

## Investigating of the stability and structural, mechanical and electronic properties of two new superhard conductive carbon structures

S. Ghorbanali<sup>1\*</sup>, E. Zaminpayma<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Department of Physics, Tafresh University, Tafresh, Iran

<sup>2</sup> Department of Physics, Qazvin Branch, Islamic Azad University, Qazvin, Iran

**ABSTRACT:** In this research, two new superhard metallic carbon allotropes  $\alpha\text{C}_{28}$  and  $\beta\text{C}_{32}$  are predicted using density functional theory (DFT). These stable tetragonal structures belong to the P4/MMM space group. Molecular dynamics simulation performed under canonical ensemble (NVT) to investigate the thermal stability of new  $\alpha\text{C}_{28}$  and  $\beta\text{C}_{32}$  carbon crystals at temperatures of 300 and 1000 K, confirms their thermal stability. In addition, we calculated the mechanical coefficients and band gap energy of these two structures to examine their mechanical and electronic stability. These new carbon allotropes are composed of sp<sup>2</sup> and sp<sup>3</sup> bond hybridization, which shows excellent mechanical properties with Vickers hardness of 45.7 and 47.9 GPa. Other mechanical properties of these crystals such as bulk modulus (265.8, 284.9), shear modulus (254.7, 273.5), and Young's modulus (579.1, 621.6) also confirm the superhardness of these structures. The results related to the electronic band structures indicate that both structures have metallic properties. The width of both conduction and valance bands for both structures is about 20 eV. The results of calculations show that  $\alpha\text{C}_{28}$  and  $\beta\text{C}_{32}$  can be synthesized in the laboratory in the future and will have potential applications in mechanical and electronic devices.

### Review History:

Received: may, 25, 2023

Revised: Jan. 09, 2024

Accepted: Jan. 13, 2024

Available Online: Jan. 23, 2024

### Keywords:

New carbon structures  
superhard materials  
thermodynamic stability  
elastic constants  
electronic properties

### 1- Introduction

Carbon, as one of the most important elements of superhard materials, has a valence electron structure of  $2s^22p^2$ , which can create new allotropes with different properties with sp, sp<sup>2</sup> and sp<sup>3</sup> hybrid bonds. Among them, the most famous and widely used superhard material is diamond, due to its scarcity in the world and complicated conditions for laboratory synthesis, the search for new superhard materials has attracted the attention of many researchers[1, 2]. In this study, we proposed two new superhard tetragonal carbon structures named  $\alpha\text{C}_{28}$  and  $\beta\text{C}_{32}$ , whose electronic and mechanical properties were investigated through density functional theory (DFT). With many searches in SACADA[3], and RCSR[4] carbon databases and articles in this field, the originality of these two structures was confirmed for the authors. The structural, electronic, and elastic properties along with elastic anisotropy properties, and thermal, dynamic, and mechanical stability of these structures have been investigated in this research work.

### 2- Methodology

In recent years, DFT has been used as an important theoretical tool to predict the physical properties of various new crystals[5]. Here, the calculations were performed using the fixed core PAW method with the help of the SIESTA simulation code, in which the within the general gradient

approximation (GGA) with the correlation function of the PBE code was used to parameterize the potential exchange-correlation[6].

### 3- Results and Discussion

The investigated crystals consist of four, five, and eight-sided irregular carbon rings, whose network parameters at ambient pressure are shown in Table 1.

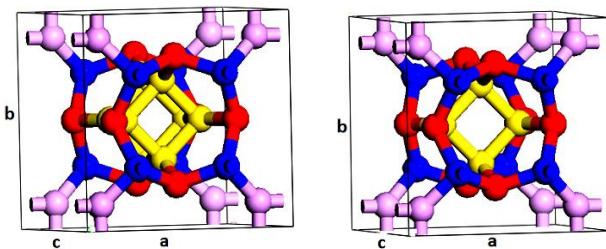
**Table 1. Crystallographic data for  $\alpha\text{C}_{28}$  and  $\beta\text{C}_{32}$ .**

	Diamond	$\alpha\text{C}_{28}$	$\beta\text{C}_{32}$
Space group	Fd-3M(227)	P4/MMM	P4/MMM
C <sub>1</sub> -C <sub>1</sub>	1.44	1.44	1.46
C <sub>1</sub> -C <sub>2</sub>	-	1.48	1.49
C <sub>2</sub> -C <sub>3</sub>	-	1.52	1.50
C <sub>3</sub> -C <sub>3</sub>	-	1.56	1.54
C <sub>3</sub> -C <sub>4</sub>	-	1.53	1.55
C <sub>4</sub> -C <sub>4</sub>	-	1.50	1.52
a, b	3.57	6.08	6.09
c	-	5.68	7.19
$\rho$	5.68	7.499	8.345
V	3.517	2.658	2.392

\*Corresponding author's email: s.ghorbanali@tafreshu.ac.ir



Copyrights for this article are retained by the author(s) with publishing rights granted to Amirkabir University Press. The content of this article is subject to the terms and conditions of the Creative Commons Attribution 4.0 International (CC-BY-NC 4.0) License. For more information, please visit <https://www.creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/legalcode>.

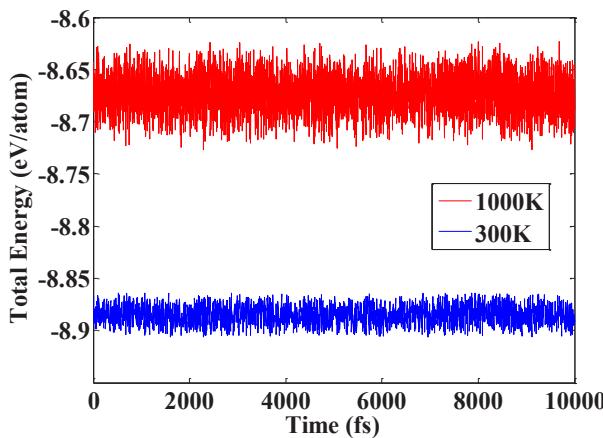


**Fig. 1. Crystal structure of  $\alpha\text{C}_{28}$  and  $\beta\text{C}_{32}$ .**

The proposed  $\alpha\text{C}_{28}$  and  $\beta\text{C}_{32}$  superhard carbon structures have tetragonal symmetry and P4/MMM group, which are shown in Fig.1. These structures consist of four types of non-equivalent carbon atoms, which are marked with different colors in the figure.

To investigate the thermal stability of  $\alpha\text{C}_{28}$  and  $\beta\text{C}_{32}$  carbon crystals at temperatures above zero such as 300 and 1000 K, molecular dynamics simulation was performed under canonical ensemble (NVT).

In Fig. 2 and Fig. 3, throughout the simulation, the total energy fluctuates around a constant value at 300 K and 1000 K, so these new crystalline phases have good thermal stability in the mentioned temperature range. To determine the mechanical stability, the values of independent elastic constants  $C_{11}$ ,  $C_{12}$ ,  $C_{13}$ ,  $C_{33}$ ,  $C_{44}$ , and  $C_{66}$  related to carbon crystals  $\alpha\text{C}_{28}$  and  $\beta\text{C}_{32}$  are calculated and the results are listed in Table (2). The elastic constant components  $\alpha\text{C}_{28}$  and  $\beta\text{C}_{32}$  are consistent with the mentioned Born equations (Eq. 1), which can be concluded that the predicted structures are mechanically stable at ambient pressure.



**Fig. 2. Total energy fluctuations versus time for  $\alpha\text{C}_{32}$**

**Table 2. Calculated elastic constants, elastic modulus (GPa), and hardness (GPa) of  $\alpha\text{C}_{28}$  and  $\beta\text{C}_{32}$ .**

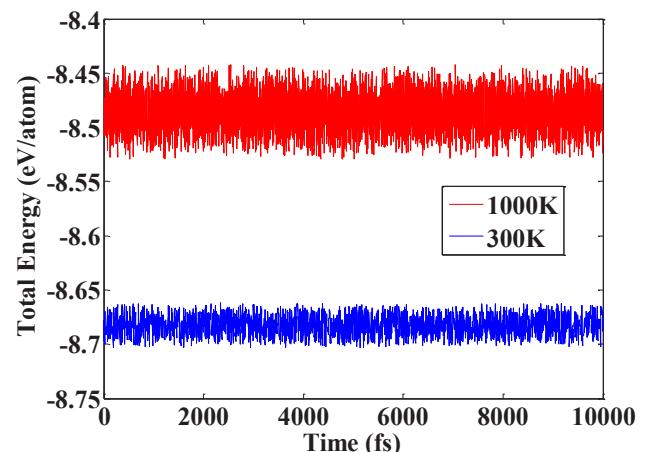
	diamond	$\alpha\text{C}_{28}$	$\beta\text{C}_{32}$
$C_{11}$	1056.2	672	697
$C_{33}$	-	535	627
$C_{44}$	566.7	281	286
$C_{66}$	-	193	223
$C_{12}$	120.1	162	125
$C_{13}$	-	56	75
B	431	265.8	284.9
G	522	254.7	273.5
E	1116	579.1	621.6
v	0.07	0.136	0.135
B/G	0.825	1.044	1.042
H <sub>v</sub>	89	45.7	47.9

$$C_{44} \rangle 0, C_{66} \rangle 0, C_{11} \rangle C_{12} \\ 2C_{13}^2 \rangle C_{33} (C_{11} + C_{12}) \quad (1)$$

