

УДК 539.23:548.12

Р. А. Браже, А. И. Кочаев

2D-КРИСТАЛЛЫ С ПЯТЬЮ МЕЖАТОМНЫМИ СВЯЗЯМИ ТИПА СЕТОК КЕПЛЕРА¹

Аннотация.

Актуальность и цели. Из 2D-кристаллических материалов хорошо известны графен и графеноподобные структуры в виде плоских атомных сеток с шестиугольными ячейками. Между тем это только одна из одиннадцати возможных плоских сеток, состоящих из правильных многоугольников (сеток Кеплера). Еще пять из них описывают предложенные нами ранее и исследованные также рядом других авторов так называемые супракристаллы. Целью данной работы является исследование возможности устойчивого существования 2D-кристаллических решеток в виде сеток Кеплера типов 343^24 , 3^34^2 и 3^46 (обозначения даны в символах Шлефли).

Материалы и методы. Объектами исследования являются 2D-кристаллические структуры, состоящие из атомов пятой группы (P, As, Sb, Bi) и шестой группы (S, Se, Te) таблицы Менделеева. Численные расчеты длины межатомных связей, отвечающих равновесному состоянию структуры, производились на основе DFT-методов с использованием программного пакета VASP в версии 4.6.

Результаты. Показано, что среди таких новых 2D-кристаллов могут быть как металлы, так и диэлектрики и полупроводники. Кроме того, некоторые из них могут обладать пьезоэлектрическими и пьезоэлектрическими свойствами.

Выводы. Новые кеплеровские кристаллы могут быть использованы при создании наноэлектронных и наноэлектромеханических устройств.

Ключевые слова: 2D-кристаллы, сетки Кеплера, *ab initio* методы, термодинамическая стабильность.

R. A. Brazhe, A. I. Kochaev

2D-CRYSTALS WITH FIVE INTERATOMIC BONDS OF KEPLER NETS TYPE

Abstract.

Background. Well-known 2D-crystalline materials are graphene and graphene-like structures in the form of flat atomic grids with hexagonal cells. Meanwhile, it is only one of eleven possible flat grids consisting of regular polygons (Kepler nets). Five more of them describe the so-called supracrystals, proposed by the researchers earlier and investigated by some other authors as well. The purpose of this paper is to research a possibility of steady existence of 2D-crystalline lattices in the form of Kepler nets of types 343^24 , 3^34^2 and 3^46 (designations are given in Schläfli's symbols).

¹ Работа выполнена в рамках государственного задания Минобрнауки № 2014/232 (проект № 1742).

Materials and methods. The research objects are 2D-crystalline structures consisting of atoms of the fifth group (P, As, Sb, Bi) and the sixth group (S, Se, Te) of the periodic table. Numerical calculations of interatomic bonds length corresponding to the equilibrium state of structure were made on the basis of DFT methods using the VASP software package ver. 4.6.

Results. It is shown that among such new 2D-crystals can be metals, as well as dielectrics and semiconductors. Besides, some of them can possess pyroelectric and piezoelectric properties.

Conclusions. New Keplerian crystals can be used for nanoelectronic and nanoelectromechanical devices creation.

Key words: 2D-crystals, Kepler nets, *ab initio* simulation, energetic stability.

Введение

В семнадцатом веке знаменитый немецкий математик и астроном Иоганн Кеплер, пытавшийся объяснить все природные закономерности законами геометрии, в своей книге «Гармонии мира» [1] показал, что существует всего 12 видов плоских мозаик (сеток), состоящих из правильных многоугольников и идентичных узлов, в которых они сходятся друг с другом. Поскольку две из них энантиоморфны, то обычно во внимание принимаются лишь 11 сеток Кеплера. Они показаны на рис. 1 и обозначены ныне принятыми символами Шлефли [2]. Цифры показывают тип и количество многоугольников, сходящихся в одном узле, а верхние индексы указывают количество одинаковых многоугольников. Например, обозначение 48^2 означает, что в каждом узле сетки встречаются один квадрат (4-угольник) и два 8-угольника.

Прошло время, и в середине двадцатого столетия неожиданно выяснилось, что сетки Кеплера могут быть реализованы в 2D-наноструктурах. Так, графен, полученный А. Геймом и К. Новоселовым в 2004 г. [3], силицен [4], германен [5], двумерный нитрид бора [6] и станен [7] кристаллизуются в форме сеток с шестиугольными ячейками наподобие пчелиных сот. Возможность существования более сложных, чем графен, 2D-сеток из sp^2 -гибридизованных атомов углерода теоретически доказана в работе [8]. Это сетки 48^2 , $46\ 12$ и $3\ 12^2$, образующие структуры, состоящие из 4- и 8-угольников; 4-, 6- и 12-угольников; 3- и 12-угольников. Одна из них, сетка 48^2 , реализована в структуре октаграфена [9]. В работах [10–12] проведено математическое моделирование возможностей кристаллизации sp^3 -наноаллотропов углерода и других элементов четвертой группы таблицы Менделеева в формах сеток Кеплера типов 3636 и 3464.

Двумерные атомные структуры, в узлах кристаллической решетки которых расположены не отдельные атомы, а их симметрично организованные комплексы, мы назвали супракристаллами [10]. Название подразумевает более сложную, надкристаллическую структуру таких атомных решеток (от лат. *supra* – над). В ряде последующих работ [13–18] были представлены некоторые их физические свойства, полученные путем компьютерного моделирования и численных расчетов. К сожалению, термин «супракристаллы» не получил широкого распространения, более того, он допускает неоднозначное толкование. Поскольку все указанные атомные решетки представляют собой сетки Кеплера, возможно, следует называть такие двумерные кристаллы кеплеровскими кристаллами.

