Письма в ЖЭТФ, том 113, вып. 3, с. 182 – 188

Межслоевая теплопроводность и термическая устойчивость деформированного двухслойного графена

А. И. Подливаев[1], *К. С. Гришаков, К. П. Катин, М. М. Маслов*

Национальный исследовательский ядерный университет "МИФИ", 115409 Москва, Россия

Поступила в редакцию 7 декабря 2020 г.
После переработки 17 декабря 2020 г.
Принята к публикации 18 декабря 2020 г.

Неортогональный потенциал сильной связи дополнен дальнодействующими слагаемыми, необходимыми для корректного описания межслоевого взаимодействия в двухслойном графене. Методом молекулярной динамики исследован теплообмен между двумя деформированными графеновыми слоями, один из которых изначально охлажден до 0 К, а второй нагрет до $77 \div 7000$ К. Определено характерное время теплообмена в зависимости от начальной температуры нагретого слоя и деформации слоев. Продемонстрировано, что оба фактора существенно влияют на интенсивность межслоевого теплообмена. Установлено, что в течение характерного времени выравнивания температур в системе могут возникать тепловые дефекты различного типа, включая плавление, отслоение и тангенциальный сдвиг нагретого слоя. Показано, что появление тепловых дефектов может увеличить скорость межслоевого теплообмена более чем на порядок величины.

DOI: 10.31857/S1234567821030071

Введение. Двухслойный графен (Bilayer Graphene, BG) представляет собой двумерный углеродный материал, составленный из двух графеновых листов, связанных друг с другом силами ван-дер-Ваальса. Впервые BG был синтезирован на подложке из карбида кремния в 2006 г. [1]. Этот материал обладает настраиваемой запрещенной зоной [1], которая в вертикальном электрическом поле может достигать 250 мэВ, что позволяет использовать BG в качестве основы для полевого транзистора [2, 3]. Кроме того, BG предлагается применять как датчик влажности [4] и как адсорбент ядовитых газов CO, NO, SO_2 и HCN [5]. Поворот графеновых плоскостей друг относительно друга на некоторый угол θ позволяет получать структуры с различными электронными свойствами. Например, структура с "магическим" углом $\theta = 1.1^0$, отнесенная авторами работы [6] к категории "странных металлов", демонстрирует необычную температурную зависимость проводимости [7] и обладает плоскими энергетическими зонами [8].

Температура существенно влияет на электронную структуру и проводимость BG [6, 7, 9]. Кроме того, локальный перегрев может вызывать структурные дефекты в нем. При неодинаковом нагреве слоев BG важное значение приобретает теплообмен между ними. Неодинаковый нагрев возникает, например, при пропускании импульсного тока через BG, один из слоев которого имеет пониженную проводимость из-за функционализации (наличие областей, допированных фтором [10, 11], хлором [12] или водородом [13], может блокировать протекание тока через один из слоев). Протяженная лента BG, имеющая диэлектрический "пояс" гидрированного графена на нижней плоскости будет пропускать ток через верхнюю плоскость, которая только и будет нагреваться. Также односторонний нагрев BG возможен при его облучении потоком частиц, падающих под острым углом и рассеивающихся преимущественно на внешнем слое. В этом случае желательно применение легких частиц (электронов). Применение иона водорода нежелательно из-за возможного гидрирования верхней углеродной плоскости.

В настоящей работе исследуется процесс теплообмена между слоями теплоизолированного BG, не связанного с подложкой. В результате перегрева одного из слоев выше температуры плавления возможны два конкурирующих процесса: термический распад нагретого слоя или его охлаждение ниже температуры плавления за счет теплообмена со вторым слоем. Реализация первого или второго процесса определяется соотношением времени образования тепловых дефектов в перегретом слое и характерного времени межслоевого теплообмена. Эти времена зависят от начальной температуры перегретого слоя и от деформации слоев. В настоящей работе рассмат-

[1] e-mail: AIPodlivayev@mephi.ru

риваются два типа деформации: гидростатическое растяжение в плоскости BG и одноосное сжатие, в результате которого слои становятся гофрированными [14, 15].

Потенциал межатомного взаимодействия. Межатомное взаимодействие описывалось в рамках неортогональной модели сильной связи с параметризацией [16], реализованной в программном пакете NTBM [17]. Эта модель обладает высокой по сравнению с *ab initio* подходами производительностью и пригодна для длительных молекулярно-динамических расчетов. Она корректно описывает углеродные системы с разными типами гибридизации атомов [18] и успешно применялась для исследования термической устойчивости углеродных систем, в том числе на основе графена (см. работы [19–24] и ссылки в них). Однако при определении ее параметров рассматривались только ковалентно связанные системы, а дальнодействующее взаимодействие не учитывалось [16]. Для корректного моделирования BG потенциал [16] должен быть дополнен поправками, учитывающими нековалентное притяжение графеновых слоев.