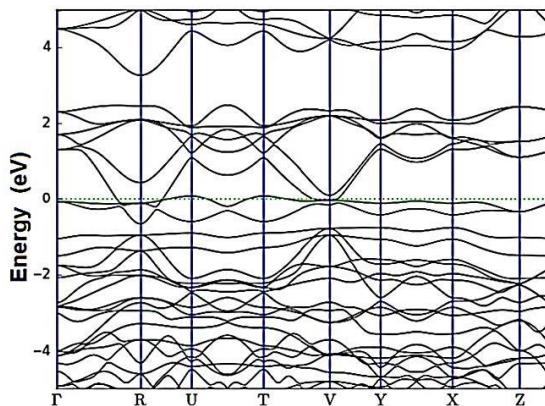
To check the electrical properties, the band structure of these crystals was calculated at the symmetrical points shown in Fig. 4 and Fig. 5 (the Fermi level is at zero).

As can be seen in the figure, both structures are these new carbon allotropes are metallic and there is no energy gap between valence and conduction bands.

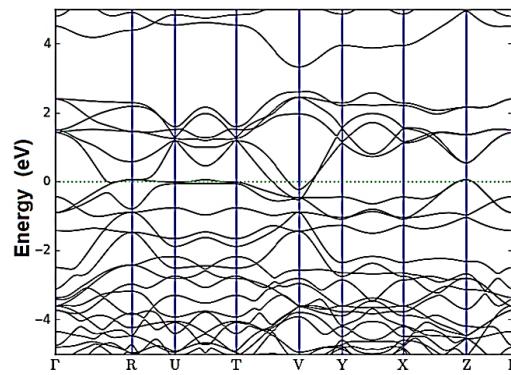
In the end, to ensure the establishment of bonds and the formation of hybridization between carbon atoms, the density of electrons in the inner space of the unit cell was investigated and calculated, and the results of the calculations are shown



**Fig. 3. Total energy fluctuations versus time for  $\alpha\text{C}_{28}$**



**Fig. 4. Total energy fluctuations versus time for  $\alpha\text{C}_{28}$**



**Fig. 5. Electronic band structure for  $\alpha\text{C}_{28}$**

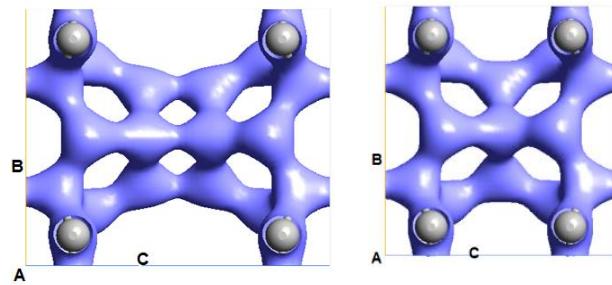
in Fig. 6. As the figure shows, the corresponding bonds are formed and the electrons are spread around the atomic bonds.

#### 4- Conclusions

In this study, based on DFT method, two new superhard carbon structures that have metallic properties were predicted. It was found that the structures of  $\alpha\text{C}_{28}$  and  $\beta\text{C}_{32}$  are mechanically and thermodynamically stable, which was done by elastic constants and checking the energy calculation, respectively.

#### References

- [1] M. Xing, X. Li, An orthorhombic carbon allotrope with a quasi-direct band gap and superhard, Diamond and Related Materials, 131 (2023) 109592.
- [2] Q. Fan, C. Li, R. Yang, X. Yu, S. Yun, A larger-cell tetragonal carbon allotrope tP176 carbon with superhardness, Materials Letters, 326 (2022) 132925.
- [3] R. Hoffmann, A.A. Kabanov, A.A. Golov, D.M. Proserpio, Homo citans and carbon allotropes: For an ethics of citation, Angewandte Chemie International Edition, 55(37) (2016) 10962-10976.
- [4] M. O'Keeffe, M.A. Peskov, S.J. Ramsden, O.M. Yaghi, The reticular chemistry structure resource (RCSR)



**Fig. 6. Electron charge density of  $\alpha\text{C}28$  and  $\beta\text{C}_{32}$ .**

database of, and symbols for, crystal nets, Accounts of chemical research, 41(12) (2008) 1782-1789.

- [5] W. Kohn, L.J. Sham, Statistical Mechanics of an Assembly of Quasiparticles, Phys. Rev, 140(4) (1965) A1133.
- [6] J.P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof, Generalized gradient approximation made simple, Physical review letters, 77(18) (1996) 3865.

#### HOW TO CITE THIS ARTICLE

S. Ghorbanali, E. Zaminpayma, Investigating of the stability and structural, mechanical and electronic properties of two new superhard conductive carbon structures, Amirkabir J. Mech Eng., 55(10) (2024) 253-256.

DOI: [10.22060/mej.2024.22431.7617](https://doi.org/10.22060/mej.2024.22431.7617)







## بررسی پایداری و خواص ساختاری، مکانیکی و الکترونیکی دو ساختار رسانای جدید کربنی فوق سخت

سعید قربانعلی<sup>۱\*</sup>، اسماعیل زمین‌پیما<sup>۲</sup>

۱- گروه فیزیک، دانشگاه تفرش، تفرش، ایران  
۲- گروه فیزیک، دانشگاه آزاد اسلامی، واحد قزوین، قزوین، ایران.

### تاریخچه داوری:

دریافت: ۱۴۰۲/۰۳/۰۵

بازنگری: ۱۴۰۲/۱۰/۱۹

پذیرش: ۱۴۰۲/۱۰/۲۳

ارائه آنلاین: ۱۴۰۲/۱۱/۰۳

### کلمات کلیدی:

ساختارهای کربنی جدید

مواد فوق سخت

پایداری حرارتی

ضرایب الاستیک

خواص الکترونیکی

**خلاصه:** در این تحقیق، دو آلوتروپ کربن فوق سخت رسانای جدید  $\alpha$ C28 و  $\beta$ C32 با استفاده از نظریه تابعی چگالی پیش‌بینی می‌شود. این ساختارهای چهار ضلعی پایدار متعلق به گروه فضایی  $MM\bar{M}/P4$  هستند. شبیه‌سازی دینامیک مولکولی انجام گرفته تحت آسامبل کانونیک به منظور بررسی پایداری حرارتی کریستال‌های کربنی جدید  $\alpha$ C28 و  $\beta$ C32 در دماهای ۳۰۰ و ۱۰۰۰ کلوین، پایداری حرارتی آنها را تایید می‌کند. به منظور بررسی پایداری مکانیکی و الکترونیکی این دو ساختار، ضرایب مکانیکی و نوارهای انرژی آنها محاسبه گردید. این آلوتروپ‌های کربن جدید از هیبریداسیون پیوندی  $sp^2$  و  $sp^3$  تشکیل شده است که نشان‌دهنده خواص مکانیکی عالی با سختی ویکرز  $45/7$  و  $47/9$  گیگا پاسکال است. از دیگر خواص مکانیکی این کریستال‌ها می‌توان به مدول حجمی ( $265/8$ ،  $284/9$ ،  $265/8$ )، مدول برشی ( $273/5$ ،  $254/7$ ) و مدول یانگ ( $621/6$ ،  $579/1$ ) اشاره نمود که تاییدی بر فوق سخت بودن این ساختارها دارد. نتایج مربوط به ساختار نوارهای الکترونیکی نشان می‌دهد که هر دو ساختار دارای خواص رسانایی می‌باشد. پهنه‌ای هر دو نوار رسانش و ظرفیت برای هر دو ساختار حدود  $20\text{ eV}$  است. نتایج محاسبات نشان می‌دهد که  $\alpha$ C28 و  $\beta$ C32 میتواند در آینده به صورت آزمایشگاهی سنتز شوند تا کاربردهای بالقوه‌ای در وسائل مکانیکی و الکترونیکی خواهد داشت.