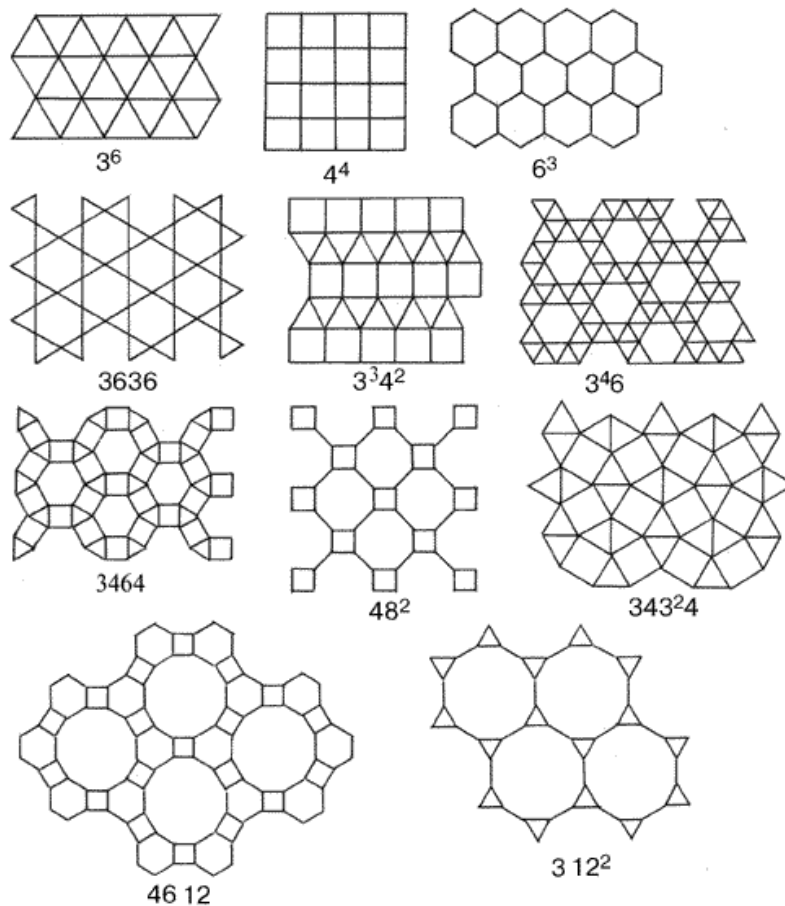


Рис. 1. Сетки Кеплера. Обозначения даны в символах Шлефли [2]

Недавно появилось сообщение о получении двумерного кристаллического фосфора, названного фосфореном [19]. Фосфорен является примером 2D-материала, состоящего из атомов пятой группы периодической системы элементов. В отличие от графена и других 2D-кристаллов, обсуждавшихся выше, в фосфорене каждый атом должен быть связан с пятью ближайшими соседними атомами посредством ковалентных связей.

В данной работе мы представляем результаты *ab initio* расчетов термодинамической устойчивости и геометрических характеристик других 2D-наноаллотропов из пятой и шестой групп периодической системы. Атомные модели этих новых 2D-кристаллов могут быть описаны в рамках сеток Кеплера типов $343^2 4$, $3^3 4^2$ и $3^4 6$, как это показано на рис. 2.

1. Возможность формирования ковалентных связей

1.1. Элементы пятой группы

В основном состоянии электронная конфигурация валентных электронов для атомов пятой группы имеет вид $ns^2 np^3$, где $n = 2$ (N), 3 (P), 4 (As), 5 (Sb), 6 (Bi). Атом азота не может находиться во внутриоболочечных возбужденных состояниях, поскольку в его валентной L -оболочке нет свободных

орбиталей. Он может образовать только три ковалентные связи и одну донорно-акцепторную связь. Даже если допустить смешивание ns и всех трех np орбиталей (sp^3 -гибридизация), пятый электрон из внешней оболочки, «прыгающий» через все гибридные орбитали, не дает возможности сформировать 2D-кристаллическую структуру. Поэтому существование 2D-кристаллов азота невозможно.

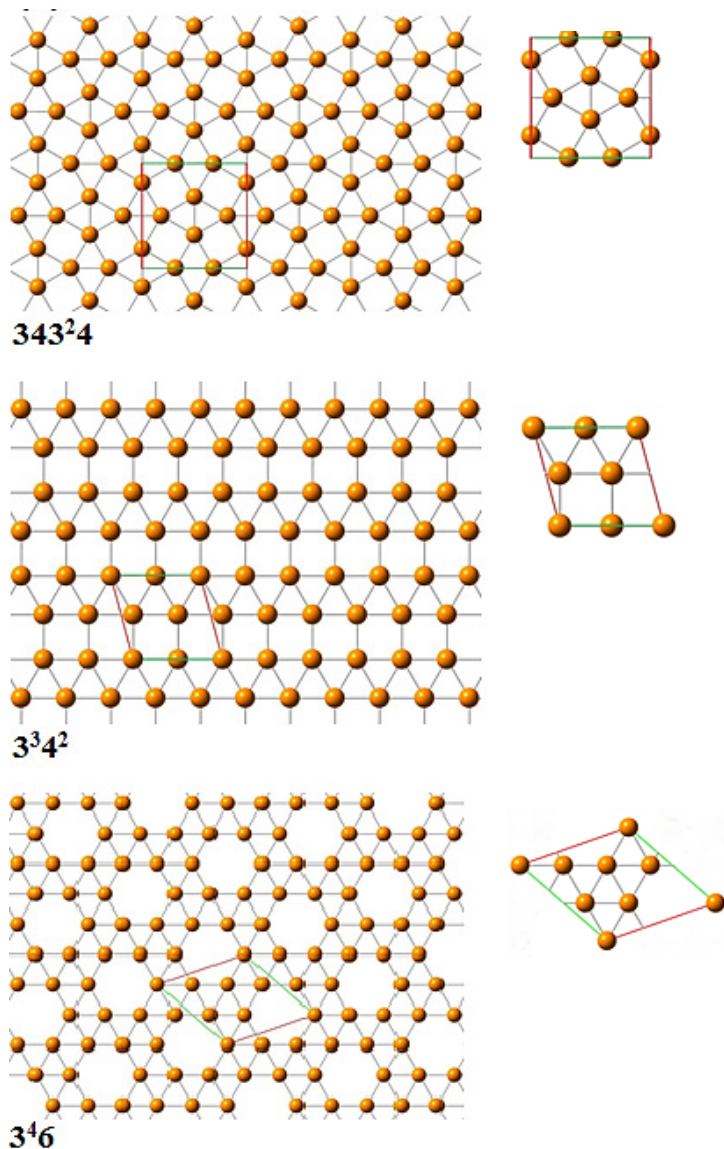


Рис. 2. Атомные модели рассматриваемых кеплеровских кристаллов (слева) и соответствующие элементарные ячейки (справа).
Обозначения даны в символах Шлефли

Все другие элементы из этой группы могут находиться в возбужденном состоянии $ns^1 np^3 nd^1$. Возникают условия для образования пяти эквивалентных гибридных орбиталей в плоскости листа и, соответственно, пяти кова-

лентных связей каждого атома с ближайшими соседними атомами. Эта ситуация отвечает sp^3d -гибридизации атомных орбиталей. Следует заметить, что в научной литературе под sp^3d -гибридизацией обычно понимают гексаэдрическую гибридную, когда имеются 3 связи в плоскости листа и 2 связи, перпендикулярных к листу. Вполне возможно, что плоская версия такой гибридной также имеет право на существование, но это может показать только эксперимент. Конечно, на возбуждение атомов требуется дополнительная энергия, но ее затраты окупаются появлением дополнительных связей между атомами. Поэтому рассматриваемые периодические 2D-структуры в форме сеток Кеплера 343^24 , 3^34^2 и 3^46 могут оказаться метастабильно устойчивыми.