Энергия взаимодействия слоев может быть определена как

$$E_{\mathrm{AA,AB}} = \frac{1}{N}(E(\mathrm{BG}) - 2E(\mathrm{G})),$$

где $E(\mathrm{BG})$ и $E(\mathrm{G})$ – полные энергии элементарной ячейки BG и изолированного слоя соответственно; N – число атомов в ячейке BG; индексы AA и AB показывают взаимное расположение слоев. Разница энергий конфигураций AA и AB характеризуется безразмерным параметром $\gamma = (E_{\mathrm{AB}} - E_{\mathrm{AA}})/E_{\mathrm{AA}}$. Ван-дер-ваальсовский потенциал, пригодный для исследования межслоевого теплообмена в BG, должен удовлетворять нескольким условиям. Во-первых, он должен обеспечивать устойчивость метастабильной конфигурации AA (в некоторых потенциалах она оказывается неустойчивой, см. работу [25]). Во-вторых, он должен корректно воспроизводить величины E_{AB}, γ и равновесное межслоевое расстояние d. В-третьих, он должен правильно учитывать "жесткость" межслоевой связи, характеризующейся величиной $C_{\mathrm{ZZ}} = d^2 \frac{\partial^2 E_{\mathrm{AB}}}{\partial d^2}$. Кроме того, разумно ограничить радиус действия ван-дер-ваальсового потенциала величиной $2d$ (согласно работе [26], при увеличении межслоевого расстояния от d до $2d$ энергия взаимодействия слоев уменьшается на порядок).

При подборе параметров потенциала мы ориентировались на следующие значения: $E_{\mathrm{AB}} = -25$ мэВ/атом; $\gamma = 0.10$; $d = 3.35$ Å; $C_{\mathrm{ZZ}} = 2.083$ эВ/атом. Значение d соответствует экспериментально измеренному межслоевому расстоянию в графите [27] и теоретическому значению для BG, полученному в рамках теории функционала плотности с поправками ван-дер-Ваальса (vdW-DFT) [28]. Отметим, что другие теоретические подходы предсказывают d в интервале $3.1 \div 3.6$ Å [28]. Значение C_{ZZ} соответствует экспериментальному значению упругой константы C_{33} объемного графита, равному $3.7 \cdot 10^{10}$ Па [29]. Значения E_{AB} и γ, полученные разными авторами, заметно отличаются друг от друга [25, 26, 28]. Так, в работе [25] приведены значения величин E_{AB} и γ, рассчитанные в рамках нескольких *ab initio* и классических подходов: разброс составил $-29.3 \div -50.6$ мэВ/атом и $0.44 \div 1.8$ соответственно. Применение потенциала Леннарда–Джонса приводит к заниженному значению $\gamma = 0.02$. Квантовый метод Монте-Карло предсказывает значения $E_{\mathrm{AB}} = -17.7$ мэВ/атом и $E_{\mathrm{AA}} = -11.5$ мэВ/атом, что соответствует $\gamma = 0.54$ [28]. В работе [26] разные модификации подхода vdW-DFT привели к значениям E_{AB}, равным -47 и -22 мэВ/атом; при этом значения γ составили 0.12 и 0.10. При этом второй подход, разработанный для "слоевой геометрии" ("*layered geometry*" в работе [26]), представляется более адекватным для BG. В объемном графите энергия межслоевого взаимодействия E_{AB} лежит в интервале $-24 \div -50$ мэВ/атом (см. работу [26] и ссылки в ней). Выбранные нами величины $E_{\mathrm{AB}} = -25$ мэВ/атом и $\gamma = 0.10$ представляются разумным компромиссом между значениями, полученными разными методами.