### ۱- مقدمه

کربن به عنوان یکی از مهم‌ترین عناصر تشکیل‌دهنده مواد فوق سخت<sup>۱</sup> دارای ساختار الکترون ژلوفیت  $sp^3$ - $sp^2$  است که می‌تواند با انواع پیوندهای هیبریدی  $sp^2$  و  $sp^3$  آلوتروپ‌های جدید با خواص متفاوت را به وجود آورد. با توسعه صنعت و پیشرفت‌های مستمر در علم مواد، انواع ترکیبات جدید به نام مواد فوق سخت بر پایه کربن پدید آمده که به دلیل سختی بالا، مقاومت عالی در برابر خوردگی و مقاومت منحصر به فرد در دمای بالا، تقاضای جهانی برای استفاده از این قبیل مواد نیز در حال افزایش است. در میان آنها، معروف‌ترین و پرکاربردترین ماده فوق سخت الماس می‌باشد که با توجه به کمبود آن در جهان و شرایط پیچیده برای سنتز آزمایشگاهی، جستجو برای مواد فوق سخت جدید توجه بسیاری از محققان را به خود جلب کرده است<sup>[۳-۱]</sup>. محققان آلوتروپ‌های کربن سه بعدی فوق سخت فراوانی را در سالیان اخیر گزارش کرده‌اند که می‌توان به برخی از آنها اشاره کرد:

#### 1 Superhard

\* نویسنده عهده‌دار مکاتبات: s.ghorbanali@tafreshu.ac.ir

حقوق مؤلفین به نویسنده‌گان و حقوق ناشر به انتشارات دانشگاه امیرکبیر داده شده است. این مقاله تحت لیسانس آفرینندگی مردمی (Creative Commons License) در دسترس شما قرار گرفته است. برای جزئیات این لیسانس، از آدرس <https://www.creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/legalcode> دیدن فرمائید.



مورد استفاده قرار گرفته است. در این مقاله، محاسبات با استفاده از روش موج تخت تقویت شده هسته ثابت با کمک کد شبیه‌سازی سیستا<sup>۲</sup> انجام گرفت[۲۷]، که در آن برای پارامترسازی و تعییر پتانسیل تبادلی همبسته<sup>۳</sup> از تقریب شبیه تعمیم یافته<sup>۴</sup> با تابع همبستگی کد پردو-بارک<sup>۵</sup> استفاده شده است[۲۸]. استفاده از امواج تخت در روش تابعی چگالی، حجم محاسبات بالایی را به همراه خواهد داشت، لذا بهره‌گیری از شبیه پتانسیل‌های<sup>۶</sup> که بتواند خواص بلورها را توصیف کند، ضروری به نظر می‌رسد. الکترون‌های هسته تحت تاثیر تقریب هسته ثابت، با استفاده از شبیه پتانسیل‌های ترولیر-مارتینز<sup>۷</sup> پایسته بهنجار قرار دارند. برای توصیف الکترون‌های لایه آخر از یک گروه مبنای پلاریزه شده، بهره برده شده و در تمام محاسبات از مجموعه پایه زتای-دوبل قطیده<sup>۸</sup> برای اتم‌ها استفاده شده است. آرامش مورد نیاز این مواد فوق‌سخت برای انجام محاسبات ساختار الکترونیکی از طریق یک برش مش فضای واقعی با انرژی قطع بسط Ry ۲۰۰ تامین شده است. شاخص همگرایی<sup>۹</sup> برای ماتریس چگالی روی  $10^{-5}$  تنظیم شده است و صاف کردن توابع پله‌ای فرمی در دمای الکترونیکی ۳۰۰ کلوین صورت گرفته است. روش شبیه مزدوج با گستره تعییرات بیشینه نیرو هلمن-فایمن  $eV/\text{\AA}^3$  و بیشینه استرس  $10^{-3} eV/\text{\AA}^3$  برای بهینه‌سازی مختصات استفاده می‌شود. برای نمونه‌گیری از منطقه اول بریلوئن، روش مونخورست-پک<sup>۱۰</sup> از ابرسلول‌هایی با بعد  $8 \times 8 \times 8$  برای محاسبات ساختار الکترونی بهره برده شده است. تمام محاسبات دینامیک مولکولی با نرم افزار لمپس<sup>۱۱</sup> انجام شده و شرایط مرزی در تمام جهات متناوب انتخاب شده است. زمان کل شبیه‌سازی ۱۰ پیکوثانیه با گام زمانی ۱ فمتوثانیه بوده و برای کنترل دما و فشار استفاده از ترموستات و باروستات نوز-هوفر در محاسبات لحظه گردیده است. در پایان خاطر نشان می‌گردد، پتانسیل مورد استفاده در اغلب ساختارهای کریستالی پایه کربنی ترسوف<sup>۱۲</sup> می‌باشد که پتانسیل مناسبی برای بررسی پیوندهای کووالانسی است.

sp<sup>2</sup>-sp<sup>3</sup> دارای خواص رسانا هستند که از جمله کربن‌های غیر فوق‌سخت می‌توان به گرافن، K4 و کربن T6 و کربن‌های فوق‌سخت نیز می‌توان کربن Fddd-C96، کربن C5، کربن h-C63، کربن Cmcm-C24، کربن C14-diamond و کربن CP-C20 اشاره کرد[۲۰-۲۴]. در سالیان اخیر، یافتن مواد کربنی فوق‌سخت جدید با خواص مکانیکی عالی و مشخصه‌های الکترونیکی به موضوعی بسیار حیاتی برای محققان تبدیل شده است که اتفاقاً پیشرفت‌های مهمی نیز در این زمینه حاصل شده است. اخیراً الوتروب کربن سه بعدی با هیبریداسیون sp<sup>3</sup> و sp<sup>3</sup>=C توسط محققین شامل نانو نوارهای الماس بسیار نازک و پیوندهای C=C به صورت تئوری پیش‌بینی شده‌اند که هیبریداسیون و ضرایب سختی این ساختارها، فوق‌سخت و رسانا بودنشان را تضمین می‌کند[۲۵-۲۶]. در سال ۲۰۲۲ ژانگ و همکارانش در جستجوی این مواد پایه کربنی توانستند در سال ۲۰۲۲ با روش نظریه تابعی چگالی سه ساختار فوق‌سخت رسانا دارای هیبریداسیون ترکیبی sp<sup>2</sup>-sp<sup>3</sup> را با سختی‌های ۴۴، ۶۹ و ۷۷ گیگا پاسکال بدست بیاورند، که کاندیدای مناسبی برای کاربرد در وسایل الکترونیکی با فشار بالا هستند[۲۱].

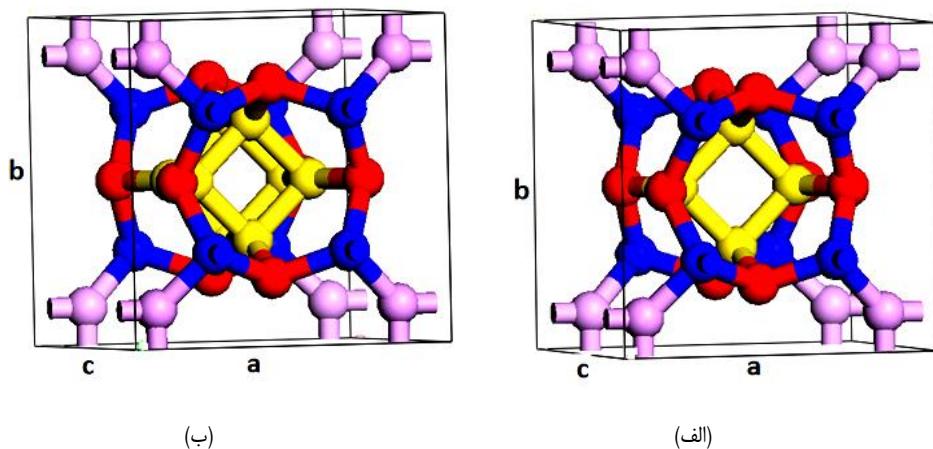
در این مطالعه، ما دو ساختار کربن مکعبی فوق‌سخت جدید با نام  $\alpha C_{28}$  و  $\beta C_{32}$  پیشنهاد کردیم که خواص الکترونیکی و مکانیکی آن از طریق نظریه تابعی چگالی<sup>۱</sup> مورد بررسی قرار گرفته است. با جستجوهای فراوانی که در بانک‌های اطلاعاتی کربنی RCSR و SACADA و مقالات این حوزه صورت گرفت، بدیع و جدید بودن این دو ساختار برای نویسنده‌گان محائز شد. ساختارهای کریستالی فوق از حلقه‌های کربنی ۴، ۵، ۶ و ۸ ضلعی و هیبریداسیون پیوند sp<sup>2</sup> و sp<sup>3</sup> تشکیل شده است. خواص ساختاری شبکه، خواص الکترونیکی، خواص الاستیک، خواص ناهمسانگردی الاستیک، پایداری گرمایی، دینامیکی و مکانیکی این ساختارها در این کار تحقیق مورد بررسی قرار گرفته است. محاسبات مکانیکی و ساختار الکترونیکی نشان داد که  $\beta C_{32}$  هر دو رسانا هستند و سختی ویکرزا این دو ساختار نیز به ترتیب  $45/7$  و  $47/9$  گیگا پاسکال می‌باشد و این نتایج دلالت بر ساختار فوق سخت این خانواده کربنی بدیع با کاربردهای متنوع دارد.