1.2. Элементы шестой группы

Для этой категории атомов основным состоянием является состояние с конфигурацией валентных электронов ns^2np^4 , где $n = 2$ (O), 3 (S), 4 (Se), 5 (Te). Как и в случае азота, внутриоболочечное возбуждение атома кислорода невозможно из-за отсутствия соответствующих свободных орбиталей. Поэтому 2D-кристаллизация кислорода также невозможна.

Другие элементы шестой группы могут находиться в двух возбужденных состояниях: $ns^2np^3nd^1$ и $ns^1np^3nd^2$. В первом случае имеет место sp^3d -гибридизация. При этом гипотетически возможны две различные ситуации: 4 эквивалентные sp -орбитали располагаются в плоскости листа, а 2 свободных электрона находятся в d -орбитали, перпендикулярной к листу; 5 эквивалентных spd -орбиталей расположены в плоскости листа, а один свободный электрон находится в d -орбитали. Последняя ситуация выглядит энергетически более предпочтительной. Во втором возбужденном состоянии, не рассматривавшемся ранее, возникает sp^3d^2 -гибридизация, когда в плоскости листа могут находиться 6 эквивалентных spd -орбиталей.

В первом возбужденном состоянии атомы могут кристаллизоваться в форме сеток Кеплера 3^34^2 , 3^46 , 343^24 , а во втором – только в форме сетки 3^6 . Однако устойчивость такого возбужденного состояния, по-видимому, очень мала, так как электрон должен «перепрыгнуть» из ns -подоболочки сразу в nd -подоболочку, минуя np -подоболочку. По этой причине такая структура здесь не рассматривается.

Из рис. 2 также видно, что 2D-кристаллы типа 343^24 принадлежат к классу точечной симметрии mmm , а двух других типов – к классу 1. Элементарные ячейки этих двух типов 2D-кристаллов не имеют центра симметрии, поэтому они могут обладать пьезоэлектрическими и пьезоэлектрическими свойствами. Это очень важный и многообещающий вывод, поскольку, чтобы превратить хорошо известные графеноподобные 2D-кристаллы в пьезоэлектрические материалы, их надо «испортить» путем нарушающей центросимметричность перфорации либо допированием чужеродными атомами [20–23].

2. Используемые методы

Наши вычисления осуществлялись на основе теории функционала плотности (Density Functional Theory, DFT), реализованного в пакете Vienna Ab initio Simulation Package (VASP) в версии 4.6 [24–26]. Во всех случаях воздействие ионных ядер описывалось псевдопотенциалами Вандербилята

[27]. Обмен электронами и корреляционные эффекты описывались в рамках приближения Пердью – Бурке – Эрнзерхофа [28]. Электронные волновые функции были представлены в базисе плоских волн с энергией обрезания 500 эВ. Для генерации k -точек в зоне Бриллюэна использовался метод Монкхорста – Пака [29] с сеткой $24 \times 24 \times 1$ для всех атомов. Использовалось гауссово расширение энергетических состояний по уровню 0,01 эВ.

Все вычисления производились с использованием периодических граничных условий. Чтобы исключить взаимодействие соседних атомов в направлении, перпендикулярном к плоскости листа, использовалось значение параметра ячейки намного большее, чем возможная длина связи (22 Å). Энергия связи на один атом E_b рассчитывалась следующим образом: $E_b = (E_t - NE) / N$, где E – полная энергия изолированного атома; N – число атомов в транслируемом кластере (элементарной ячейке), а E_t – полная энергия этого кластера. За уровень нулевой энергии принималась энергия распада системы, т.е. в связанном состоянии $E < 0$, $E_t < 0$. Поскольку $|E_t| > |NE|$, то энергия связи получается отрицательной.

Применение данного метода к графену дало энергию связи равной –7,83 эВ, что хорошо согласуется с результатами, полученными другими авторами [30–32]. Это можно считать подтверждением нашего приближения.

3. Результаты

На рис. 3–5 показана зависимость энергии связи на один атом от длины связи для различных типов рассматриваемых 2D-кристаллов, образованных из элементов пятой и шестой групп периодической системы. Минимумы кривых отвечают равновесным состояниям, а соответствующие им численные значения – энергии связи. Можно заметить, что с увеличением порядкового номера атома энергия связи сначала возрастает, а затем вновь убывает. Это можно объяснить тем, что кинетическая энергия атомов пропорциональна их массе в первой степени, а скорости – во второй. Поэтому легкие атомы труднее удержать в кристаллической решетке из-за их большой кинетической энергии, а тяжелые атомы трудно остановить из-за их большой инерции. Из этих рисунков также видно, что для элементов пятой группы наиболее устойчивыми являются 2D-кристаллы, составленные из атомов фосфора, а для элементов шестой группы – из атомов серы.

Значения энергии связи и длины связи в равновесных состояниях для всех типов исследуемых 2D-кристаллов приведены в табл. 1, 2. Из них видно, что энергия связи во всех случаях не превышает (по модулю) 2,3 эВ, а длина связи находится в интервале значений 2,3–2,5 Å. Это более чем в три раза меньше энергии связи в графене, хотя и сравнимо с энергией связи в некоторых фуллеренах и фуллеренах. Например, энергия связи в фуллерене C_{20} согласно расчетам составляет 4,01 эВ [33], в тетраэдрене C_4H_4 – 3,90 эВ [34], а в кубане C_8H_8 – 4,42 эВ [35]. Это обстоятельство позволяет надеяться, что предложенные нами 2D-кристаллы могут находиться в метастабильных состояниях при комнатной температуре.