Для учета взаимодействия слоев BG мы модифицировали парный центральный потенциал, действующий между всеми парами атомов углерода и зависящий только от межатомного расстояния r. Модель NTBM уже включает такой потенциал, описывающий классическое отталкивание ионов углерода и имеющий форму $\phi(r) = \phi_0 \exp(-\xi r)$ ($\phi_0 = 2.25$ кэВ; $\xi = 4.913$ Å^{-1} [16]). Наша модификация состояла в добавлении к имеющемуся потенциалу ϕ двух кусочно-непрерывных тригонометрических функций ϕ_1 и ϕ_2 следующего вида:

$$\phi_1(r) = \begin{cases} A_1 \cdot \sin(\pi(r-d)/R_c) \times \\ \times [\cos(\pi(r-d)/R_c) + 1], \ |r-d| \le R_c, \\ 0, \ |r-d| > R_c; \end{cases} \quad (1)$$

$$\phi_2(r) = \begin{cases} A_2 \cdot \cos^2(\pi(r-1.5d)/4d), \ |r-1.5d| \le 0.5d, \\ 0, \ |r-1.5d| > 0.5d. \end{cases}$$

Параметры A_1, A_2 и R_C подбирались так, чтобы получить желаемые значения величин $E_{AB} = -25$ мэВ/атом; $\gamma = 0.10$; $d = 3.35$ Å; $C_{ZZ} = 2.083$ эВ/атом. Это достигается при следующих значениях параметров: $A_1 = -2.694$ мэВ, $A_2 = -1.773$ мэВ, $R_c = 0.8$ Å.

На рисунке 1 представлены графики исходного $\varphi(r)$ и модифицированного $\varphi(r) + \varphi_1(r) + \varphi_2(r)$ пар-

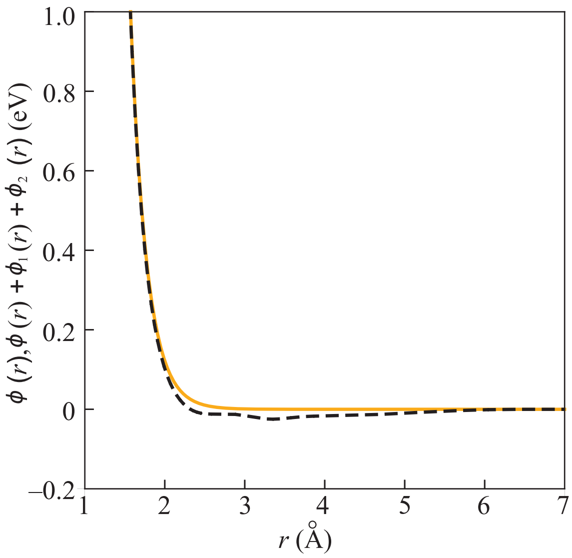

Рис. 1. (Цветной онлайн) Зависимость немодифицированного (сплошная линия) и модифицированного (пунктирная линия) парного потенциала от расстояния между взаимодействующими атомами углерода (см. формулу (1))

ного потенциала. Видно, что на расстояниях ковалентного взаимодействия ($r \leq 2$ Å) различие этих потенциалов незначительно: оно проявляется только на расстояниях, близких к d. Малость вносимой поправки подтверждается и тем, что изменение энергии связи и длин связей в фуллерене C_{60}, обусловленное введенной поправкой, составляет менее 0.3 %. Таким образом, модификация потенциала не влияет на ковалентное взаимодействие, хорошо описываемое в рамках исходной модели NTBM, и корректно учитывает нековалентное взаимодействие между слоями BG.

Молекулярно-динамическое моделирование. Для исследования BG использовалась 2×2 сверхъячейка C_{128}, состоящая из двух слоев C_{64} (см. работу [30]). Граничные условия были периодическими в плоскости BG (X, Y) и свободными в поперечном направлении (Z). Периоды равновесной сверхъячейки оптимизировались вместе с атомными координатами. Молекулярно-динамическая траектория начиналась с оптимизированной конфигурации AB. Начальные скорости атомов одного слоя равнялись нулю, а второго – определялись распределением Максвелла, соответствующего начальной температуре 77, 300, 1000, 3000, 5000 или 7000 K. Также атомам нагретого слоя придавались начальные смещения, соответствующие его начальной температуре. Для каждой начальной температуры проводилось четыре независимых расчета, различающихся исходным стохастическим распределением скоростей и термических смещений атомов нагретого слоя, что позволило определить дисперсии времени межслоевого теплообмена. Моделирование проводилось в рамках микроканонического NVE ансамбля [31] при помощи алгоритма Верле с временным шагом 0.3 фс. Расчет продолжался до выравнивания энергий слоев или до появления очевидных термических дефектов. По завершении молекулярно-динамического расчета, последняя геометрия системы оптимизировалась для выявления накопленных термических дефектов.

Помимо недеформированного BG, рассматривались два типа его деформации: гидростатическое растяжение на 5 % и одноосное сжатие на 10 %. Деформация вводилась путем изменения периодов счетных ячеек BG. Рассмотренное растяжение лежит в области упругости графена [32], что подтвердилось нашими расчетами упругих модулей. Сжатие привело к гофрированию слоев BG без заметного укорочения C–C связей, как это ранее наблюдалось в работах [14, 15].

