 4 \times 4$ до $8 \times 8 \times 8$ из k -точек, определенных по методу Монхорста-Пака [19], и энергии отсечки 800 эВ. Минимальное время имитации отжига было принято равным 7 пс с шагом в 1 фс. Для расчета порошковых рентгенограмм алмазоподобных соединений была использована стандартная методика с учетом длины волны характеристического излучения Cu-K $_{\alpha 1}$ (1.5405 Å) и среднего размера областей когерентного рассеяния ~ 50 нм [20]. Апробация вышеперечисленных методик расчета была успешно произведена в процессе расчета структурных и энергетических параметров алмазоподобных соединений и графитов [21,22].

2. Результаты и обсуждение

Для изучения термической стабильности были выбраны гипотетические алмазоподобные полупроводники следующих структурных типов: LA9 (*rh6*), CA1 (*T*-углерод), CA2, TA1 (16-тетра(2,2)тубулан), TA3, TB (*hcp C₃*), SA2 (*hP3*) и SA4 [10]. Первый этап исследования заключался в релаксации структуры этих углеродных соединений при абсолютном нуле и отсутствии давления с использованием триклинных элементарных ячеек без учета симметрии. Все изучаемые алмазоподобные соединения в результате расчетов демонстрируют устойчивость структуры. Провести первичную оценку термической устойчивости фаз возможно путем расчета разностных энтальпий ($\Delta H_{\gamma 1}$) алмазоподобных соединений и гибридной углеродной фазы из слоев $\gamma 1$ -графина-1, стабильной до температуры ~ 240 °C [23]. Расчеты показали,

что фазам $LA9$, $TA1$, $TA3$ и TB соответствуют значения $\Delta H_{\gamma 1}$ от -0.33 до -0.01 эВ/атом, предварительно указывая на устойчивость этих фаз при температурах, выше комнатной. Фазы $CA1$, $CA2$, $SA2$ и $SA4$ характеризуются значениями $\Delta H_{\gamma 1}$ от 0.25 до 0.73 эВ/атом, поэтому ожидаемый температурный предел их существования ниже, чем температура начала разрушения слоя $\gamma 1$ -графина-1.

С другой стороны, дополнительная информация о предельной температуре, при которой изучаемые фазы могут быть стабильны, может быть получена при рассмотрении их структуры как совокупности структурных звеньев. С такой точки зрения устойчивость фазы должна определяться устойчивостью ее наиболее напряженного структурного звена в виде углеводорода. Наиболее распространенными структурными звеньями алмазоподобных соединений являются циклические фрагменты из трех и четырех атомов, поэтому устойчивость этих фаз должна определяться устойчивостью молекул с углеродным каркасом, содержащим трех- и четырехатомные циклы. В частности, фазы TB , $CA1$ и $CA2$ образованы углеродными каркасами молекул с трехчленными циклами, такими как циклопропан, тетра-трет-бутилтетраэдран и призмат, поэтому температурная граница устойчивости этих фаз должна находиться вблизи $360-370$ °С [24-26]. Фазы $TA1$ и $TA3$ содержат структурные звенья в виде углеродных каркасов связанных ладдеранов и циклобутановых колец, поэтому ожидаемая предельная температура существования этих фаз составляет $\sim 400-500$ °С [27,28].

Несмотря на то, что наиболее напряженные структурные звенья фаз $CA1$, $CA2$, $TA1$, $TA3$ и TB устойчиво существуют при нормальных условиях в виде углеродных каркасов молекул, и фаза $LA9$ имеет относительно низкую энтальпию ($\Delta H_{\gamma 1} = -0.09$ эВ/атом), однако эти факты не являются однозначным доказательством их устойчивости. Следовательно, на следующем этапе работы необходимо выполнить прямое исследование термической стабильности в рамках вычислительного эксперимента с помощью молекулярно-динамического моделирования. Первопринципное исследование термической устойчивости

полупроводниковых алмазоподобных соединений восьми разновидностей было поведено в течение 7 пс в температурном интервале от 200 до 400 К. Графики зависимостей полных энергий (E_{total}) исследуемых фаз от времени температурного воздействия (t) приведены на рис. 1. Также на рис. 1 представлены структуры фаз на заключительном шаге имитации отжига.