Отличительной чертой кристаллов типа 343^24 является возможность их существования в двух метастабильных формах, отличающихся длиной межатомных связей (рис. 3,а).

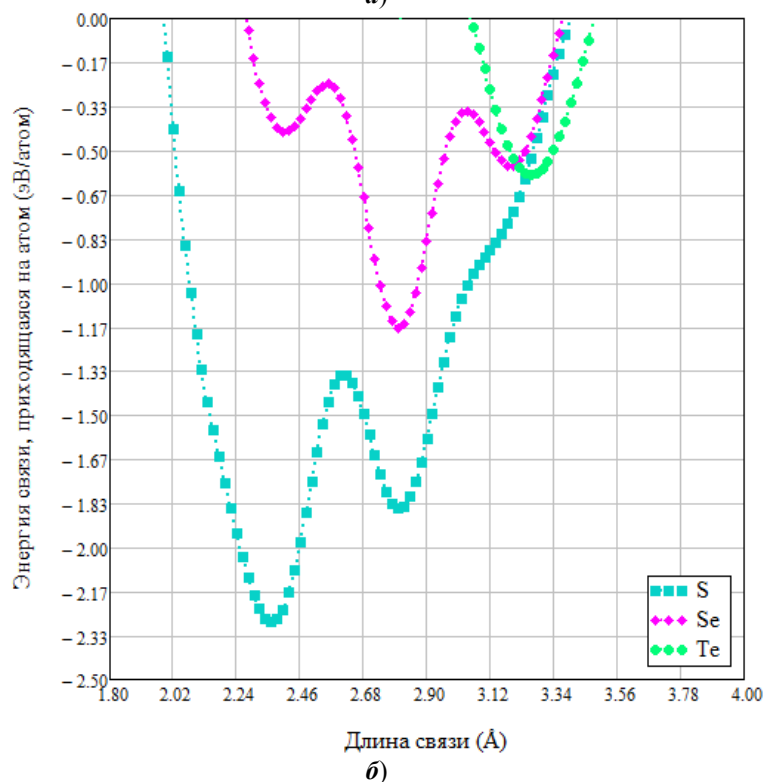
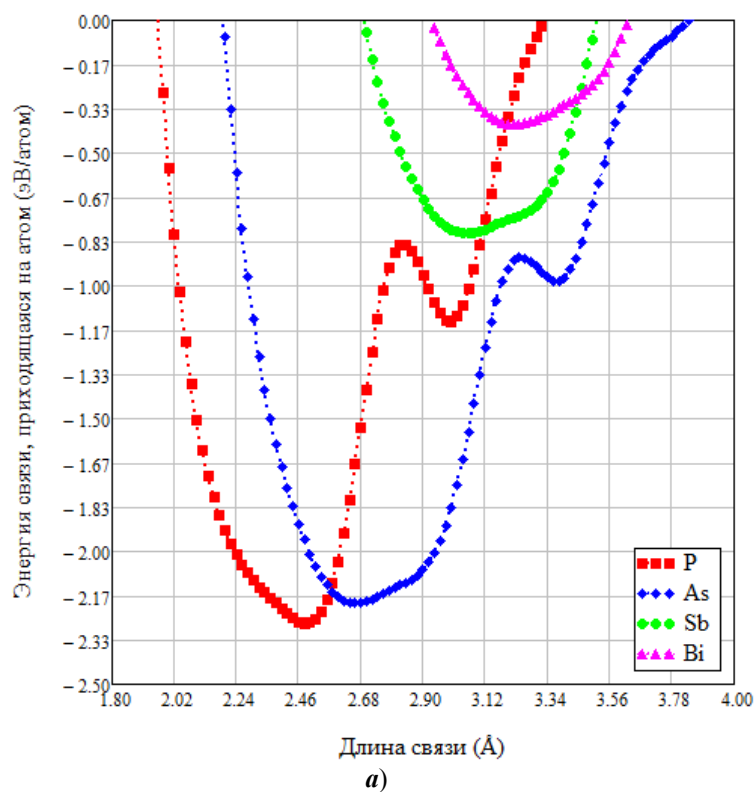


Рис. 3. Зависимость энергии связи от ее длины для 2D-кристаллов типа 343^24 в случае элементов пятой группы (а) и элементов шестой группы (б)

