

See discussions, stats, and author profiles for this publication at: <https://www.researchgate.net/publication/258110709>

# Classification of carbon structures

Conference Paper · September 2003

CITATIONS

3

READS

221

1 author:



[E. A. Belenkov](#)

Chelyabinsk State University

102 PUBLICATIONS 551 CITATIONS

SEE PROFILE

Some of the authors of this publication are also working on these related projects:



Structure and electronic properties of graphyne (sp+sp<sup>2</sup>) compounds [View project](#)

# CLASSIFICATION OF CARBON STRUCTURES

**Belenkov E.A.\***

Chelyabinsk State University,  
Bratiev Kashirinih Street 129, Chelyabinsk, 454021 Russia

The last decades discovery of new structural versions of carbon - carbyne, fullerenes, nanotubes etc. dictates necessity of search of formation laws of carbon materials structural versions. The scheme is necessary which would allow to classify various structural updatings. This classification - should explain the existing variety of structural updatings of carbon and predict new carbon allotropes. The classification scheme of today is based on definition of a hybridization degree of carbon atoms making carbon materials [1]. Graphically this scheme represents an analogue of the phase diagram of threefold systems, with the basic hybridization types  $sp$ ,  $sp^2$ ,  $sp^3$  appropriate corresponding to carbyne, graphite and diamond located on its top. The given scheme does not satisfy to the above requirements, as the points on this diagram doesn't have unambiguous sense. These points are possible treat as specifying the ratio of carbon atoms which are in the  $sp$ ,  $sp^2$  and  $sp^3$  of hybridization states, or as the information on the average hybridization of all atoms included in structure of any carbon material. However many carbon materials consist carbon atoms in several various hybridization states, and not only in  $sp$ ,  $sp^2$  and  $sp^3$ , but also in states with intermediate degrees of hybridization  $sp^m$ . For such structures the classification does not work.

The solution of this situation is that the separate classifications - first, structural states of carbon allotropes, secondly, hybridization states of a separate carbon atom are necessary. For construction of the first diagram it is necessary to abstract from an opportunity of existence of various (not discrete) intermediate hybridization states of carbon atoms and to consider that there are only three structural states. And structural states of a separate atom is determined by quantity of covalent bonds (2, 3 or 4) which it forms in the appropriate structure. Then any point on such threefold diagram of states will give the unambiguous information on the ratio of atoms of carbon forming covalent bonds with two, three or

four next atoms for the appropriate structural updating (fig.1).

It is necessary to introduce the second diagram for classification of states, in which there can be a separate atom of carbon (fig.2). The difference in states of atom in various hybridization states consists in a mutual spatial arrangement of 4 valence orbits and their size. Therefore classification scheme should unequivocally set this configuration. If we assume, that the sizes of valence orbits are not independent variables and accepting an axis  $z$  as orientation of one of valence orbit, it is enough to have to six variables for the description of orientation of three others in spherical system of coordinates. Therefore it is impossible to take advantage of the traditional diagram of threefold systems [1] for its construction. It is possible to simplify classification in this case if we consider atom of carbon in a states intermediate between three basic. Actually it is possible to imagine transitions  $sp \rightarrow sp^2$ ,  $sp \rightarrow sp^3$ ,  $sp^2 \rightarrow sp^3$  and return transitions. During transitions the corners between valence orbits can accept different meanings and transition can be carried out on various trajectories in space of six variables, however simplification is possible if as take the valence orbits form basis. Valence orbits can have the symmetric or asymmetric form, in the  $sp$  state two valence orbits are symmetric and two are

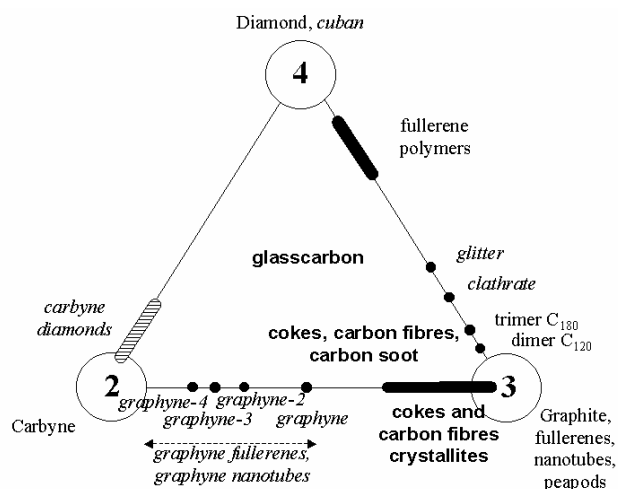


Fig.1. Scheme for classification of carbon materials structures.