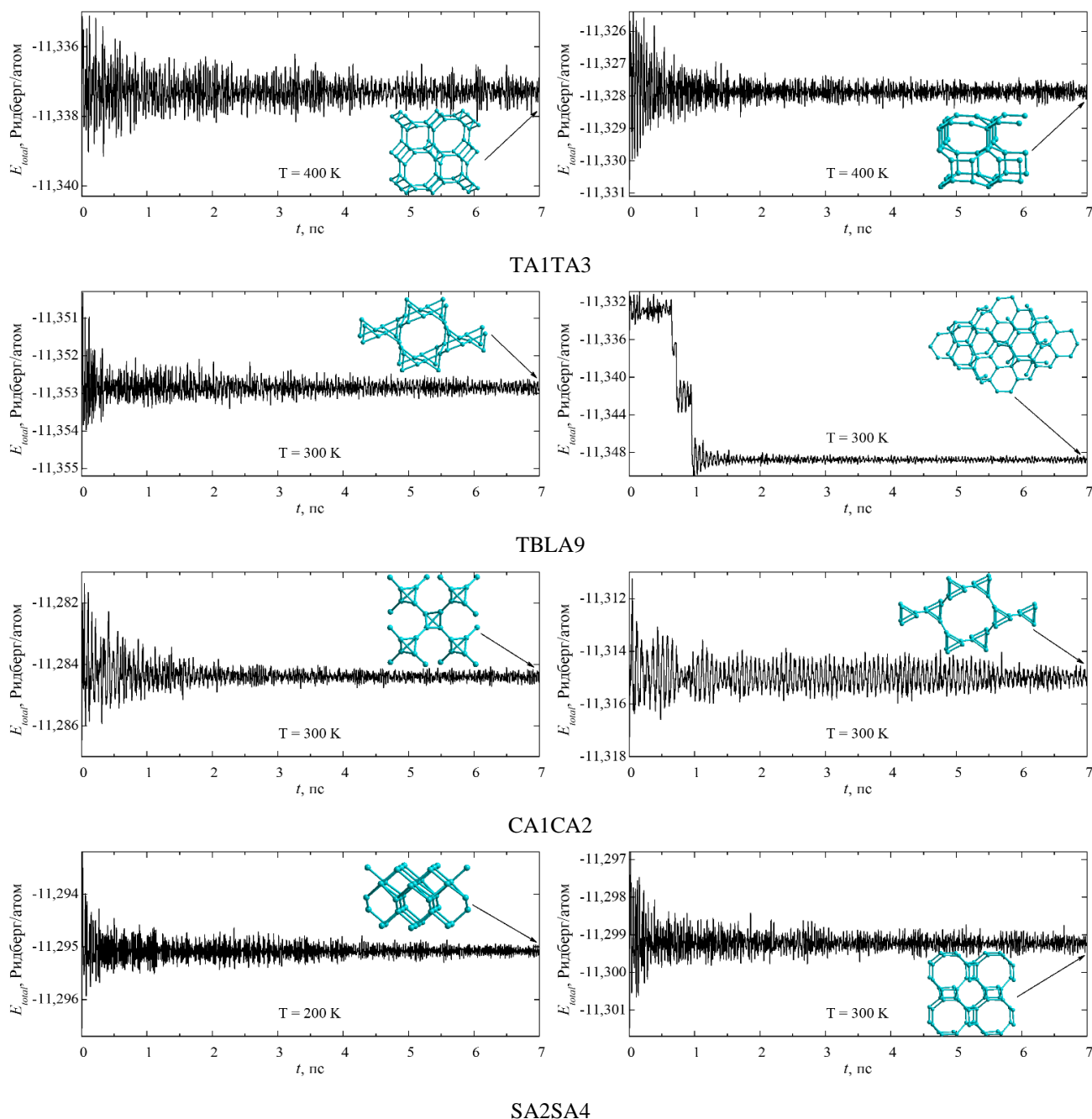


Рис. 1. Расчетные зависимости внутренней энергии системы (E_{total}) от времени имитации отжига структуры алмазоподобных соединений.