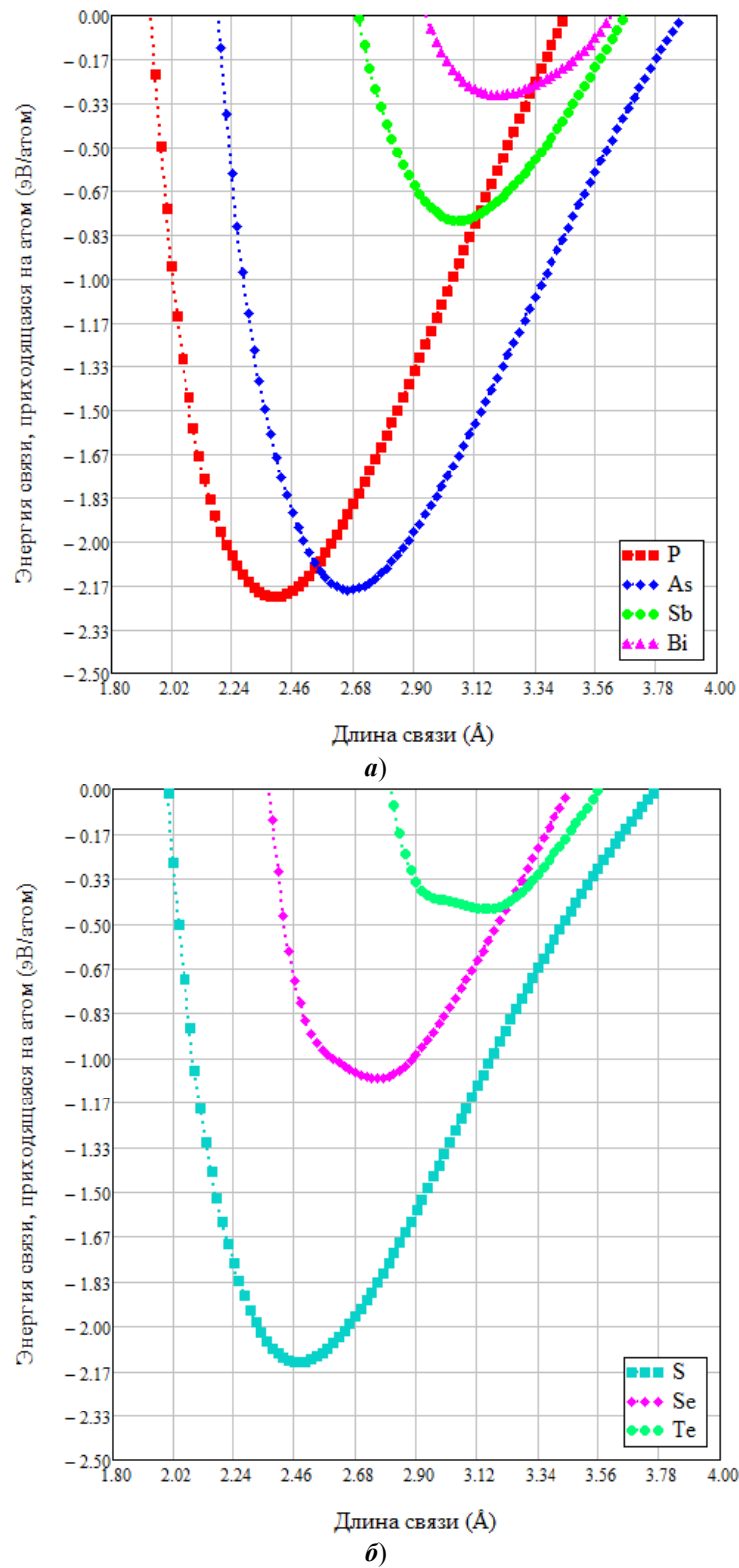


Рис. 4. Зависимость энергии связи от ее длины для 2D-кристаллов типа 3^34^2 в случае элементов пятой группы (а) и элементов шестой группы (б)

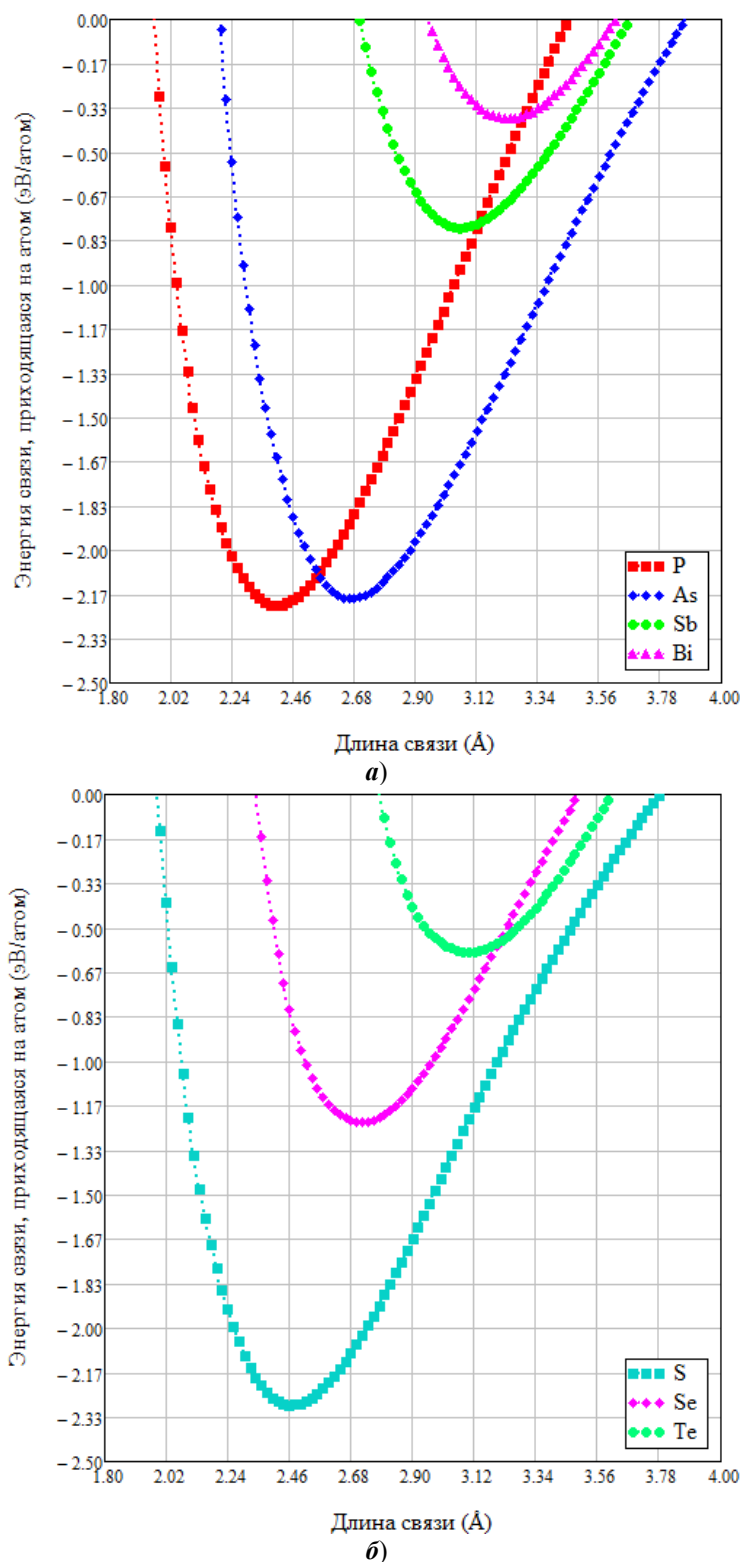


Рис. 5. Зависимость энергии связи от ее длины для 2D-кристаллов типа 3^3_6 в случае элементов пятой группы (a) и элементов шестой группы (b)

Таблица 1

Энергия связи на атом E_b (эВ/атом) и длина связи b (Å)
для различных типов 2D-кристаллов, состоящих из элементов
пятой группы периодической системы