## ۲- روش محاسبات

در سال‌های اخیر، روش محاسباتی نظریه تابعی چگالی به عنوان یک ابزار نظری مهم برای پیش‌بینی خواص فیزیکی کریستال‌های جدید مختلف

1 Density functional theory (DFT)

- 2 SIESTA
- 3 potential exchange-correlation
- 4 Generalized Gradient Approximations (GGA)
- 5 Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE)
- 6 pseudopotentials
- 7 Troullier-Martins
- 8 Double zeta polarized (DZP)
- 9 convergence criterion
- 10 Monkhorst-Pack
- 11 Lammps
- 12 Tersoff



شکل ۱. ساختارهای فوق سخت کربنی جدید. (الف) ساختار  $\alpha$ C28، (ب) ساختار  $\beta$ C32.

Fig. 1. New superhard carbon structures. (a)  $\alpha$ C28, (b)  $\beta$ C32.

جدول ۱. طول پیوند و پارامترهای سلول واحد ( $\text{\AA}$ )، گروه فضایی، چگالی ( $\text{gr/cm}^3$ ) و حجم تعادلی محاسبه شده ( $\text{\AA}^3/\text{atom}$ )

Table 1. The atomic bond length and unit cell parameters ( $\text{\AA}$ ), space group, density  $\rho$  ( $\text{gr/cm}^3$ ) and calculated equilibrium volume  $V$  ( $\text{\AA}^3/\text{atom}$ ).

$\rho$	$V$	$c$	$b$	$a$	$C_4-C_4$	$C_3-C_4$	$C_3-C_3$	$C_2-C_3$	$C_1-C_2$	$C_1-C_1$	گروه فضایی	کریستال
۳/۵۱۷	۵/۶۸			۳/۵۷						۱/۴۴ $\text{\AA}$	Fd-3M(227)	الماس
۲/۶۵۸	۷/۴۹۹	۵/۶۸	۶/۰۸	۶/۰۸	۱/۵۰	۱/۵۳	۱/۵۶	۱/۵۲	۱/۴۸	۱/۴۴	P4/MMM	$\alpha$ C28
۲/۳۹۲	۸/۳۴۵	۷/۱۹	۶/۰۹	۶/۰۹	۱/۵۲	۱/۵۵	۱/۵۴	۱/۵۰	۱/۴۹	۱/۴۶	P4/MMM	$\beta$ C32

هشت وجهی تشکیل شده‌اند که پارامترهای شبکه آنها در فشار محیط برای ساختار  $\alpha$ C<sub>28</sub> برابر  $c=5/67975 \text{\AA}$  و  $b=6/08171 \text{\AA}$ ،  $a=6/08171 \text{\AA}$  هستند که به طور کامل در جدول ۱ محاسبه گردیده است. علاوه بر این مکان‌های غیرمعادل کریستالوگرافی در موقعیت‌های اتمی واکوف در جدول ۲ آورده شده است.

زوایای پیوندی کریستال‌های کربنی  $\alpha$ C<sub>28</sub> و  $\beta$ C<sub>32</sub> نیز با توجه به هیبریداسیون‌های پیوندی متنوع، دارای مقادیر متفاوت هستند که در گستره ۹۰ تا ۱۳۵ درجه قرار می‌گیرد. پایداری دینامیکی، پایداری مکانیکی

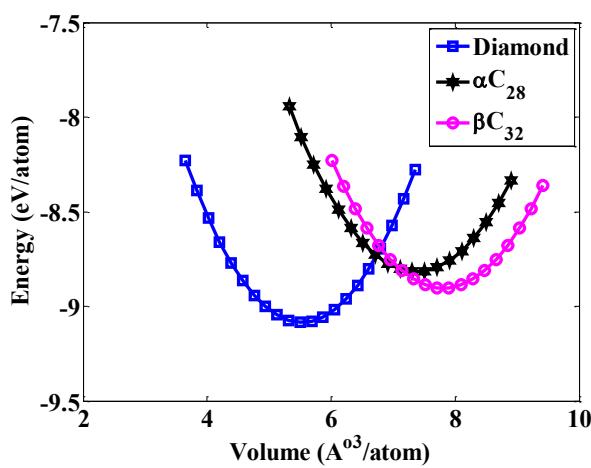
۳- نتایج و بحث  
ساختارهای کربنی فوق سخت  $\alpha$ C<sub>28</sub> و  $\beta$ C<sub>32</sub> پیشنهادی دارای تقارن چهارضلعی و گروه P4/MMM می‌باشند که در شکل ۱ نشان داده شده‌اند. این ساختارها از ۴ نوع اتم کربن غیر معادل تشکیل شده‌اند که در شکل با رنگ‌های مختلف مشخص شده‌اند.

این ساختارهای فوق سخت الماس‌گونه دارای هیبریداسیون تلفیقی  $sp^2$  و  $sp^3$  بوده که اتم‌های C<sub>2</sub> و C<sub>3</sub> (اتم‌های قرمز و بنفش) دارای پیوند  $sp^2$  و اتم‌های C<sub>1</sub> و C<sub>4</sub> (اتم‌های زرد و آبی) دارای پیوند  $sp^3$  می‌باشند. کریستال‌های مورد بررسی از حلقه‌های کربنی غیرمنتظم چهار، پنج و

## جدول ۲. مکان‌های غیرمعادل کریستالوگرافی دو ساختار جدید مورد شبیه‌سازی در موقعیت‌های اتمی واکوف

Table 2. In equivalent crystallographic positions of two new simulated structures in Wyckoff atomic positions

کریستال	موقعیت‌های اتمی واکوف
$\alpha C_{28}$	$8t(0/2850.3, 0/2850.9, 0/13663)$ , $8t(-0/210.4, 0/0.5, 0/25483)$ , $40(-0/3147, 0/0.5, 0/0.5)$ , $8t(0/117, 0/117, 0/198)$
$\beta C_{32}$	$8t(0/2841, 0/2841, 0/10791)$ , $8t(0/11677, 0/11677, 0/1556)$ , $8t(0/2046, 0/0.5, 0/200.83)$ , $8t(0/31743, 0/0.5, 0/38936)$



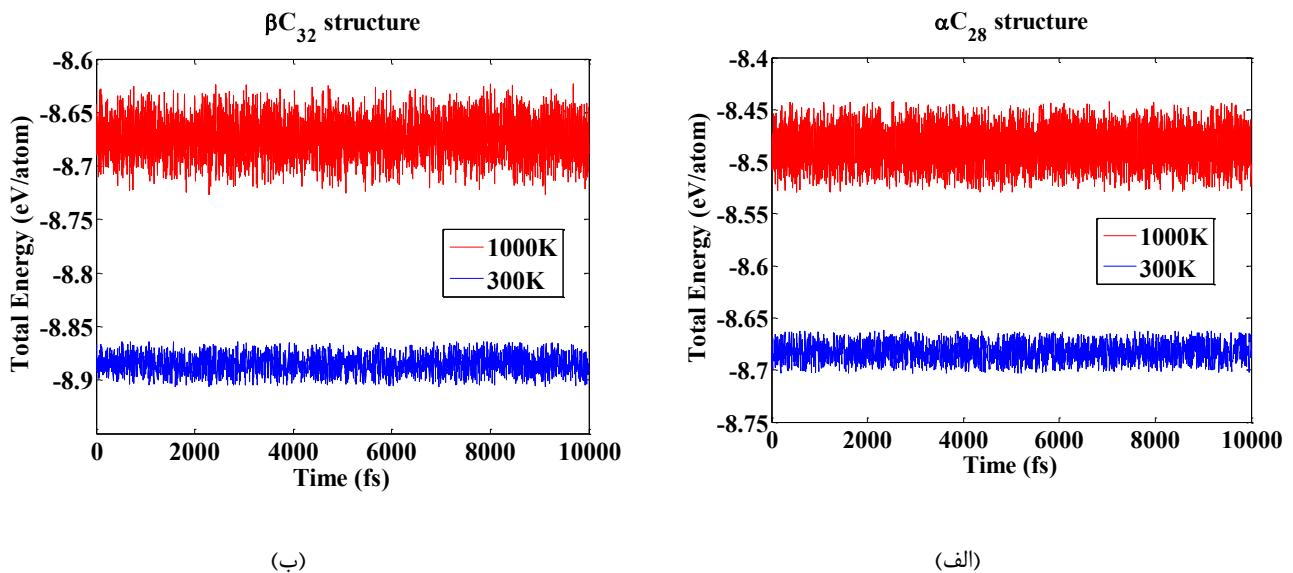
شکل ۲. نمودار انرژی بر هر اتم نسبت به حجم برای ساختارهای فوق سخت کربنی جدید  $\alpha C_{28}$  و  $\beta C_{32}$

Fig. 2. The calculated energy per atom as a function of volume for the diamond structure compared to the new superhard carbon structures  $\alpha C_{28}$  and  $\beta C_{32}$ .

است که نشان دهنده پایداری ترمودینامیکی مشابه آنهاست.