\* Fax 7 (3512) 420925 E-mail: belenkov@cgu.chel.su

asymmetric, in the  $sp^2$  state - one is symmetric and three asymmetric, in the  $sp^3$  state - all valence orbits are asymmetric. Therefore intermediate states of atoms can be divided into two classes - states with one symmetric valence orbit and states where completely symmetric valence orbits are not present. We shall call intermediate states between  $sp$  and  $sp^2$  as the first class, between  $sp^2$  and  $sp^3$  the second. As a result the diagram of classification of atomic states should be linear.

The offered scheme of classification allows to classify accurately all known structural versions of carbon materials like carbyne, graphite, diamond, fullerenes, nanotubes, technical materials (carbon fibres, cokes, carbon soot etc.), new structural updatings (peapods, fullerene condensates and polymers, graphynes, nanotubes polymers, glitter and honeycomb structures, clathrate, cuban etc.). Besides it is possible to predict new carbon structures with its help, which is shown on an example of graphyne fullerenes and graphyne nanotubes [2].

## References

1. Heimann R.B., Evsyukov S.E., Koga Y. Carbon allotropes: a suggested classification scheme based on valence orbital hybridization. Carbon 1997; 35, 1654-1657.
2. Belenkov E.A. Graphyne fullerenes and graphyne nanotubes - new structural forms of carbons // Online journal of the United Physical Society of the Russian Federation. 2002. № 1. <http://www.uniphys.ru/journal/N1-02/toparticle/toparticle.htm>

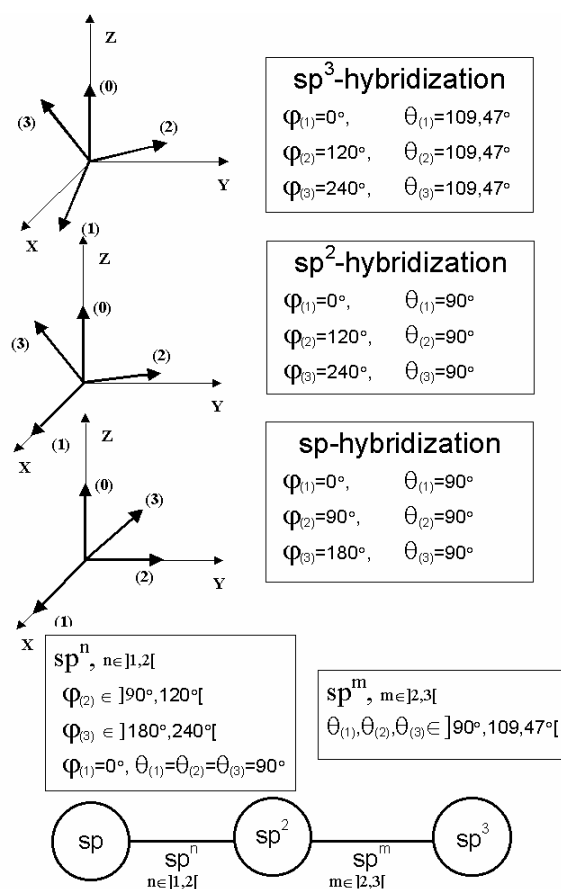


Fig.2. Scheme for classification of separate carbon atom states.