Тип кристалла	P	As	Sb	Bi
343^24	$E_b = -2.26$ $b = 2.50$	$E_b = -2.20$ $b = 2.65$	$E_b = -0.80$ $b = 3.06$	$E_b = -0.39$ $b = 3.20$
3^34^2	$E_b = -2.24$ $b = 2.36$	$E_b = -2.20$ $b = 2.68$	$E_b = -0.76$ $b = 3.08$	$E_b = -0.38$ $b = 3.15$
3^46	$E_b = -2.22$ $b = 2.40$	$E_b = -2.19$ $b = 2.70$	$E_b = -0.78$ $b = 3.09$	$E_b = -0.27$ $b = 3.17$

Таблица 2

Энергия связи на атом E_b (эВ/атом) и длина связи b (Å)
для различных типов 2D-кристаллов, состоящих из элементов
шестой группы периодической системы

Тип кристалла	S	Se	Te
343^24	$E_b = -2.29$ $b = 2.34$	$E_b = -1.17$ $b = 2.80$	$E_b = -0.62$ $b = 3.24$
3^34^2	$E_b = -2.30$ $b = 2.44$	$E_b = -1.20$ $b = 2.76$	$E_b = -0.58$ $b = 3.10$
3^46	$E_b = -2.16$ $b = 2.48$	$E_b = -1.08$ $b = 2.80$	$E_b = -0.45$ $b = 3.10$

Мы считаем, что это вызвано существованием дополнительного типа нормальных колебаний в кристаллической решетке таких кристаллов. Действительно, кроме периодических двумерных колебаний растяжения-сжатия, здесь могут иметь место деформации, при которых основания треугольников (например, расположенные горизонтально на рис. 2) увеличиваются, а основания треугольников, расположенные вертикально, уменьшаются в размерах. Затем все происходит наоборот. Соответственно, квадраты периодически поворачиваются то в одну, то в другую сторону.

Для включения вращательных степеней свободы требуется дополнительная энергия. По этой причине соответствующий локальный минимум энергии связи поднимается и среднее расстояние между атомами увеличивается.

В случае элементов из шестой группы (рис. 3, б) в узлах решетки 343^24 могут существовать две различные ориентации спина. В первом случае p_z -электроны соседних атомов, расположенных в квадратах, имеют противоположную ориентацию своих спинов. Во втором случае направление спинов всех p_z -электронов одинаково. Первая возможность энергетически более выгодна. Поэтому минимум энергии связи в этом случае располагается ниже и даже может стать доминирующим.

Заключение

Как следует из электронной конфигурации возбужденных атомов пятой группы периодической системы химических элементов, в образованных из них кепплеровских 2D-кристаллах типов $343^2 4$, $3^3 4^2$ и $3^4 6$ нет свободных электронов. Следовательно, в зависимости от ширины запрещенной зоны они должны быть диэлектриками либо полупроводниками. Напротив, в кристаллах тех же самых типов, созданных из элементов шестой группы, имеются свободные электроны, расположенные в p_z -орбиталях, перпендикулярных к плоскости кристалла. Такие 2D-кристаллы могут быть металлами или полуметаллами. Более того, кепплеровские кристаллы типов $3^3 4^2$ и $3^4 6$ не имеют центра симметрии и, таким образом, могут обнаруживать пьезоэлектрические и пирозлектрические свойства. Если они будут синтезированы, то станут первыми естественными 2D пьезо- и пирозлектриками. Мы считаем, что рассмотренные здесь новые 2D-кристаллы типа сеток Кепплера, найдут практическое применение в наноэлектронных и наноэлектромеханических системах.

Список литературы

1. **Kepler, J.** Weltharmonik II. Buch der Weltharmonik / J. Kepler. – München, Berlin : R. Oldenbourg Verlag, 1939. – P. 63.
2. **Егоров-Тисменко, Ю. К.** Теория симметрии кристаллов / Ю. К. Егоров-Тисменко, Г. П. Литвинская. – М. : ГЕОС, 2000. – 400 с.
3. Electric field effect in atomically thin carbon film / K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zheng, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva, A. A. Firsov // Science. – 2004. – Vol. 306. – P. 666–669.
4. Graphene-like silicon nanoribbons on Ag (110): A possible formation of silicene / B. Aufray, B. Kara, S. Vizzini, H. Oughaddou, C. Leandri, B. Ealet, G. Le Lay // Appl. Phys. Lett. – 2010. – Vol. 96. – P. 183102–183103.
5. Germanene: A novel two-dimensional germanium allotrope akin to graphene and silicene / M. E. Davila, L. Xian, S. Cahangirov, O. Rubio, G. Le Lay // New J. Phys. – 2014. – Vol. 16. – P. 095002–095012.
6. **Dean, C. R.** Boron nitride substrates for high-quality graphene electronics / C. R. Dean, A. F. Young, I. Eric // Nanotech. – 2010. – Vol. 5. – P. 722–726.
7. Quantum spin Hall insulators in tin films / Y. Xu, B. Yan, H. Zhang, Y. Wang, G. Xu, P. Tang, W. Duan, S. Zhang // Phys. Rev. Lett. – 2014. – Vol. 111. – P. 136804–136807.
8. **Balaban, A. T.** Annulene, benzo-, hetero-, homo-derivatives and their valence isomers / A. T. Balaban // Comput. Mat. Appl. – 1989. – Vol. 17. – P. 397–416.
9. Octagraphene as a versatile carbon atomic sheet for novel nanotubes, unconventional fullerenes, and hydrogen storage / X. L. Sheng, H. J. Cui H, F. Ye, O. B. Yan, Q. R. Zhang, G. J. Su // J. Appl. Phys. – 2012. – Vol. 112. – P. 074315.
10. **Karenin, A.** Design and computer modeling of the supracrystals / A. Karenin // Phys.: Conf. Ser. – 2012. – Vol. 315. – P. 012025-1–012025-13.
11. **Enyashkin, A. N.** Graphene allotropes / A. N. Enyashkin, A. L. Ivanovskii // Phys. Status Solidi (b). – 2011. – Issue 8. – P. 1879–1883.
12. **Беленков, Е. А.** Классификация структурных разновидностей углерода / Е. А. Беленков, В. А. Грешняков // Физика твердого тела. – 2013. – Т. 55, Вып. 8. – С. 1640–1650.
13. **Браже, Р. А.** Упругие характеристики углеродных 2D-супракристаллов в сравнении с графеном / Р. А. Браже, А. А. Каренин, А. И. Кочаев, Р. М. Мефтахутдинов // Физика твердого тела. – 2011. – Т. 53, вып. 7. – С. 1406–1408.