به منظور بررسی پایداری حرارتی کریستال‌های کربنی  $\alpha C_{28}$  و  $\beta C_{32}$  در دمای بالای صفر مانند ۳۰۰ و ۱۰۰۰ کلوین، شبیه‌سازی دینامیک مولکولی تحت آنسامبل کانونیک صورت پذیرفت. کریستال‌های جدید کربنی دارای انرژی پتانسیل ساختارهای  $\alpha C_{28}$  و  $\beta C_{32}$  را به صورت تابعی از زمان نشان می‌دهد. همانطور که مشاهده می‌شود، افت و خیز انرژی در دمای K ۳۰۰ می‌دهد. (اتاق) بسیار جزیی است و هیچ تغییر اساسی در پیکربندی اولیه سازه‌ها مشاهده نمی‌شود. اما نوسان انرژی در دمای K ۱۰۰۰ برای این کریستال‌ها بیش از ۳۰۰ کلوین می‌باشد و همین باعث به هم ریختگی جزئی جایگاه‌های اتمی در ابتدای شبیه‌سازی می‌شود، اما در نهایت پیکربندی به تعادل می‌رسد. در تمام مدت شبیه‌سازی، مقدار کل انرژی پتانسیل در دمای K ۳۰۰ و ۱۰۰۰

و ترمودینامیکی از معیارهای اساسی بررسی و نتیجه‌گیری در مورد پایداری یک ماده جدید می‌باشد. در شکل ۲، انرژی کل هر اتم بر حسب حجم برای الماس،  $\alpha C_{28}$  و  $\beta C_{32}$  به نمایش درآمده است. روشن است که مقدار انرژی کل  $\alpha C_{28}$  و  $\beta C_{32}$  به ترتیب دارای حداقل مقدار  $-8.9 \text{ eV/atom}$  و  $-8.4 \text{ eV/atom}$  می‌باشد که پارامترهای شبکه مربوط به کمینه انرژی متناسب با پارامترهای بهینه شده سلول هستند و در نتیجه می‌توان گفت کریستال‌های بهینه شده فوق سخت جدید، پایدار می‌باشند. در همین حال، حداقل انرژی  $\alpha C_{28}$  و  $\beta C_{32}$  از مقدار مشابه در ساختار الماس با مقدار  $-8.17 \text{ eV/atom}$  بیشتر است که نشان دهنده پایداری ترمودینامیکی کمتر آنها نسبت به الماس و همچنین گرافیت با مقدار  $-8.17 \text{ eV/atom}$  می‌باشد. همان گونه که در شکل ۲ مشاهده می‌شود، منحنی انرژی به عنوان تابعی از حجم برای کربن  $\alpha C_{28}$  بسیار نزدیک منحنی مشابه به کربن  $\beta C_{32}$



شکل ۳. افت و خیزهای انرژی نهایی ساختارهای فوق سخت کربنی جدید در دمای ۳۰۰ و ۱۰۰۰ کلوین. (الف) ساختار  $\alpha\text{C}_{28}$ ، (ب) ساختار  $\beta\text{C}_{32}$

Fig. 3. Total energy fluctuations of new superhard carbon structures at 300 and 1000 K. (a)  $\alpha\text{C}_{28}$ , (b)  $\beta\text{C}_{32}$

$$\frac{1}{B} = (S_{11} + S_{12} + S_{13})(l_1^2 + l_2^2) + (2S_{13} + S_{33})l_3^2 \quad (1)$$

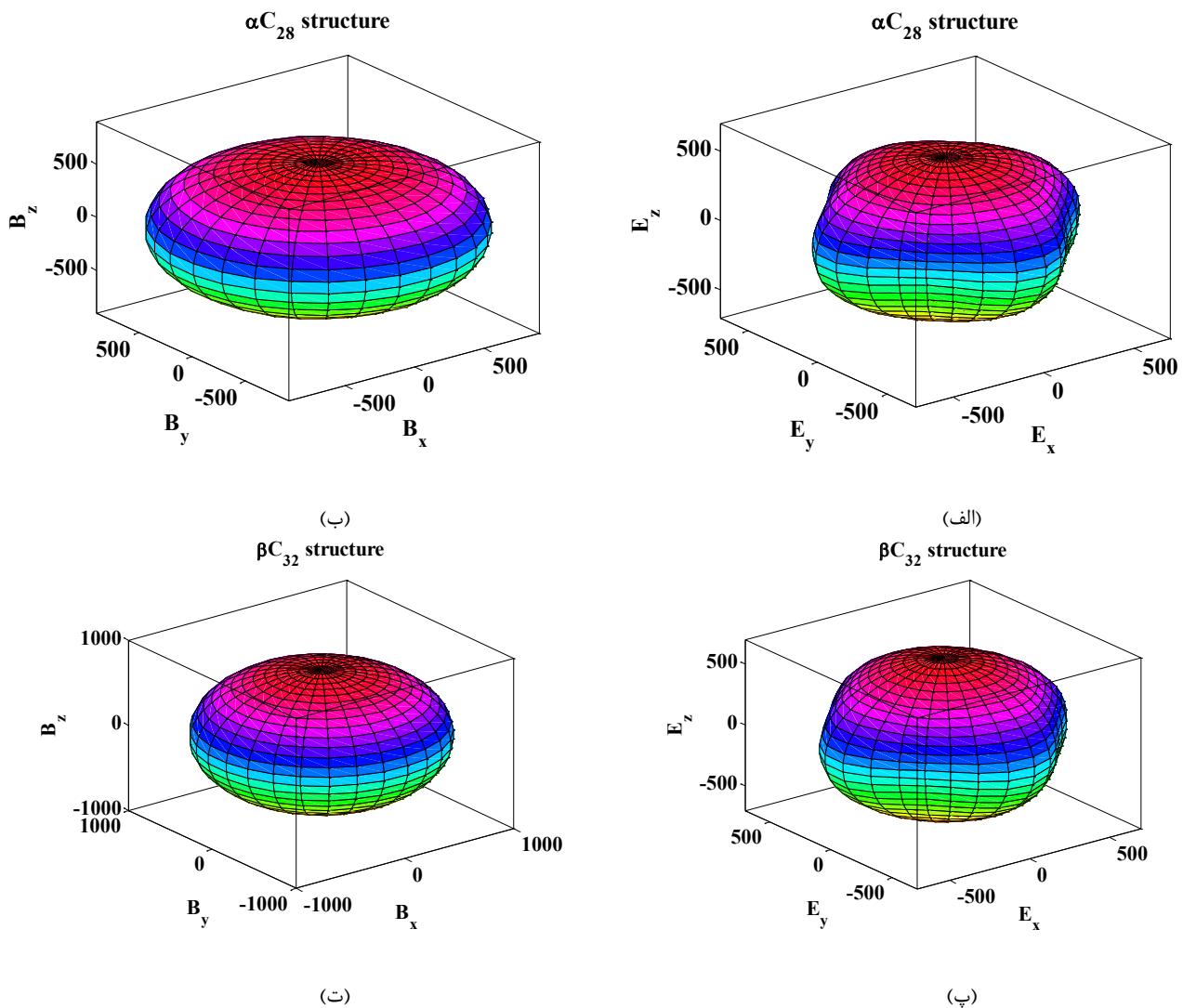
$$\frac{1}{E} = S_{11}(l_1^4 + l_2^4) + (2S_{13} + S_{44})(l_1^2 l_2^2 + l_2^2 l_3^2) + S_{33}l_3^4 + (2S_{12} + S_{66})l_1^2 l_2^2 \quad (2)$$

در این معادلات ماتریس  $S$  معکوس ماتریس ثابت های الاستیک ( $C_{ij}$ ) و تمام  $I$  ها، کسینوسهای هادی نسبت به محورهای مختصات کریستال می باشد که از روی ضرایب میل برای جهات مختلف محاسبه شده اند.

همانگونه که از شکل پیداست، با توجه به مقادیر مدول یانگ محاسبه شده، این دو کریستال های جدید غیرهمسانگرد می باشد. مدول یانگ  $\alpha\text{C}_{28}$  برای راستای محورهای  $a$ ،  $b$  و  $c$  به ترتیب  $620$  GPa،  $590$  GPa و  $530$  GPa است که میانگین آن را در تمام جهات می توان حدود در نظر گرفت. مدول حجمی  $\alpha\text{C}_{28}$  برای راستای محورهای  $a$ ،  $b$  و  $c$  به

حول یک مقدار ثابت در نوسان است، بنابراین این فازهای کریستالی جدید پایداری حرارتی خوبی در گستره دماهای اشاره شده دارند.