Результаты. На рисунке 2 показано изменение энергии межслоевого взаимодействия BG как функ-

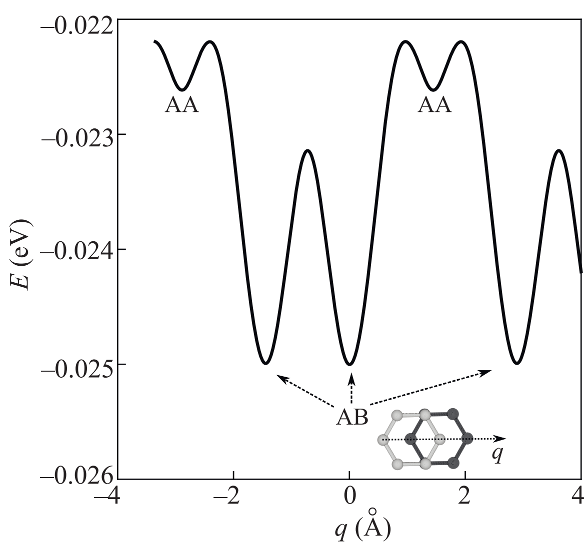

Рис. 2. Зависимость энергии межслоевого взаимодействия в BG при параллельном смещении одного из слоев вдоль C–C связи, направление q которой показано на вставке

ция смещения одного слоя относительно другого в направлении q, соединяющем AB и AA конфигурации. Видно, что конфигурация AB является глобальным, а конфигурация AA – локальным минимумом энергии, что свидетельствует об адекватности модифицированного потенциала.

Рассчитанные нами критическое напряжение и критическая одноосная растягивающая деформация однослойного графена, приводящие к его разрыву, составили 36 Н/м и 18 % соответственно. Это соответствует экспериментально измеренным значениям 25–55 Н/м и 18–31 % [33], а также независимо рассчитанным методом сильной связи значениям 42 Н/м и 27 % [32]. В любом случае, использованная в работе деформация 5 % значительно ниже критической.

Для определения характерного времени межслоевого теплообмена τ мы использовали экспоненциальную интерполяцию временной зависимости кинетической энергии атомов нагретого E_1 и нагревающегося E_2 слоев BG:

$$E_1 = \frac{1}{2}E_0\left(1+\exp\left(-\frac{t}{\tau}\right)\right);$$
$$E_2 = \frac{1}{2}E_0\left(1-\exp\left(-\frac{t}{\tau}\right)\right), \qquad (2)$$

где E_0 – начальная кинетическая энергия нагретого слоя. Величина τ выбиралась исходя из наилучшего соответствия между формулой (2) и зависимостью, полученной из молекулярно-динамического расчета. Характерный пример зависимостей $E_1(t)$ и $E_2(t)$, соответствующих начальной температуре верхнего слоя 5000 K и гидростатической деформации 5 %, представлен на рис. 3. Из рисунка 3 видно, что зависимости хорошо аппроксимируются формулами (2).

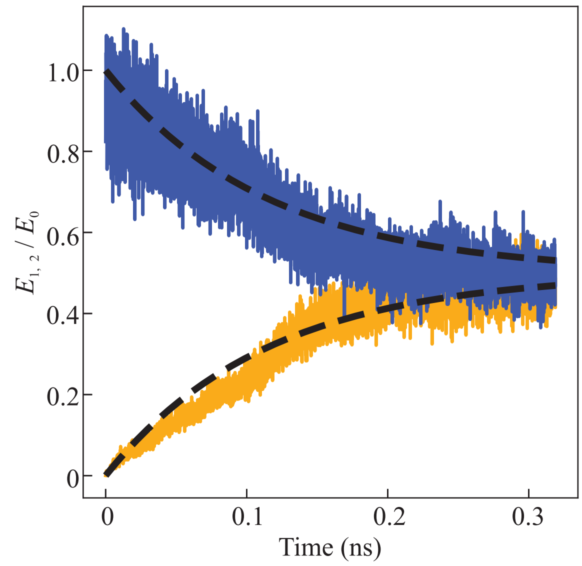

Рис. 3. (Цветной онлайн) Временна́я зависимость кинетической энергии атомов нагретого E_1 и нагревающегося E_2 слоев BG. Обе энергии нормированы на начальную энергию нагретого слоя E_0. Черные пунктирные жирные линии – экспоненциальная интерполяция по формулам (2)