14. **Kochaev, A. I.** 2D supracrystals as promising materials for planar nanoacoustoelectronics // A. I. Kochaev, A. A. Karenin, R. M. Meftakhutdinov, R. A. Brazhe // *J. Phys.: Conf. Ser.* – 2012. – Vol. 345. – P. 012007-1–012007-9.
15. **Браже, Р. А.** Изгибные волны в графене и 2D-супракристаллах / Р. А. Браже, А. И. Кочаев // *Физика твердого тела.* – 2012. – Т. 54, вып. 8. – С. 1512–1514.
16. **Браже, Р. А.** Модуль Юнга и коэффициент Пуассона планарных и нанотубулярных супракристаллических структур / Р. А. Браже, А. И. Кочаев, В. С. Нефедов // *Физика твердого тела.* – 2012. – Т. 54, вып. 7. – С. 1347–1349.
17. **Браже, Р. А.** Теплопроводность углеродных супракристаллических нанотрубок / Р. А. Браже, В. С. Нефедов // *Физика твердого тела.* – 2012. – Т. 54, вып. 7. – С. 1435–1438.
18. **Браже, Р. А.** Теплопроводность планарных и нанотубулярных супракристаллических структур при температурах ниже температуры Дебая / Р. А. Браже, В. С. Нефедов // *Физика твердого тела.* – 2014. – Т. 56, вып. 3. – С. 602–606.
19. Isolation and characterization of few-layer black phosphorus / A. Castellanos-Gomez, L. Vicarelli, E. Prada, J. O. Island, K. L. Narasimha-Acharaya, S. I. Blanter, D. I. Groenendijk, M. Buscema, G. A. Steele, J. Alvarez, Z. W. Zandbergen, J. J. Palacios, H. Z. van der Zant // *J. 2D Materials.* – 2014. – Vol. 1. – P. 025001-1–025001-19.
20. **Chandratre, S.** Coaxing grapheme to be piezoelectric / S. Chandratre, P. Sharma // *Appl. Phys. Lett.* – 2012. – Vol. 100. – P. 023144-1–023144-3.
21. **Ong, M. T.** Engineered piezoelectricity in grapheme / M. T. Ong, E. T. Reed // *ACS Nano.* – 2012. – Vol. 6. – P. 1387–1394.
22. **Браже, Р. А.** Пьезоэффект в графеноподобных 2D-супракристаллах с нарушающей центросимметричность периодической перфорацией / Р. А. Браже, А. И. Кочаев, А. А. Советкин // *Физика твердого тела.* – 2013. – Т. 55, вып. 9. – С. 1809–1912.
23. **Браже, Р. А.** Пьезоэффект во фторографеноподобных 2D-супракристаллах / Р. А. Браже, А. И. Кочаев, А. А. Советкин // *Физика твердого тела.* – 2013. – Т. 55, вып. 10. – С. 1979–1981.
24. **Kresse, G.** Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set / G. Kresse, J. Furthmüller // *Phys. Rev. B.* – 1996. – Vol. 54. – P. 11169–11186.
25. **Kresse, G.** Efficiency of ab-initio total energy calculations for metals and semiconductors using a plane-wave basis set / G. Kresse, J. Furthmüller // *Comput. Mat. Sci.* – 1996. – Vol. 6. – P. 15–50.
26. **Kresse, G.** VASP. The Guide (University of Vienna, 2009) / G. Kresse, J. Furthmüller. – URL: <http://cms.mpi.univie.ac.at/vasp/>.
27. **Vanderbilt, D.** Soft self-consistent pseudopotentials in a generalized eigenvalue formalism / D. Vanderbilt // *Phys. Rev. B.* – 1990. – Vol. 41. – P. 7892–7895.
28. **Perdew, J. P.** Generalized gradient approximation made simple / J. P. Perdew, K. Burke, M. Ernserhof // *Phys. Rev. Lett.* – 1996. – Vol. 77. – P. 3865–3868.
29. **Monkhorst, H. T.** Special points for Brillouin-zone integrations / H. T. Monkhorst, J. D. Pack // *Phys. Rev. B.* – 1976. – Vol. 13. – P. 5188–5192.
30. **Koskinen, P.** Self-passivating edge reconstructions of grapheme / P. Koskinen, S. Malola, H. Häkkinen // *Phys. Rev. Lett.* – 2008. – Vol. 101. – P. 115502-1–115502-4.
31. **Dunlap, B. I.** Local-density-functional study of the fullerenes, graphene and graphite / B. I. Dunlap, J. C. Boettger // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* – 1996. – Vol. 29. – P. 4907–4913.
32. Hydrogen adsorption on grapheme: A first principle study / V. V. Ivanovskaya, A. Zobel, D. Teilet-Billy, N. Rougeau, V. Didis, P. R. Briddon // *Eur. Phys. J. B.* – 2010. – Vol. 76. – P. 481–486.

33. **Grossman, J. C.** Structure and stability of molecular carbon: Importance of electron correlation / J. C. Grossman, L. Mitas, K. Raghavachari // *Appl. Phys. Lett.* – 1995. – Vol. 75. – P. 3870–3873.
34. **Maslov, M. M.** On the thermal stability of tetrahedrane: Tight-binding molecular dynamics study / M. M. Maslov, K. R. Katin // *Chem. Phys.* – 2011. – Vol. 386. – P. 66–68.
35. **Маслов, М. М.** Термическая устойчивость кубана C_8H_8 / М. М. Маслов, Д. А. Лобанов, А. И. Подливаев, Л. А. Опенов // *Физика твердого тела.* – 2009. – Т. 51, Вып. 3. – С. 609–612.