# КЛАССИФИКАЦИЯ УГЛЕРОДНЫХ СТРУКТУР

**Беленков Е.А.\***

Челябинский государственный университет,  
ул. Братьев Кашириных 129, Челябинск. 454021 Россия

Открытие в последние десятилетия новых структурных разновидностей углерода – карбина, фуллеренов, нанотрубок диктует необходимость поиска, закономерностей формирования структурных разновидностей углеродных материалов. Нужна схема, которая позволила бы классифицировать разнообразные структурные модификации. Требования к классификации – она должна объяснять существующее многообразие структурных модификаций углерода и предсказывать новые углеродные аллотропы. Существующая на сегодня классификационная схема основывается на определении степени гибридизации углеродных атомов, составляющих углеродные материалы [1]. Графически эта схема представляет собой аналог фазовой диаграммы состояния тройных систем, в вершинах которой расположены основные типы гибридизации  $sp$ ,  $sp^2$ ,  $sp^3$  соответствующие карбину, графиту и алмазу. Данная схема не удовлетворяет сформулированным выше требованиям, так как точки на этой диаграмме не имеют однозначного смысла. Эти точки можно трактовать как задающие соотношение атомов углерода находящихся в состоянии  $sp$ ,  $sp^2$  и  $sp^3$  гибридизации, либо как информацию о усредненной степени гибридизации всех атомов входящих в состав какого-либо углеродного материала. Однако многие углеродные материалы состоят из углеродных атомов не в одном, а в нескольких различных гибридизованных состояниях, причем не только в  $sp$ ,  $sp^2$  и  $sp^3$ , но и в состояниях с промежуточными степенями гибридизации  $sp^m$ . Например, в молекуле  $C_{70}$  имеется пять различных атомных позиций соответствующих разным гибридизациям. Для таких структур классификация не работает.

Выход из этой ситуации заключается в том, что необходимы отдельные классификации - во-первых, структурного состояния углеродных аллотропов, во-вторых, состояния гибридизации отдельного углеродного атома.

Для построения первой диаграммы необходимо абстрагироваться от возможности существования различных (не дискретных) промежуточных состояний гибридизации углеродных атомов и считать что структурных состояний только три. Причем структурное состояние отдельного атома определять по количеству ковалентных связей (2, 3 или 4), которые он образует в соответствующей структуре. Тогда любая точка на такой тройной диаграмме состояния даст однозначную информацию о соотношении атомов углерода образующих ковалентные связи с двумя, тремя или четырьмя соседними атомами для соответствующей структурной модификации (рис.1).

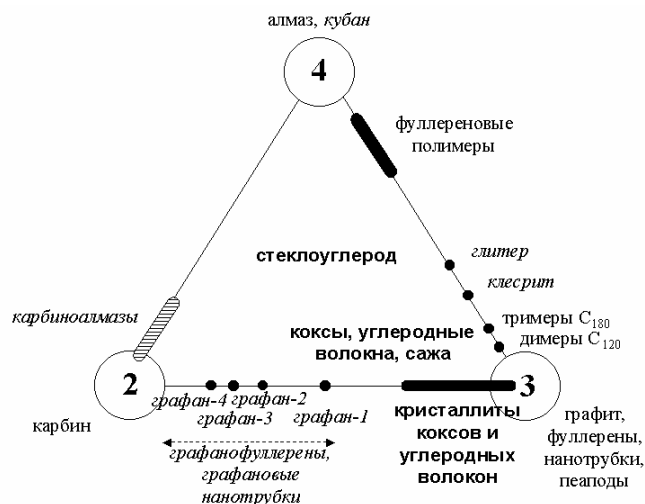


Рис.1. Предлагаемая схема структурной классификации углеродных материалов по соотношению атомов образующих в материале 2, 3 или 4 ковалентных связи (курсивом – гипотетические структуры).

Вторую диаграмму состояния необходимо ввести для классификации состояний, в которых может находиться отдельный атом углерода (рис.2). Различия в гибридизованных состояниях заключаются в разном взаимном пространственном