برای تعیین پایداری مکانیکی، مقادیر ثابت های الاستیک مستقل  $C_{11}$ ،  $\beta\text{C}_{32}$  و  $C_{66}$  مربوط به کریستال های کربنی  $\alpha\text{C}_{28}$  و  $\alpha\text{C}_{33}$ ،  $C_{44}$ ،  $C_{13}$ ،  $C_{12}$  محاسبه و نتایج بدست آمده در جدول ۳ لیست شده است. در فشار محیط، برای پایداری مکانیکی دو کریستال چهار ضلعی متعامد مورد بررسی، شش عنصر ثابت الاستیک مستقل غیر صفر باید از معادلات بورن تبعیت کنند [۲۹]:  $2C_{13}^2 < C_{33}(C_{11} + C_{12})$  و  $C_{11} > C_{12}$ . مطابق با اطلاعات جدول ۳، مولفه های ثابت الاستیک  $\alpha\text{C}_{28}$  و  $\beta\text{C}_{32}$  با معادلات ذکر شده بورن مطابقت دارند که می توان نتیجه گرفت ساختارهای پیش بینی شده در فشار محیط از نظر مکانیکی پایدار است. با در نظر گرفتن این موضوع که در جامدات تک بلوری، خواص فیزیکی تابع جهت هستند، می توان مدول یانگ ( $E$ ) و مدول حجمی ( $B$ ) را بر حسب جهات مختلف بر اساس معادلات (۱) و (۲) رسم کرد [۳۰]. شکل ۴ نحوه تغییرات  $E$  و  $B$  کریستال های کربنی  $\beta\text{C}_{32}$  و  $\alpha\text{C}_{28}$  در سه جهت اصلی نمایش می دهد.



شکل ۴. (الف) مدول یانگ برای  $\alpha\text{C}28$  (ب) مدول حجمی برای  $\alpha\text{C}28$  (پ) مدول یانگ برای  $\beta\text{C}32$  (ت) مدول حجمی برای  $\beta\text{C}32$  بر حسب جهت.

**Fig. 4. The directional dependence of (a) Young's modulus for  $\alpha\text{C}28$ , (b) Bulk modulus for  $\alpha\text{C}28$ , (c) Young's modulus for  $\beta\text{C}32$ , (d) Bulk modulus for  $\beta\text{C}32$ .**

يانگ تقریباً صلیب گونه و تصویر مریبوط به مدول حجمی بیضی گون است. با فرض آنکه این جامدات بتوانند ساختار پلی کریستال ایجاد کنند، آنگاه جامد همسانگرد شده و خواص آنها دیگر وابسته به جهت نخواهد بود. در این حالت می‌توان خواص مکانیکی شامل مدول حجمی ( $B$ )، مدول برشی ( $G$ )، مدول یانگ ( $E$ )، ضریب پواسون را از تقریب ویگت-رس-هل<sup>۱</sup> بر اساس معادلات یانگ (۳۱) را محاسبه کرد:

ترتیب  $600 \text{ GPa}$  و  $900 \text{ GPa}$  و  $900 \text{ GPa}$  و  $600 \text{ GPa}$  است که میانگین این کمیت در تمام جهات برابر  $800 \text{ GPa}$  می‌باشد. از طرفی مدول یانگ برای  $\beta\text{C}_{32}$  راستای محورهای  $a$ ،  $b$  و  $c$  به ترتیب  $660 \text{ GPa}$ ،  $660 \text{ GPa}$  و  $640 \text{ GPa}$  در  $600 \text{ GPa}$  است که میانگین آن را در تمام جهات می‌توان حدود  $640 \text{ GPa}$  در نظر گرفت. به همین ترتیب مدول حجمی  $\alpha\text{C}_{28}$  برای راستای محورهای  $a$ ،  $b$  و  $c$  به ترتیب  $700 \text{ GPa}$ ،  $910 \text{ GPa}$  و  $910 \text{ GPa}$  است که میانگین این کمیت در تمام جهات برابر  $840 \text{ GPa}$  می‌باشد. شکل مریبوط به مدول

1 Voigt-Reuss-Hill (VRH)

جدول ۳. مقادیر ضرایب الاستیک ( $C_{ij}$ )، مدول حجمی ( $B$ )، نسبت پواسون ( $\nu$ ) محاسبه شدهTable 3. Calculated values of elastic coefficients ( $C_{ij}$ ), bulk modulus ( $B$ ), Young's modulus ( $E$ ), Poisson's ratio ( $\nu$ ).

$H_v$	$B/G$	$\nu$	$E$ (GPa)	$G$ (GPa)	$B$ (GPa)	$C_{13}$	$C_{12}$	$C_{66}$	$C_{44}$	$C_{33}$	$C_{11}$ (GPa)	کریستال
		-0.07	1116	522	431		120/1		566/7		1056/2	الماس
45/7	1/0.44	-0.136	579/1	254/7	265/8	56	162	193	281	535	672	$\alpha C_{28}$
47/9	1/0.42	-0.135	621/6	273/5	284/9	75	125	223	286	627	697	$\beta C_{32}$

دهنده کشش حجمی و مقاومت فشاری قوی آنهاست. ماهیت شکننده/شکل پذیر کریستال‌ها از نسبت مدول حجمی به مدول برشی برآورده می‌شود و [۳۲]. مطابق نتایج به دست آمده برای نسبت  $B/G$  متعلق به  $\alpha C_{28}$  و  $\beta C_{32}$ ، می‌توان نتیجه گرفت این دو ساختار دارای مشخصه شکننده‌گی بوده و شرط  $B/G > 1/75$  برای آنها برآورده می‌شود. سختی ویکرز را می‌توان با

فرمول تجربی مدل چن [۳۳]:

$$H_v^{Chen} = 2 \left( k^2 G \right)^{0.585} - 3 \quad (8)$$

محاسبه کرد که در اینجا  $k = G/B$  است.

با توجه به اعداد داخل جدول ۳ می‌توان گفت که این کریستال‌ها در رده سخت قرار می‌گیرند. برای بررسی خواص الکتریکی، ساختار نواری این کریستال‌ها در نقاط متقاضی محاسبه شده که در شکل ۵ نمایش داده شده است (سطح فرمی در صفر قرار دارد).

همان‌گونه که در شکل مشاهده می‌شود، هر دو ساختار رسانا هستند و هیچ شکاف انرژی بین نوار رسانش و ظرفیت وجود ندارد. در ادامه چگالی حالات الکترونی این دو کریستال نیز محاسبه شد که نتایج مربوطه در شکل ۶ آورده شده است (در اینجا هم فرض شده که انرژی فرمی در صفر است). این شکل هم نشان داده که هر دو ساختار رسانا هستند و هیچ شکاف انرژی بین حالات ظرفیت و رسانش نیست. پنهانی هر دو نوار رسانش و ظرفیت برای هر دو ساختار حدود ۲۰ eV است.

در پایان برای اطمینان از برقراری پیوند و تشکیل هیبریداسیون بین

$$B_V = \left( \frac{1}{9} \right) [2(C_{11} + C_{12}) + C_{33} + 4C_{13}], \quad (3)$$

$$B_R = \frac{Q_1}{Q_2}, \quad B = \frac{(B_V + B_R)}{2},$$

$$G_V = \left( \frac{1}{30} \right) [Q_2 + 3C_{11} - 3C_{12} + 12C_{44} + 6C_{66}] \quad (4)$$

$$G_R = 15 \left\{ \left( \frac{18B_V}{Q_1} \right) + \left[ 6/(C_{11} - C_{12}) \right] + \frac{6}{C_{44}} + \frac{3}{C_{66}} \right\}^{-1} \quad (5)$$

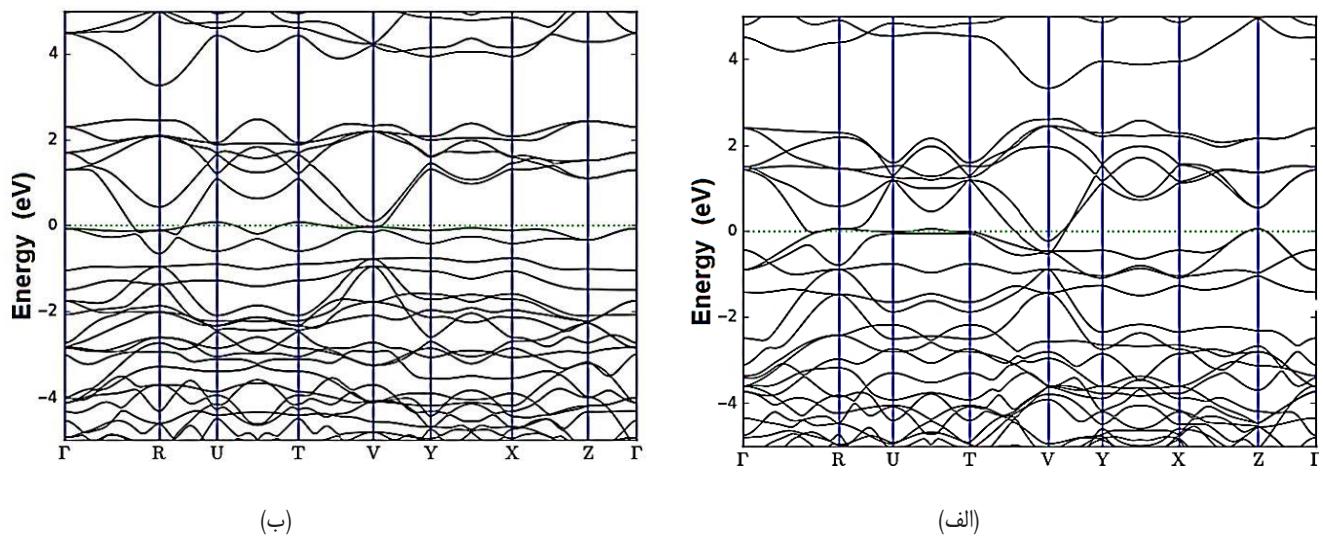
$$G = \frac{(G_V + G_R)}{2} \quad (6)$$

با مقادیر  $Q_2 = C_{11} + C_{12} + 2C_{33} - 4C_{13}$  و  $Q_1 = (C_{11} + C_{12})C_{33} - 2C_{13}^2$  مدول یانگ و نسبت پواسون برای ساختارهای چهارگوش کربنی عبارتند از:

$$E = \frac{9BG}{3B + G}, \quad (7)$$

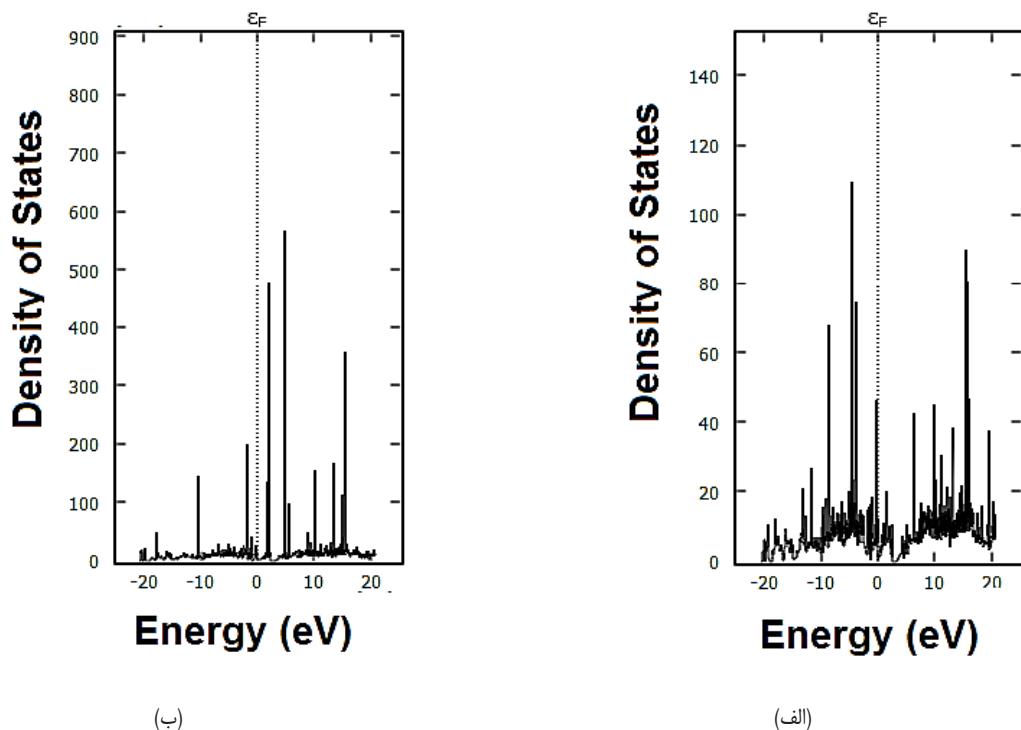
$$\nu = \frac{3B - 2G}{2(3B + G)}$$

همانطور که در جدول ۳ نشان داده شده است، مدول حجمی این کریستال‌ها برابر ۸ ۲۶۵/۸ و ۲۸۴/۹ گیگا پاسکال است که این مقدار نشان



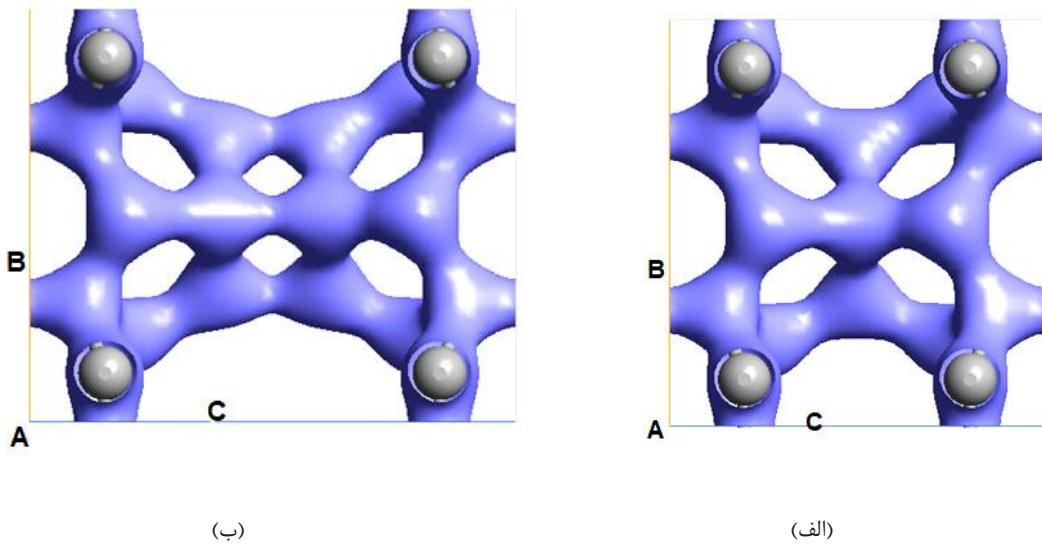
شکل ۵. ساختار نواری کریستال‌های کربنی جدید. (الف) ساختار  $\alpha$ C28، (ب) ساختار  $\beta$ C32

Fig. 5. Electronic band structures of new carbon crystals. (a)  $\alpha$ C28, (b)  $\beta$ C32



شکل ۶. چگالی حالات الکترونی برای کریستال‌های کربنی جدید. (الف) ساختار  $\alpha$ C28، (ب) ساختار  $\beta$ C32

Fig. 6. Density of electron states (DOS) for new carbon crystals. (a)  $\alpha$ C28, (b)  $\beta$ C32



شکل ۷. چگالی ابر الکترونی برای کریستال‌های کربنی جدید. (الف) ساختار  $\beta\text{C}32$ , (ب) ساختار  $\alpha\text{C}28$

Fig. 7. Electron density of new carbon crystals. (a)  $\alpha\text{C}28$ , (b)  $\beta\text{C}32$

و مکانیکی که به ترتیب توسط بررسی محاسبه انرژی و ثابت‌های الاستیک انجام گرفته است، پایدار می‌باشند. سپس نتایج حاصل از محاسبات مدول یانگ، مدول حجمی و مدول برشی تایید کردند که این ساختارها در زیرگروه کربن‌های فوق سخت قرار می‌گیرند. در پایان چگالی حالات الکترونی این دو کریستال نیز محاسبه شد و نتایج مربوطه رساناً بودن هر دو ساختار را تایید نمودند، یعنی هیچ شکاف انرژی بین حالات ظرفیت و رسانش وجود ندارد. وجود ابر الکترونی بین اتم‌ها نشان از وجود پیوند کووالانسی بین آنها و در نهایت تشکیل ساختار کریستالی فوق سخت جدید کربنی با خواص منحصر به فرد گردیده جالب می‌باشد.

اتم‌های کربن، به بررسی و محاسبه چگالی ابر الکترونها در فضای داخلی سلول واحد پرداخته شد که نتایج حاصل از محاسبات در شکل ۷ به نمایش درآمده است. همانگونه که شکل نشان می‌دهد، پیوندهای مربوطه تشکیل شده و الکترون‌ها نیز در اطراف پیوندهای اتمی گسترش یافته‌اند. به عبارت دیگر، ابر الکترونی موجود ناشی از الکترون‌های می‌باشد که اتم‌ها به اشتراک گذاشته‌اند و سبب ایجاد پیوند کووالانسی بین آنها و در نهایت سبب تشکیل ساختار کریستالی فوق سخت جدید کربنی با خواص منحصر به فرد گردیده است.

#### ۴- نتیجه‌گیری

در این تحقیق بر پایه محاسبات تابعی چگالی، دو ساختار فوق سخت کربنی جدید که دارای خواص فلزی نیز می‌باشند، پیش‌بینی شدند. با جستجوهای فراوانی که در دیتابیس‌های کربنی RCSR و SACADA صورت گرفت، بدیع و جدید بودن آن برای نویسندهان محرز شد [۳۴-۳۵]. خواص ساختاری، مکانیکی، ناهمسانگردی الاستیکی، الکترونیکی و ترمودینامیکی این کریستال‌های کربنی به طور نظاممند مورد بررسی قرار گرفتند. در ابتدا مشخص شد ساختارهای  $\alpha\text{C}_{28}$  و  $\beta\text{C}_{32}$  از نظر ترمودینامیکی

#### ۵- تشکر و سپاسگزاری

این تحقیق حمایت خاصی از مؤسسات عمومی، صنعتی و غیرانتفاعی دریافت نکرده است.

