

# Аллотропы углерода как «тестовая площадка» для структурно-свойственной зависимости

А.А. Бокарев

Самарский университет, Самара, Россия

**Обоснование.** Углерод является одним из самых важных и универсальных химических элементов. Он является основой жизни на Земле и используется в разнообразных приложениях: от лекарств до смазочных материалов и аккумуляторов. Универсальность углерода обусловлена его способностью формировать химические связи почти со всеми элементами и в различных сочетаниях [1]. Благодаря этому в последние десятилетия было предложено свыше 1500 гипотетических углеродных структур — аллотропов. Большое количество аллотропных форм углерода и их относительная простота делает их привлекательным вариантом для исследования зависимости между структурой и свойствами твердых тел.

**Цель** — определить зависимости между структурными параметрами и механическими свойствами аллотропов углерода.

**Методы.** Структура и свойства аллотропов углерода, вычисленные методом теории функционала плотности, взяты из базы данных Samara Carbon Allotrope Database (SACADA) [2]. Для анализа использовалось около 1600 данных для отдельных аллотропов. Для обработки данных были использованы такие инструменты, как языки программирования Bash и Python, а также библиотеки языка программирования Python SciPy [3], pandas [4], NumPy [5] и Matplotlib [6]. Bash был использован для извлечения данных, Matplotlib был использован для визуализации данных, pandas использован для структуризации и обработки данных, NumPy и SciPy использован для определения корреляций и аппроксимации кривых. Кривые были аппроксимированы на степенную функцию, так как она дает наибольшую сходимость с исходными данными.

**Результаты.** В результате работы определены зависимости объемного модуля упругости, модуля сдвига, твердости, независимых элементов матрицы упругих постоянных  $C^{12}$ ,  $C^{44}$  от плотности. А также были уточнены зависимости, найденные ранее в работе [7]. Эти зависимости представлены в рис. 1–3.

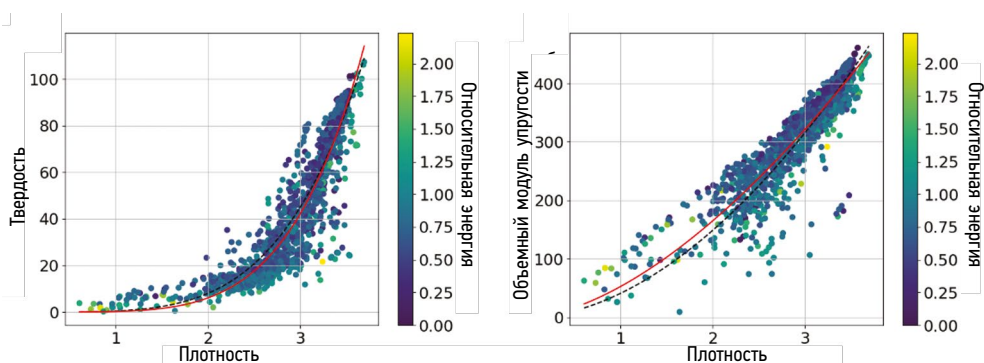


Рис. 1. а — зависимость  $H = 0,22\rho^{4,25}$ ,  $R^2 = 0,865$ ; б — зависимость  $V = 52,93\rho^{1,64}$ ,  $R^2 = 0,846$

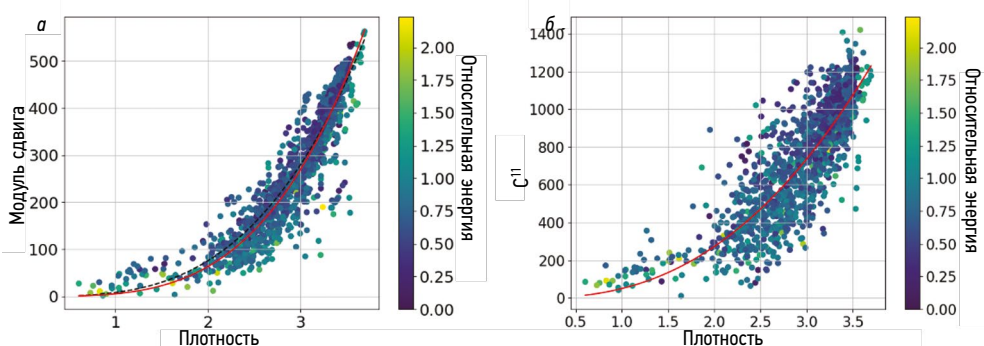


Рис. 2. а — зависимость  $G = 5,31\rho^{3,57}$ ,  $R^2 = 0,882$ ; б — зависимость  $C^{11} = 49,71\rho^{2,45}$ ,  $R^2 = 0,726$