\* Факс 7 (3512) 420925

E-mail: belenkov@cgu.chel.su

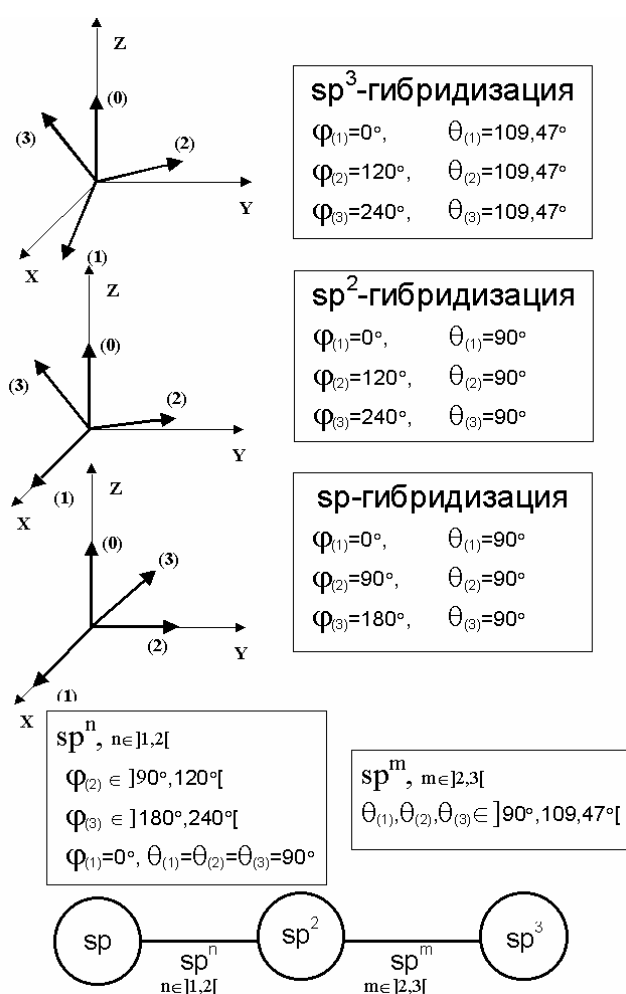


Рис.2. Схема предлагаемой классификации состояний углеродных атомов.

расположении 4 орбиталей и их размере. Поэтому классификационная схема должна однозначно задавать эту конфигурацию. Если допустить, что размеры орбиталей не являются независимыми переменными и принимая в качестве ориентации одной из орбиталей ось z, то для описания ориентации трех остальных относительно основной в сферической системе координат достаточно шести переменных (рис.2). Поэтому воспользоваться для ее построения традиционной диаграммой тройных систем [1] невозможно. Упростить классификацию в этом случае можно, если рассмотреть атом углерода в состоянии промежуточном между тремя основными. Действительно можно представить себе переходы  $sp \rightarrow sp^2$ ,  $sp \rightarrow sp^3$ ,  $sp^2 \rightarrow sp^3$  и обратные переходы. В процессе переходов углы между

орбиталями могут принимать разные значения и сам переход осуществляться по различным траекториям в пространстве шести переменных, однако если за основу принять форму орбиталей то возможно упрощение. Орбитали могут иметь форму симметричной либо асимметричной гантели, в состоянии sp две орбитали симметричные и две асимметричные, в состоянии sp<sup>2</sup> - одна симметричная и три асимметричные, в состоянии sp<sup>3</sup> - все орбитали асимметричны. Поэтому промежуточные состояния атомов можно разделить на два класса - состояния с одной симметричной орбиталью и состояния, в которых полностью симметричных орбиталей нет. Первым классом назовем состояния промежуточные между sp и sp<sup>2</sup>, вторым - между sp<sup>2</sup> и sp<sup>3</sup>. В результате диаграмма классификации атомных состояний должна быть линейной (рис.2).

Предложенная схема классификации позволяет хорошо классифицировать все известные на сегодня структурные разновидности углеродных материалов - карбин, графит, алмаз, фуллерены, нанотрубки, технические материалы (углеродные волокна, коксы, сажи и т.д.), новые структурные модификации (пеаподы, фуллереновые конденсаты и полимеры, графаны, нанотрубочные полимеры, глитер и хонеконб структуры, клесриты, кубаны и т.д.). Кроме того, с ее помощью можно предсказывать новые углеродные структуры, что продемонстрировано на примере графанофуллеренов и графановых нанотрубок [2].

## Литература

1. Heimann R.B., Evsyukov S.E., Koga Y. Carbon allotropes: a suggested classification scheme based on valence orbital hybridization. Carbon 1997; 35, 1654-1657.
2. Беленков Е.А. Графанофуллерены и графановые нанотрубки - новые структурные модификации углерода // Вестник Объединенного Физического Общества Российской Федерации. 2002. № 1. <http://www.uniphys.ru/journal/N1-02/toparticle/toparticle.htm>