#### ۶- تضاد منافع

نویسندهان مقاله اذعان دارند هیچ نوع تضاد منافعی با شخص، شرکت یا سازمانی برای این پژوهش ندارند.

## منابع

- Body-Centered Tetragonal C<sub>4</sub>: A Viable s p 3 Carbon Allotrope, Physical review letters, 104(12) (2010) 125504.
- [12] C. Zhang, Y. Cao, Y. Liu, H.-J. Hu, Z.G. Yu, Y.-W. Zhang, Bct-C5: A new body-centered tetragonal carbon allotrope, Diamond and Related Materials, 119 (2021) 108571.
- [13] Q. Fan, H. Liu, L. Jiang, X. Yu, W. Zhang, S. Yun, Two orthorhombic superhard carbon allotropes: C16 and C24, Diamond and Related Materials, 116 (2021) 108426.
- [14] Q. Fan, H. Liu, R. Yang, X. Yu, W. Zhang, S. Yun, An orthorhombic superhard carbon allotrope: Pmma C24, Journal of Solid State Chemistry, 300 (2021) 122260.
- [15] W. Tong, Q. Wei, B. Wei, M. Hu, L. Li, M. Zhang, X. Zhu, Orthorhombic Fmmm-C80: A new superhard carbon allotrope with direct band gap, Computational Materials Science, 198 (2021) 110689.
- [16] Q. Wei, X. Yang, B. Wei, M. Hu, W. Tong, R. Yang, H. Yan, M. Zhang, X. Zhu, R. Yao, Orthorhombic carbon oC48: A new superhard carbon allotrope, Solid State Communications, 319 (2020) 113994.
- [17] C. He, X. Shi, S.J. Clark, J. Li, C.J. Pickard, T. Ouyang, C. Zhang, C. Tang, J. Zhong, Complex low energy tetrahedral polymorphs of group IV elements from first principles, Physical Review Letters, 121(17) (2018) 175701.
- [18] L. Zhou, C. Chai, W. Zhang, Y. Song, Z. Zhang, Y. Yang, oI20-carbon: A new superhard carbon allotrope, Diamond and Related Materials, 113 (2021) 108284.
- [19] W. Zhang, C. Chai, Q. Fan, Y. Song, Y. Yang, Penta-C20: a superhard direct band gap carbon allotrope composed of carbon pentagon, Materials, 13(8) (2020) 1926.
- [20] X. Zhu, H. Yan, X. Wang, M. Zhang, Q. Wei, h-C63: A new hexagonal superhard metallic carbon allotrope, Results in Physics, 15 (2019) 102738.
- [21] Q. Wei, H. Yuan, W. Tong, M. Zhang, Three new orthorhombic superhard metallic carbon allotropes, Diamond and Related Materials, 121 (2022) 108731.
- [22] H. Su, Z. Lai, E. Kan, X. Zhu, CP-C20, a new metallic
- [1] ] M. Xing, X. Li, An orthorhombic carbon allotrope with a quasi-direct band gap and superhard, Diamond and Related Materials, 131 (2023) 109592.
- [2] Q. Fan, C. Li, R. Yang, X. Yu, S. Yun, A larger-cell tetragonal carbon allotrope tP176 carbon with superhardness, Materials Letters, 326 (2022) 132925.
- [3] P. Ying, Z. Li, S. Chen, H. Li, Y. Gao, J. He, C. Liu, First-principles study on stability, electronic and mechanical properties of 4<sup>+</sup> 3T175 carbon allotrope, Computational Materials Science, 219 (2023) 111956.
- [4] Y. Pan, C. Xie, M. Xiong, M. Ma, L. Liu, Z. Li, S. Zhang, G. Gao, Z. Zhao, Y. Tian, A superhard sp3 microporous carbon with direct bandgap, Chemical Physics Letters, 689 (2017) 68-73.
- [5] S. Ghorbanali, E. Zaminpayma, H. Mobarakinia, Two orthorhombic superhard carbon allotropes: Hcc-C14 and DHcc-C20, Diamond and Related Materials, 126 (2022) 109065.
- [6] Y. Zhou, X. Chen, S.-L. Liu, L.-H. Gan, Three tetragonal superhard sp3 carbon allotropes, Solid State Communications, 323 (2021) 114095.
- [7] Q. Li, Y. Ma, A.R. Oganov, H. Wang, H. Wang, Y. Xu, T. Cui, H.-K. Mao, G. Zou, Superhard monoclinic polymorph of carbon, Physical review letters, 102(17) (2009) 175506.
- [8] S. Ghorbanali, E. Zaminpayma, H. Mobarakinia, Stability, mechanical and electronic properties of Occ carbon allotropes: Four new tetragonal 3D superhard carbon crystals, Diamond and Related Materials, (2023) 109838.
- [9] J.-T. Wang, C. Chen, Y. Kawazoe, Low-temperature phase transformation from graphite to s p 3 orthorhombic carbon, Physical review letters, 106(7) (2011) 075501.
- [10] X. Yang, C. Lv, S. Liu, J. Zang, J. Qin, M. Du, D. Yang, X. Li, B. Liu, C.-X. Shan, Orthorhombic C14 carbon: A novel superhard sp3 carbon allotrope, Carbon, 156 (2020) 309-312.
- [11] K. Umemoto, R.M. Wentzcovitch, S. Saito, T. Miyake,

- simple analytic model and a challenge, *Physical Review A*, 23(6) (1981) 2785.
- [29] F. Mouhat, F.-X. Coudert, Necessary and sufficient elastic stability conditions in various crystal systems, *Physical review B*, 90(22) (2014) 224104.
- [30] X. Liu, Q. Feng, B. Tang, J. Zheng, Z. Zheng, W. Zhou, J. Tian, J. Wang, First-principles calculations of mechanical and thermodynamic properties of tetragonal Be 12 Ti, *RSC advances*, 9(10) (2019) 5302-5312.
- [31] R. Hill, The elastic behaviour of a crystalline aggregate, *Proceedings of the Physical Society. Section A*, 65(5) (1952) 349.
- [32] S. Pugh, XCII. Relations between the elastic moduli and the plastic properties of polycrystalline pure metals, *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, 45(367) (1954) 823-843.
- [33] X.-Q. Chen, H. Niu, D. Li, Y. Li, Modeling hardness of polycrystalline materials and bulk metallic glasses, *Intermetallics*, 19(9) (2011) 1275-1281.
- [34] R. Hoffmann, A.A. Kabanov, A.A. Golov, D.M. Proserpio, Homo citans and carbon allotropes: For an ethics of citation, *Angewandte Chemie International Edition*, 55(37) (2016) 10962-10976.
- cubic carbon allotrope with an sp<sub>2</sub> network, *Journal of Solid State Chemistry*, 283 (2020) 121136.
- [23] S. Zhang, Q. Wang, X. Chen, P. Jena, Stable three-dimensional metallic carbon with interlocking hexagons, *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 110(47) (2013) 18809-18813.
- [24] Q. Fan, H. Liu, L. Jiang, W. Zhang, Y. Song, Q. Wei, X. Yu, S. Yun, Three-dimensional metallic carbon allotropes with superhardness, *Nanotechnology Reviews*, 10(1) (2021) 1266-1276.
- [25] X. Wu, X. Shi, M. Yao, S. Liu, X. Yang, L. Zhu, T. Cui, B. Liu, Superhard three-dimensional carbon with metallic conductivity, *Carbon*, 123 (2017) 311-317.
- [26] Y. Liu, X. Jiang, J. Fu, J. Zhao, New metallic carbon: Three dimensionally carbon allotropes comprising ultrathin diamond nanostripes, *Carbon*, 126 (2018) 601-610.
- [27] E. Artacho, E. Anglada, O. Diéguez, J.D. Gale, A. García, J. Junquera, R.M. Martin, P. Ordejón, J.M. Pruneda, D. Sánchez-Portal, The SIESTA method; developments and applicability, *Journal of Physics: Condensed Matter*, 20(6) (2008) 064208.
- [28] J. Perdew, E. McMullen, A. Zunger, Density-functional theory of the correlation energy in atoms and ions: a

چگونه به این مقاله ارجاع دهیم

S. Ghorbanali, E. Zaminpayma, Investigating of the stability and structural, mechanical and electronic properties of two new superhard conductive carbon structures, *Amirkabir J. Mech Eng.*, 55(10) (2024) 1207-1218.

DOI: [10.22060/mej.2024.22431.7617](https://doi.org/10.22060/mej.2024.22431.7617)