В результате моделирования установлено, что фазы $TA1$, $TA3$, $CA1$, $CA2$, TB и $SA4$ являются устойчивыми при 300 К. Повышение температуры отжига до 400 К показало устойчивость фаз $TA1$ и $TA3$ с наименьшей энтальпией. Также установлено, что кристаллическая структура фазы $LA9$ при 300 К является неустойчивой и испытывает конфигурационный фазовый переход либо в графитоподобную, либо в гибридную sp^2 - sp^3 фазу (см. рис. 1), каждая из которых прежде не была исследована. В свою очередь, фаза $SA2$ нестабильна не только при нормальных условиях, но при понижении температуры до 200 К. Разрушение структуры этой фазы наблюдается на ранней стадии отжига (рис. 1), которое выражается в ее аморфизации.

Поскольку в процессе отжига алмазоподобного соединения $LA9$ происходит его трансформация не в гексагональный или турбостратный графит, а в гибридную или графитоподобную фазы, то на заключительном этапе были изучены структуры и свойства этих новых фаз. Ромбоэдрическая кристаллическая решетка новой графитоподобной фазы принадлежит к пространственной группе $R3m$ (№ 166) и в гексагональном представлении характеризуется параметрами $a = 7.017 \text{ \AA}$ и $c = 3.375 \text{ \AA}$ (рис. 2а). Все атомы углерода находятся в эквивалентных состояниях sp^2 гибридизации. Структура новой фазы состоит из полимеризованных углеродных каркасов молекул бензола, поэтому каждый атом имеет кольцевой параметр $b^1 10^2$. На ковалентную связность гексагональных колец указывает распределение электронной плотности (для валентных электронов) вдоль линий химических связей (рис. 2а). Длины химических связей внутри 6-членных колец и между ними соответственно составляют $1.494 (L_1 = L_2)$ и $1.375 \text{ \AA} (L_3)$, которые на 3-5 % отличаются от длины С-С связи в графите [7]. Углы между связями в $R3m$ -фазе изменяются от $113.5 (\beta_{12})$ до $123.1^\circ (\beta_{13} = \beta_{23})$, поэтому отклонение от соответствующего значения для листа графена не превышает 5.4 %. Вторая фаза является гибридной, для которой характерна ромбическая элементарная ячейка (рис. 2б) с параметрами $a = 7.167 \text{ \AA}$, $b = 2.627 \text{ \AA}$ и $c = 12.411 \text{ \AA}$ (пространственная группа – $Sttt$ № 65). Атомы находятся в трех неэквивалентных состояниях, из

которых 12 – sp^2 гибридные, 24 – sp^3 гибридные. В структуре фазы $Sttt$ можно выделить плоские 6-членные кольца, состоящие только из sp^3 гибридных атомов, и фрагменты $C = C$, которые хорошо различимы на картине распределения электронной плотности (рис. 2б). Длины связей находятся в широком диапазоне от 1.327 (L_1) до 1.645 Å (L_4), а углы между ними – от 105.94 до 129.63°.

Плотность фазы $R3t$ составляет 2.495 г/см³ и на 10.9 % превосходит плотность графита (~ 2.25 г/см³ [7]), тогда как плотность гибрида $Sttt$ составляет 3.073 г/см³ и является промежуточной между плотностями графита и алмаза (~ 3.52 г/см³ [7]). При плотной упаковке связанных 6-членных колец диаметр максимальных пор в новых фазах не превышает 4.15 Å. Разностные энергии когезии фаз $Sttt$ и $R3t$ относительно полной энергии изолированного листа графена L_6 соответственно равны 0.41 и 0.49 эВ/атом, которые находятся в диапазоне энергий наиболее стабильных алмазоподобных соединений [10].