На рисунке 4 представлено характерное время межслоевого теплообмена τ как функция начальной температуры нагретого слоя и деформации BG. Видно, что оба фактора изменяют величину τ в несколько раз. Понижение τ для бездефектного и растянутого BG при уменьшении начальной температуры от 300 до 77 K (рис. 4a) объясняется ослаблением ангармонизма межслоевого взаимодействия. Повышение теплопроводности при низких температурах характерно для бездефектных трехмерных кристаллов, включая алмаз, сапфир, кварц и алюминий (см. [34, 35] и ссылки в них). Принципиально другая зависимость наблюдается в гофрированном BG, одноосно сжатом на 10 %. При уменьшении температуры от 300 до 77 K время теплообмена возрастает в $\sim$2.5 раза (см. рис. 4b). Этот эффект также связан с ангармонизмом; однако, в BG он не является слабым и специфически зависит от температуры. Одноосно сжатый гофрированный BG находится на грани расслоения: вследствие сжатия энергия E_{AB} и жесткость C_{ZZ} межслоевого взаимодействия уменьшаются почти вдвое, а расстояние d возрастает до 3.78 Å. Из-за удаленности слоев теплообмен при 77 K почти прекращается. Лишь при температуре 300 K амплитуда тепловых колебаний атомов нагретого слоя становится достаточной для того, чтобы они могли взаимодействовать со вторым слоем.

В интервале $T = 300-5000$ K наблюдается слабая температурная зависимость времени τ. Существенное падение τ в экстремальном диапазоне $5000 \div 7000$ K связано с возникновением в нагретом слое множества тепловых дефектов, вплоть до его разрушения. Этот диапазон лежит выше температуры плавления графена. Расщепление графита на графеновые слои происходит при $\sim$3000 K [36], а плавление графена происходит вблизи 5000 K ($\sim$4900 K [37], $\sim$4510 K [38], $\sim$5100 K [39]). При начальной температуре верхнего слоя в диапазоне $5000 \div 7000$ K возможны два конкурирующих процесса: распад BG за счет расслоения или плавления нагретого слоя или его охлаждение вдвое за счет теплообмена с нижним слоем, после чего термический распад BG радикально замедлится. В предположении постоянной теплоемкости в случае сохранения структуры при начальной температуре 7000 K, конечная температура каж-

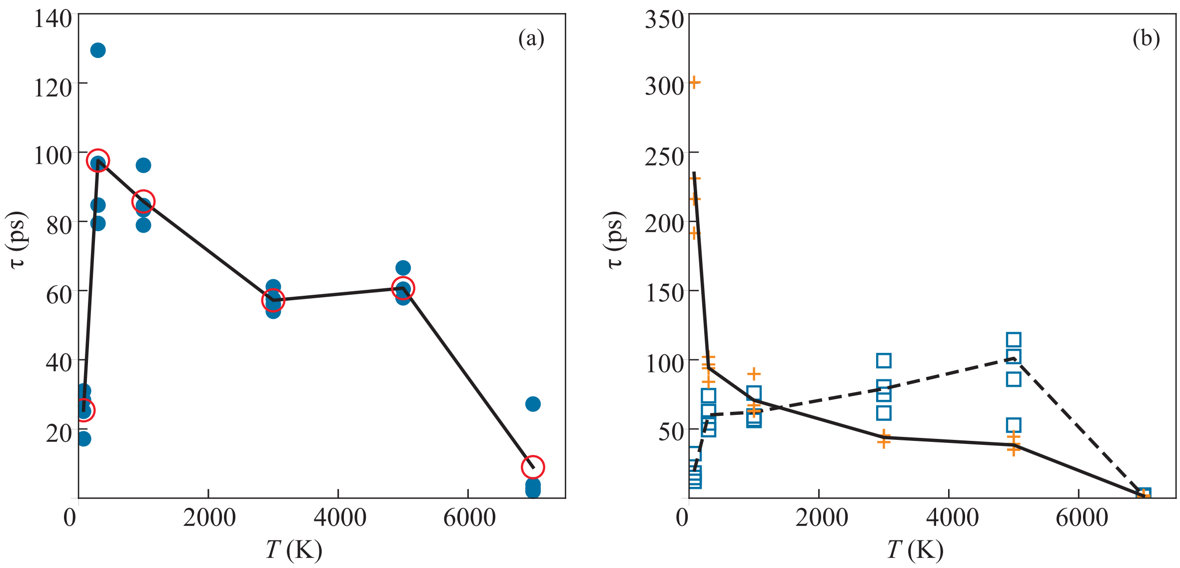

Рис. 4. (Цветной онлайн) Температурная зависимость характерного времени межслоевого теплообмена в ненапряженном (a) и деформированном (b) BG. (a) – Маленькие сплошные кружки – время теплообмена для четырех вариантов начальных условий; большие кружки и сплошная линия – усредненное по четырем вариантам значение этого времени. (b) – Квадраты и пунктирная линия – аналогичные характеристики для растянутого BG (двухосное растяжение на 5 %); кресты и сплошная линия – аналогичные характеристики для гофрированного BG (одноосное сжатие на 10 %)