References

1. Kepler J. *Weltharmonik II. Buch der Weltharmonik* [World harmony II. The book of world harmony]. München, Berlin: R. Oldenbourg Verlag, 1939, p. 63.
2. Egorov-Tismenko Yu. K., Litvinskaya G. P. *Teoriya simmetrii kristallov* [Theory of crystal simmetry]. Moscow: GEOS, 2000, 400 p.
3. Novoselov K. S., Geim A. K., Morozov S. V., Jiang D., Zheng Y., Dubonos S. V., Grigorieva I. V., Firsov A. A. *Science*. 2004, vol. 306, pp. 666–669.
4. Aufray B., Kara B., Vizzini S., Oughaddou H., Leandri C., Ealet B., G. Le Lay *Appl. Phys. Lett.* 2010, vol. 96, pp. 183102–183103.
5. Davila M. E., Xian L., Cahangirov S., Rubio O., G. Le Lay *New J. Phys.* 2014, vol. 16, pp. 095002–095012.
6. Dean C. R., Young A. F., Eric I. *Nanotech.* 2010, vol. 5, pp. 722–726.
7. Xu Y., Yan B., Zhang H., Wang Y., Xu G., Tang P., Duan W., Zhang S. *Phys. Rev. Lett.* 2014, vol. 111, pp. 136804–136807.
8. Balaban A. T. *Comput. Mat. Appl.* 1989, vol. 17, pp. 397–416.
9. Sheng X. L., Cui H. J., Ye F., Yan O. B., Zhang Q. R., Su G. J. *J. Appl. Phys.* 2012, vol. 112, p. 074315.
10. Karenin A. *Phys.: Conf. Ser.* 2012, vol. 315, pp. 012025-1–012025-13.
11. Enyashkin A. N., Ivanovskii A. L. *Phys. Status Solidi (b)*. 2011, iss. 8, pp. 1879–1883.
12. Belenkov E. A., Greshnyakov V. A. *Fizika tverdogo tela* [Solid state physics]. 2013, vol. 55, iss. 8, pp. 1640–1650.
13. Brazhe R. A., Karenin A. A., Kochaev A. I., Meftakhutdinov R. M. *Fizika tverdogo tela* [Solid state physics]. 2011, vol. 53, iss. 7, pp. 1406–1408.
14. Kochaev A. I., Karenin A. A., Meftakhutdinov R. M., Brazhe R. A. *J. Phys.: Conf. Ser.* 2012, vol. 345, pp. 012007-1–012007-9.
15. Brazhe R. A., Kochaev A. I. *Fizika tverdogo tela* [Solid state physics]. 2012, vol. 54, iss. 8, pp. 1512–1514.
16. Brazhe R. A., Kochaev A. I., Nefedov V. S. *Fizika tverdogo tela* [Solid state physics]. 2012, vol. 54, iss. 7, pp. 1347–1349.
17. Brazhe R. A., Nefedov V. S. *Fizika tverdogo tela* [Solid state physics]. 2012, vol. 54, iss. 7, pp. 1435–1438.
18. Brazhe R. A., Nefedov V. S. *Fizika tverdogo tela* [Solid state physics]. 2014, vol. 56, iss. 3, pp. 602–606.
19. Castellanos-Gomez A., Vicarelli L., Prada E., Island J. O., Narasimha-Acharaya K. L., Blanter S. I., Groenendijk D. I., Buscema M., Steele G. A., Alvarez J., Zandbergen Z. W., Palacios J. J., Van der Zant H. Z. *J. 2D Materials*. 2014, vol. 1, pp. 025001-1–025001-19.
20. Chandratre S., Sharma P. *Appl. Phys. Lett.* 2012, vol. 100, pp. 023144-1–023144-3.
21. Ong M. T., Reed E. T. *ACS Nano*. 2012, vol. 6, pp. 1387–1394.
22. Brazhe R. A., Kochaev A. I., Sovetkin A. A. *Fizika tverdogo tela* [Solid state physics]. 2013, vol. 55, iss. 9, pp. 1809–1912.
23. Brazhe R. A., Kochaev A. I., Sovetkin A. A. *Fizika tverdogo tela* [Solid state physics]. 2013, vol. 55, iss. 10, pp. 1979–1981.

24. Kresse G., Furthmüller J. *Phys. Rev. B*. 1996, vol. 54, pp. 11169–11186.
 25. Kresse G., Furthmüller J. *Comput. Mat. Sci.* 1996, vol. 6, pp. 15–50.
 26. Kresse G., Furthmüller J. *VASP. The Guide (University of Vienna, 2009)*. Available at: <http://cms.mpi.univie.ac.at/vasp/>.
 27. Vanderbilt D. *Phys. Rev. B*. 1990, vol. 41, pp. 7892–7895.
 28. Perdew J. P., Burke K., Ernserhof M. *Phys. Rev. Lett.* 1996, vol. 77, pp. 3865–3868.
 29. Monkhorst H. T., Pack J. D. *Phys. Rev. B*. 1976, vol. 13, pp. 5188–5192.
 30. Koskinen P., Malola S., Häkkinen H. *Phys. Rev. Lett.* 2008, vol. 101, pp. 115502-1–115502-4.
 31. Dunlap B. I., Boettger J. C. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 1996, vol. 29, pp. 4907–4913.
 32. Ivanovskaya V. V., Zobel A., Teilet-Billy D., Rougeau N., Didis V., Briddon P. R. *Eur. Phys. J. B*. 2010, vol. 76, pp. 481–486.
 33. Grossman J. C., Mitas L., Raghavachari K. *Appl. Phys. Lett.* 1995, vol. 75, pp. 3870–3873.
 34. Maslov M. M., Katin K. R. *Chem. Phys.* 2011, vol. 386, pp. 66–68.
 35. Maslov M. M., Lobanov D. A., Podlivaev A. I., Openov L. A. *Fizika tverdogo tela [Solid state physics]*. 2009, vol. 51, iss. 3, pp. 609–612.
-

Браже Рудольф Александрович

доктор физико-математических наук,
профессор, заведующий кафедрой
физики, Ульяновский государственный
технический университет (Россия,
г. Ульяновск, ул. Северный Венец, 32)

E-mail: brazhe@ulstu.ru

Brazhe Rudol'f Aleksandrovich

Doctor of physical and mathematical
sciences, professor, head of sub-department
of physics, Ulyanovsk State Technical
University (32 Severny Venets street,
Ulyanovsk, Russia)

Кочаев Алексей Иванович

кандидат физико-математических наук,
доцент, кафедра физики, Ульяновский
государственный технический
университет (Россия, г. Ульяновск,
ул. Северный Венец, 32)

E-mail: a.kochaev@gmail.com

Kochaev Aleksey Ivanovich

Candidate of physical and mathematical
sciences, associate professor,
sub-department of physics, Ulyanovsk
State Technical University (32 Severny
Venets street, Ulyanovsk, Russia)

УДК 539.23:548.12

Браже, Р. А.

2D-кристаллы с пятью межатомными связями типа сеток Кеплера /

Р. А. Браже, А. И. Кочаев // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико-математические науки. – 2016. – № 1 (37). – С. 87–100.