Также была изучена электронная структура двух новых углеродных фаз при расчете зонных структур и плотностей электронных состояний в зонах Бриллюэна (рис. 3). Установлено, что запрещенная зона в фазах $Sttt$ и $R3t$ отсутствует, поэтому материалы на их основе должны быть проводниками. Отсутствие запрещенной зоны можно объяснить переходом атомов из состояний гибридизации sp^3 в состояния sp^2 , что должно обязательно увеличивать электропроводность полупроводника $LA9$ с относительно узкой запрещенной зоной в 0.8 эВ [10]. Таким образом, на фазовый переход алмазоподобного соединения $LA9$ в новые фазы будет указывать скачкообразное изменение проводимости. Кроме того, фаза $R3t$, в отличие от графена [29] и новой фазы $Sttt$ (см. рис. 3б), имеет в зоне проводимости вблизи уровня Ферми больше электронных состояний (рис. 3а), поэтому проводимость у этой фазы должна быть выше проводимости графита.

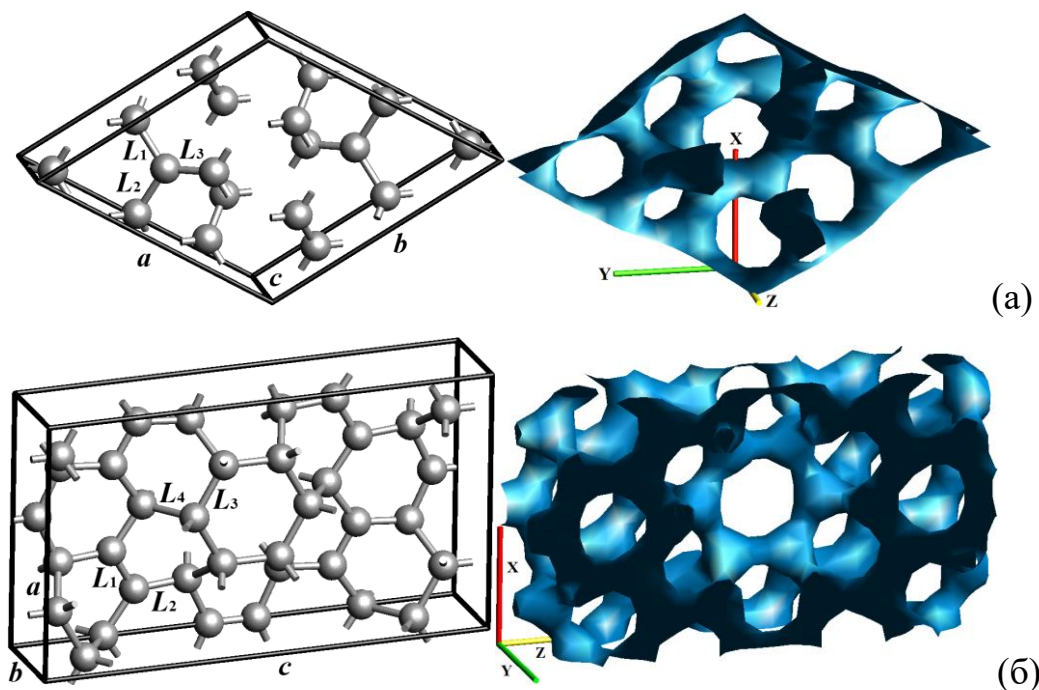


Рис. 2. Элементарные ячейки фаз $R3m$ (а) и $Cmmm$ (б) и характерные для них картины распределения электронной плотности с изоповерхностью для 1 \AA^{-3} .