дой плоскости будет равна 3500 K, что может привести только к расслоению BG, но не к его плавлению. Поскольку при таком нагреве выравнивания температур не происходит, а происходит плавление верхней плоскости, исследовать более высокие начальные температуры не имеет смысла.

Существенное переупорядочение атомов в процессе выравнивания энергий слоев BG наблюдалось при температурах 5000 ÷ 7000 K. При 5000 K нагретый слой не успевал разрушиться, однако часто наблюдался его сдвиг относительно второго слоя. В ненапряженном и растянутом графене в результате сдвига система переходила из конфигурации AB в соседнюю конфигурацию, также имеющую тип AB (только один раз наблюдался переход в конфигурацию AA, что объясняется метастабильностью этой конфигурации). В гофрированном BG во всех случаях наблюдался сильный сдвиг вдоль направления гребня гофра. Высокая относительная подвижность слоев гофрированного BG обусловлена существенным ослаблением межплоскостного взаимодействия. При 7000 K в ненапряженном и в обоих деформированных образцах BG происходит накопление термических дефектов, аналогичных дефектам, возникающим при плавлении графена [39]. В нагретом слое образуются смежные многоатомные кольца. По мере накопления дефектов значительная часть атомов приобретает *sp*-гибридизацию. Атомы нагретого слоя формируют "клубок" карбиновых нитей и мелких углеродных фрагментов (рис. 5a). Рисунок 5b иллюстрирует процесс расслоения BG при 7000 K: отделившийся верхний слой находится в состоянии распада.

В работе [40] обсуждалась возможность ковалентного связывания слоев BG: кромки отверстий в разных слоях могут соединяться между собой. В настоящей работе ни при каких условиях не наблюдалось ковалентное связывание слоев, несмотря на существование дефектов в разрушающемся слое и высокую кинетическую энергию, позволяющую атомам близко подходить друг к другу. Видимо, это связано с отсутствием дефектов во втором слое BG.

Заключение. Показана сильная зависимость интенсивности межслоевого теплообмена в BG от начальной температуры нагретого слоя и характера деформации системы. Гидростатическое растяжение в пределах 5 % является упругим, при этом энергия межслоевого взаимодействия и межслоевое расстояние практически не меняются. При одноосном сжатии на 10 % BG становится гофрированным, межслоевое расстояние возрастает, а энергия и жесткость межслоевого взаимодействия уменьшаются в ∼ 2 раза. При понижении начальной температуры от комнатной до температуры жидкого азота межслоевая теплопроводность ненапряженного и растянутого BG возрастает в 3–4 раза. В сжатом (гофрированном) образце, который находится на пороге расслоения, наблюдается обратная зависимость:

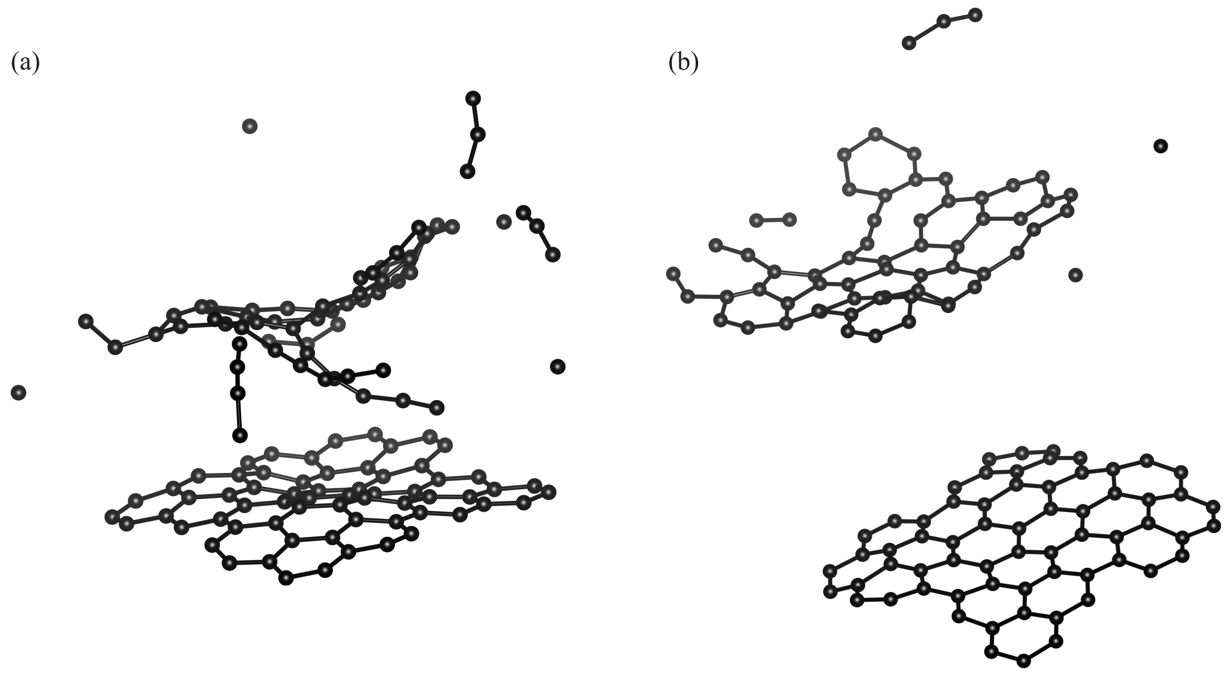

Рис. 5. Термические дефекты в BG при начальной температуре нагретого слоя 7000 K: плавление нагретого слоя (a) и расслоение системы (b)

при понижении температуры до 77 K теплопроводность падает в 2.5 раза. В температурном интервале 300–5000 K наблюдается слабая зависимость межслоевой теплопроводности от температуры. При начальной температуре нагретого слоя до 3000 K структурные дефекты не успевают возникнуть в нем в течение времени, необходимого для теплообмена. При начальной температуре 5000 K часто наблюдается параллельный сдвиг слоев без расслоения BG. В сжатом образце параллельный сдвиг происходит только вдоль направления гофра. При начальной температуре 7000 K наблюдаются как накопление структурных дефектов, так и плавление, а в некоторых случаях – отслоение нагретого слоя. Плавление нагретого слоя приводит к существенному усилению межслоевого теплообмена, из-за чего межслоевая теплопроводность возрастает на порядок при увеличении начальной температуры нагретого слоя от 5000 до 7000 K. Учитывая существенное влияние дефектов на интенсивность межслоевого теплообмена, представляет интерес провести аналогичное исследование для дефектного BG и для двухслойного Стоун-Уэльсовского графена – недавно открытого квазидвумерного кристалла графена, содержащего в своей структуре регулярную решетку дефектов [41].

Работа выполнена при финансовой поддержке Гранта Президента Российской Федерации # МК-722.2020.2 и Министерства науки и высшего образования РФ в рамках Программы повышения конкурентоспособности НИЯУ МИФИ.

---

1. T. Ohta, A. Bostwick, T. Seyller, K. Horn, and E. Rotenberg, Science **313**, 951 (2006).
2. Y. Zhang, T. Tang, C. Girit, Z. Hao, M. C. Martin, A. Zettl, M. F. Crommie, Y. R. Shen, and F. Wang, Nature **459**, 820 (2009).
3. G. Fiori and G. Iannaccone, IEEE Electron Device Letters **30**, 261 (2009).
4. M.-C. Chen, C.-L. Hsu, and T.-J. Hsueh, IEEE Electron Device Letters **35**, 590 (2014).
5. Y. Tang, Z. Liu, Z. Shen, W. Chen, D. Ma, and X. Dai, Sens. Actuator B: Chem. **238**, 182 (2017).
6. Y. Cao, D. Chowdhury, D. Rodan-Legrain, O. Rubies-Bigorda, K. Watanabe, T. Taniguchi, T. Senthi, and P. Jarillo-Herrero, Phys. Rev. Lett. **124**, 076801 (2020).
7. Y. Cao, V. Fatemi, S. Fang, K. Watanabe, T. Taniguchi, E. Kaxiras, and P. Jarillo-Herrero, Nature **556**, 43 (2018).
8. Y. Choi, J. Kemmer, Y. Peng, A. Thomson, H. Arora, R. Polski, Y. Zhang, H. Ren, J. Alicea, G. Refael, F. von Oppen, K. Watanabe, T. Taniguchi, and S. Nadj-Perge, Nat. Phys. **15**, 1174 (2019).
9. J. B. Oostinga, H. B. Heersche, X. Liu, A. F. Morpurgoand and L. M. K. Vandersypen, Nature Mater. **7**, 151 (2008).
10. J. T. Robinson, J. S. Burgess, C. E. Junkermeier, S. C. Badescu, T. L. Reinecke, F. K. Perkins,