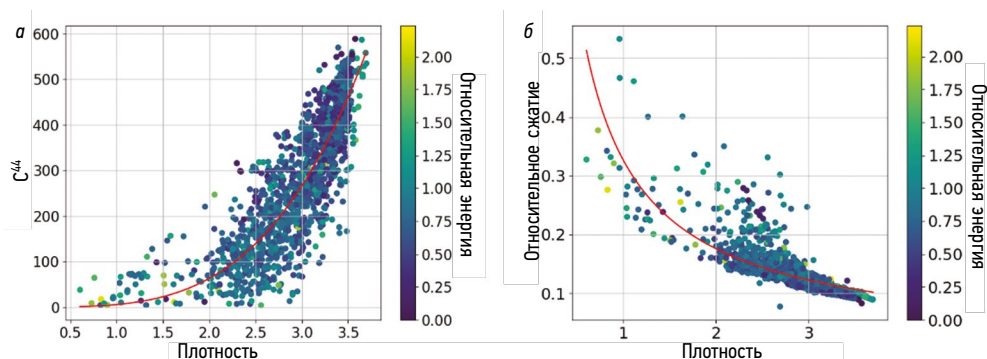


Рис. 3. а — зависимость  $C^{44} = 5,32\rho^{3,56}$ ,  $R^2 = 0,758$ ; б — зависимость  $\beta = 0,33\rho^{-0,89}$ ,  $R^2 = 0,647$

Красной линией помечены найденные зависимости, пунктирной линией отмечены зависимости из литературных данных. Также цветом отмечена относительная энергия структуры от энергии алмаза.

**Выводы.** В результате данной работы были уточнены следующие зависимости:  $V(\rho)$ ,  $G(\rho)$ ,  $H(\rho)$ . Были найдены новые зависимости:  $C^{11}(\rho)$ ,  $C^{44}(\rho)$ ,  $\beta(\rho)$ . На основе найденных зависимостей будет создан инструмент для прогнозирования свойств аллотропов углерода.

**Ключевые слова:** аллотропы углерода; анализ данных; механические свойства материалов; теоретическое материаловедение; углеродные наноматериалы.

## Список литературы

1. Hirsch A. The era of carbon allotropes // Nat Mater. 2010. Vol. 9, N 11. P. 868–871. doi: 10.1038/nmat2885
2. Hoffmann R., Kabanov A.A., Golov A.A., Proserpio D.M. Homo citans and carbon allotropes: for an ethics of citation // Angew Chem Int Ed. 2016. Vol. 55, N 37. P. 10962–10976. doi: 10.1002/anie.201600655
3. Virtanen P., Gommers R., Oliphant T.E., et al. SciPy 1.0: fundamental algorithms for scientific computing in Python // Nat Methods. 2020. Vol. 17, N 3. P. 261–272. doi: 10.1038/s41592-019-0686-2
4. McKinney W. pandas: a foundational Python library for data analysis and statistics. In: Python for high performance and scientific computing. 2011. Vol. 14, N 9. P. 1–9.
5. Harris C.R., Millman J.K., van der Walt S.J., et al. Array programming with NumPy // Nature. 2020. Vol. 585, N 7825. P. 357–362. doi: 10.1038/s41586-020-2649-2
6. Hunter J.D. Matplotlib: A 2D graphics environment // Comput Sci Eng. 2007. Vol. 9, N 3. P. 90–95. doi: 10.1109/MCSE.2007.55
7. Kabanov A.A., Bukhteeva E.O., Blatov V.A. A topological approach to reconstructive solid-state transformations and its application for generation of new carbon allotropes // Acta Crystallog B Struc Sci Cryst Eng Mater. 2023. Vol. 79, N 3. P. 198–206. doi: 10.1107/S205252062300255X

*Сведения об авторе:*

**Артем Александрович Бокарев** — студент, группа 4301-030302D, Естественнонаучный институт; Самарский университет, Самара, Россия. E-mail: artemabokarev@gmail.com

*Сведения о научном руководителе:*

**Артем Анатольевич Кабанов** — кандидат физико-математических наук, доцент; Самарский государственный технический университет, Самара, Россия. E-mail: artkabanov@mail.ru