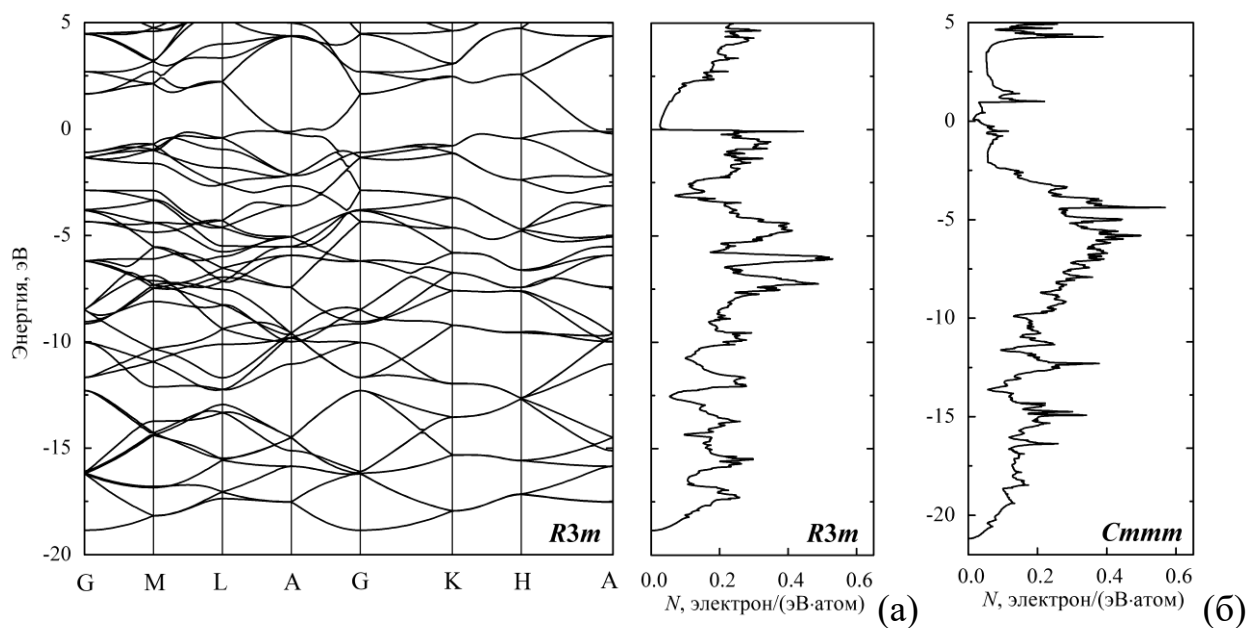


Рис. 3. Электронная зонная структура и плотности электронных состояний графитоподобной $R3m$ (а) и гибридной $Cmmm$ (б) фаз (на нуль по шкале энергий выбрана энергия Ферми).

Так как в процессе отжига алмазоподобных соединений возможен их структурный переход в новые упорядоченные кристаллические фазы, то для экспериментальной идентификации этих фаз может быть использован метод рентгеноструктурного анализа. Для расчета рентгенограмм были использованы

структурные характеристики, полученные в данной работе методом ТФП. Порошковые рентгенограммы гексагонального ($2H$) графита, алмазоподобного соединения $LA9$, гибридной $Cmmm$ и графитоподобной $R3m$ фаз приведены на рис. 4.

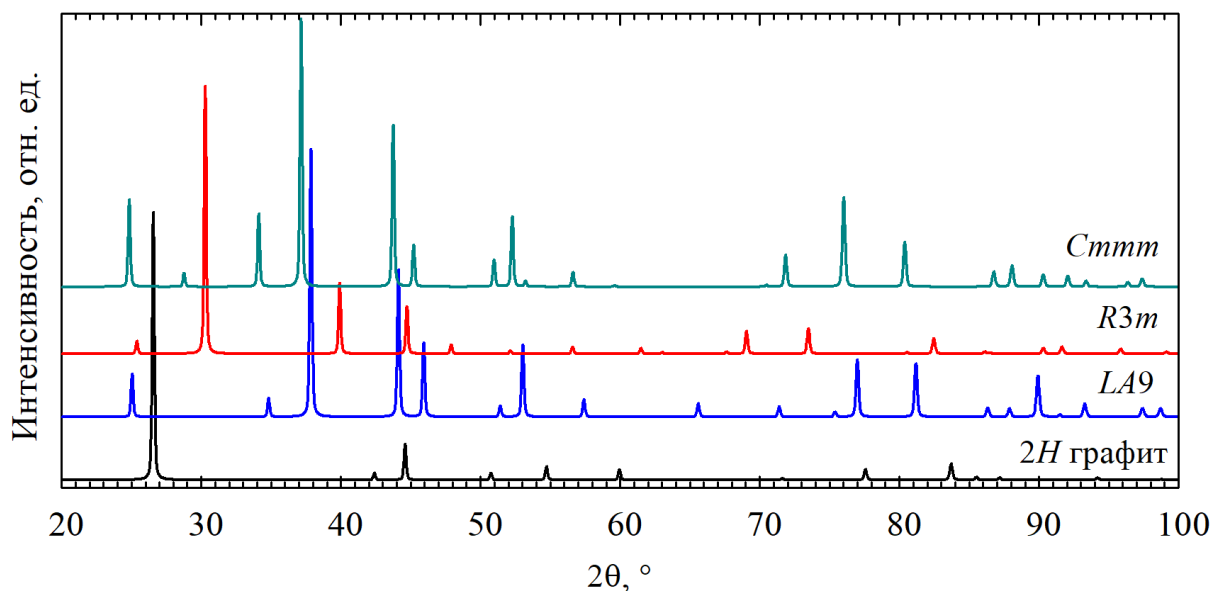


Рис. 4. Расчетные рентгенограммы $2H$ графита, алмазоподобной фазы $LA9$, новых углеродных $3D$ -фаз $R3m$ и $Cmmm$.

Анализ рассчитанных рентгенограмм новых фаз $Cmmm$ и $R3m$ показал, что характерные для них дифракционные картины значительно отличаются от соответствующих картин исходного соединения $LA9$ и наиболее стабильного графита (рис. 4). Ромбическая фаза $Cmmm$ может быть идентифицирована по двум максимумам высокой интенсивности при 37.2 и 43.8° , а также трем максимумам средней интенсивности при 24.8 , 34.1 и 76.0° . В свою очередь, идентификация графитоподобной фазы $R3m$ будет производиться по одному 100-процентному максимуму на 30.3° , максимуму средней интенсивности на 39.9° и трем максимумам интенсивности 9-18 % на удвоенных углах дифракции 44.7 , 69.0 и 73.5° (рис. 4). Следовательно, обнаружение предсказанных углеродных фаз в синтезированных углеродных материалах можно осуществить с помощью метода рентгеноструктурного анализа.

Полученные в рамках молекулярно-динамического моделирования данные об устойчивости полупроводниковых алмазоподобных углеродных кристаллов

согласуются с результатами других авторов. В частности, рассчитанные в работах [30,31] фононные спектры указывают на механическую устойчивость кристаллов типа *TB* и *CA1*. Кроме того, в исследованиях [13-15] по имитации отжига с использованием эмпирического потенциала была установлена устойчивость фаз *TA1*, *TA3* и *TB* при 300 К. Нестабильность соединения *SA2*, которое плотнее алмаза, при низкой температуре можно объяснить высоким значением энтальпии и отсутствием синтезированных углеводородных звеньев. Неустойчивость фазы *LA9* при комнатной температуре связана с разрывом С-С связей в ее структуре, длина которых превышает соответствующую величину для алмаза на ~ 17 %. Однако, если фаза *LA9* будет получена при низкой температуре, то при ее постепенном нагреве до комнатной температуры будет происходить трансформация в новые гибридные или графитоподобные соединения.

Заключение

В данной работе проведено молекулярно-динамическое исследование термической устойчивости восьми гипотетических полупроводников с алмазоподобной структурой при использовании метода теории функционала плотности. Установлено, что при комнатной температуре должны быть устойчивыми такие фазы, как 16-тетра(2,2)тубулан (*TA1*), *TA3*, *hcp C₃* (*TB*), *T*-углерод (*CA1*), *CA2* и *SA4* [10]. Однако алмазоподобные соединения высокой плотности *hP3* (*SA2*) и *rh6* (*LA9*) нестабильны при нормальных условиях. Причем фаза *rh6* в процессе отжига переходит не в аморфную структуру, а в одну из двух новых упорядоченных фаз – гибридную *Stttt* или графитоподобную *R3t*, которые должны быть проводниками. Следовательно, при нормальных условиях среди алмазоподобных фаз с кристаллографически эквивалентными позициями атомов устойчиво существовать могут фазы с шириной запрещенной зоны не менее 1.3 эВ. Результаты исследования можно использовать в качестве рекомендаций по применению новых алмазоподобных полупроводниковых соединений в электронных устройствах, а также для получения новых

гибридных или графитоподобных соединений при термической обработке алмазоподобных фаз.

Финансирование: исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Челябинской области (грант ГЗ № 075-00186-26-00).

Литература

1. Шулепов С.В. Физика углеродных материалов. – Челябинск: Metallurgy. Челябинское отделение, 1990.
2. Neves A.J., Nazare M.H. Properties, growth and applications of diamond. – London: Institution of Engineering and Technology, 2001.
3. Donnet C., Erdemir A. Tribology of diamond-like carbon films: Fundamentals and applications. – New York: Springer Science + Business Media, LLC, 2008.
4. Kastuar S.M., Liu ZL., Najmaei S., Ekuma C. E. Mechanical properties of cubic boron nitride and diamond at dynamical pressure and temperature. // Applied Physics Letters. – 2023. – V. 123. – No. 4. – Art. No. 232102. <https://doi.org/10.1063/5.0172885>
5. Wang C., Shinyavskiy D., Suter L., Altikriti Z., Jia Q., Muehle M., Seo JH. Mechanical and Electrical Properties of Free-standing Polycrystal Diamond Membranes. // Advanced Science. – 2025. – V. 12. – Art. No. e03986. <https://doi.org/10.1002/advs.202503986>
6. Sang L. Diamond as the heat spreader for the thermal dissipation of GaN-based electronic devices. // Functional Diamond. – 2021. – V. 1. – No. 1. – P. 174-188. <https://doi.org/10.1080/26941112.2021.1980356>
7. Pierson. H.O. Handbook of carbon, graphite, diamond, and fullerenes: properties, processing, and applications. – New Jersey: Noyes, 1993.
8. Belwanshi V., Topkar A. Quantitative analysis of MEMS piezoresistive pressure sensors based on wide band gap materials. // IETE Journal of Research. – 2019. – V. 68. – No. 1. – P. 667-677. <https://doi.org/10.1080/03772063.2019.1620641>

9. Li A.C., Li B., Gonzalez-Cataldo F., Rudd R. E., Militzer B., Bringa E. M., Meyers M. A. Diamond under extremes. // *Materials Science and Engineering R Reports*. – 2024. – V. 161. – Art. No. 100857. <https://doi.org/10.1016/J.MSER.2024.100857>
10. Belenkov E.A., Greshnyakov V.A. Structure, properties, and possible mechanisms of formation of diamond-like phases // *Physics of the Solid State*. –2016. – V. 58. – No. 10. – P. 2145-2154. <https://doi.org/10.1134/S1063783416100073>
11. Грешняков В.А. Структура и свойства алмазоподобных углеродных нанотрубок. // *Челябинский физико-математический журнал*. – 2023. – Т. 8. – № 2. – С. 261-270. <https://doi.org/10.47475/2500-0101-2023-18209>
12. Tromer R.M., Ipaves B., Pereira Jr. M.L., Woellner C.F., Cai K., Galvao D.S. On the electronic, mechanical and optical properties of superhard cross-linked carbon nanotubes (tubulanes). // *The Journal of Physical Chemistry C (J. Phys. Chem. C)*. 2026. V. 130. – No. 9. – P. 3624-3631. <https://doi.org/10.1021/acs.jpcc.5c08652>
13. Rysaeva L.Kh., Lisovenko D.S., Gorodtsov V.A., Baimova J.A. Stability, elastic properties and deformation behavior of graphene-based diamond-like phases. // *Computational Materials Science*. – 2020. – V. 172. – Art. No. 109355. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2019.109355>
14. Baimova J.A., Rysaeva L.Kh., Rudskoy A.I. Deformation behavior of diamond-like phases: Molecular dynamics simulation. // *Diamond and Related Materials*. – 2018. – V. 81. – No. 4. – P. 154-160. <https://doi.org/10.1016/j.diamond.2017.12.001>
15. Rysaeva L.Kh., Baimova J.A., Dmitriev S.V., Lisovenko D.S., Gorodtsov V.A., Rudskoy A.I. Elastic properties of diamond-like phases based on carbon nanotubes. // *Diamond and Related Materials* – 2019. – V. 97. – Art. No. 107411. <https://doi.org/10.1016/j.diamond.2019.04.034>
16. Giannozzi P., Andreussi O., Brumme T. et al. QUANTUM ESPRESSO: A modular and open-source software project for quantum simulations of materials. // *Journal of Physics: Condensed Matter*. – 2009. – V. 21. – No. 39. – P. 395502. <https://doi.org/10.1088/1361-648X/aa8f79>

17. Perdew J.P., Burke K., Ernzerhof M. Generalized gradient approximation made simple. // *Physical Review Letters*. – 1996. – V. 77. – No. 18. – P. 3865-3868. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.77.3865>
18. Troullier N., Martins J.L. Efficient pseudopotentials for plane-wave calculations. // *Physical Review B*. – 1991. – V. 43. – No. 3. – P. 1993-2006. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.43.1993>
19. Monkhorst H.J., Pack J.D. Special points for Brillouin-zone integrations. // *Physical Review B*. – 1976. – V. 13. – No. 12. – P. 5188-5192. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.13.5188>
20. Уманский Я.С., Скаков Ю.А., Иванов А.Н., Расторгуев Л.Н. Кристаллография, рентгенография и электронная микроскопия. – М.: Металлургия, 1982.
21. Грешняков В.А., Павлик В.В. Новые наноструктурированные углеродные соединения на основе графитовых слоев. // *Челябинский физико-математический журнал*. – 2025. – Т. 10. – № 1. – С. 147-157.
22. Greshnyakov V.A., Pavlik V.V., Belenkov M.E., Kulakova E.A. Carbon clathrates C₂₄, C₂₈ and CA6: Structure formation and properties. // *Letters on Materials*. – 2026. – V. 16. – No 1. – P. 23-29. <https://doi.org/10.48612/letters/2026-1-23-29>
23. Desyatkin V.G., Martin W.B., Aliev A.E. et al. Scalable synthesis and characterization of multilayer γ -graphyne, New carbon crystals with a small direct band gap. // *Journal of the American Chemical Society*. – 2022. – V. 144. – No. 39. – P. 17999-18008. <https://doi.org/10.1021/jacs.2c06583>
24. Ipatiew Wl., Huhn W. Pyrogenetische contactreactionen organischer verbindungen. // *Berichte der Deutschen Chemischen Gesellschaft*. – 1903. Bd. 36. – H. 2. – S. 2014-2016. <https://doi.org/10.1002/cber.190303602114>
25. Maier G., Pfriem S., Schafer U., Matusch R. Tetra-tert-butyltetrahedrane. // *Angewandte Chemie International Edition*. – 1978. – V. 17. – No. 7. – P. 520-521.
26. Katz T.J., Acton N. Synthesis of prismane. // *Journal of the American Chemical Society*. – 1973. – V. 95. – No. 8. – P. 2738-2739. <https://doi.org/10.1021/ja00789a084>

27. Kern F., Walters W.D. The thermal decomposition of cyclobutane. // Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America. – 1952. – V. 38. – No. 11. – P. 937-942. <https://doi.org/10.1073/pnas.38.11.937>
28. Hutmacher H.-M., Fritz H.-G., Musso H. Tetraasterane, pentacyclo[6.4.0.0^{2,7}.0^{4,11}.0^{5,10}]-dodecane. // Angewandte Chemie International Edition. –1975. – V. 14. – P. 180-181. <https://doi.org/10.1002/anie.197501801>
29. Kryakvin N.V., Kurakin V.A., Kobernik T.N., Maslov M.M. DFT-based parameterization of a non-orthogonal tight-binding model for electronic band structure calculations of carbon and hydrocarbon materials. // Letters on Materials. –2025. – V. 15. – No. 4. – P. 362-368. <https://doi.org/10.48612/letters/2025-4-362-368>
30. Sheng X.-L., Yan Q.-B., Ye F., Zheng Q.-R., Su G. T-carbon: A novel carbon allotrope. // Physical Review Letters. – 2011. – V. 106. – Art. No. 155703. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.106.155703>
31. Schultz P.A., Leung K., Stechel E.B. Small rings and amorphous tetrahedral carbon // Physical Review B. –1999. – V. 59. – No. 2. – P. 733-741. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.59.733>

Для цитирования:

Грешняков В.А., Павлик В.В. Первопринципное исследование термической стабильности углеродных алмазоподобных соединений // Журнал радиоэлектроники. – 2026. – №. 4. <https://doi.org/10.30898/1684-1719.2026.4.12>