M. K. Zalalutdniov, J. W. Baldwin, J. C. Culbertson, P. E. Sheehan, and E. S. Snow, Nano Lett. **10**, 3001 (2010).
11. K. S. Grishakov, K. P. Katin, V. S. Prudkovskiy, and M. M. Maslov, Applied Surface Science **463**, 1051 (2019).
12. B. Li, L. Zhou, D. Wu, H. Peng, K. Yan, Y. Zhou, and Z. Liu, ACS NANO **5**, 5957 (2011).
13. D. C. Elias, R. R. Nair, T. M. G. Mohiuddin, S. V. Morozov, P. Blake, M. P. Halsall, A. C. Ferrari, D. W. Boukhvalov, M. I. Katsnelson, A. K. Geim, and K. S. Novoselov, Science **323**, 610 (2009).
14. J. A. Baimova, S. V. Dmitriev, K. Zhou, and A. V. Savin, Phys. Rev. B **86**, 035427 (2012).
15. S. V. Dmitriev, J. A. Baimova, A. V. Savin, and Y. S. Kivshar, Comput. Mater. Sci. **53**, 194 (2012).
16. M. M. Maslov, A. I. Podlivaev, and K. P. Katin, Molecular Simulation **42**, 305 (2016).
17. K. P. Katin, K. S. Grishakov, A. I. Podlivaev, and M. M. Maslov, J. Chem. Theory Comput. **16**, 2065 (2020).
18. K. P. Katin and M. M. Maslov, Phys. and Chem. Solids **108**, 82 (2017).
19. K. P. Katin, S. A. Shostachenko, A. I. Avhadieva, and M. M. Maslov, Adv. Chem. Phys. **2015**, 506894 (2015).
20. А. И. Подливаев, Л. А. Опенов, ФТТ **60**, 160 (2018).
21. Л. А. Опенов, А. И. Подливаев, ФТТ **60**, 795 (2018).
22. Л. А. Опенов, А. И. Подливаев, Письма в ЖЭТФ **109**, 746 (2019).
23. Л. А. Опенов, А. И. Подливаев, ФТП **53**, 724 (2019).
24. И. Ю. Долинский, К. П. Катин, К. С. Гришаков, В. С. Прудковский, Н. И. Каргин, М. М. Маслов, ФТТ **60**, 816 (2018).
25. I. V. Lebedova, A. A. Knizhnik, A. M. Popov, Y. E. Lozovik, and B. V. Potapkin, Phys. Chem. Chem. Phys. **13**, 5687 (2011).
26. S. D. Chakarova-Käck, A. Vojvodic, J. Kleis, P. Hyldgaard, and E. Schröder, New J. Phys. **12**, 013017 (2010).
27. R. Al-Jishi and G. Dresselhaus, Phys. Rev. B **26**, 4514(1982).
28. E. Mostaani and N. D. Drummond, Phys. Rev. Lett. **115**, 115501 (2015).
29. Н. А. Абдуллаев, ФТТ **48**, 623 (2006).
30. А. И. Подливаев, Письма в ЖЭТФ **111**, 728 (2020).
31. E. M. Pearson, T. Halicioglu, and W. A. Tiller, Phys. Rev. A **32**, 3030 (1985).
32. E. Cadelano, P. L. Palla, S. Giordano, and L. Colombo, Phys. Rev. Lett. **102**, 235502 (2009).
33. C. Lee, X. Wei, W. Kysar, and J. Hone, Science **321**, 385 (2008).
34. G. Fugallo, M. Lazzeri, L. Paulatto, and F. Mauri, Phys. Rev. B **88**, 045430 (2013).
35. F. Pobell, *Matter and Methods at Low Temperatures*, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg (2007), p. 64.
36. F. Colonna, J. H. Los, A. Fasolino, and E. J. Meijer, Phys. Rev. B **80**, 134103 (2009).
37. K. V. Zakharchenko, A. Fasolino, J. H. Los, and M. I. Katsnelson, J. Phys.: Condens. Matter **23**, 202202 (2011).
38. J. H. Los, K. V. Zakharchenko, M. I. Katsnelson, and A. Fasolino, Phys. Rev. B **91**, 045415 (2015).
39. Л. А. Опенов, А. И. Подливаев, ФТТ **58**, 821 (2016).
40. L. A. Chernozatonskii, V. A. Demin, and Ph. Lambin, Phys. Chem. Chem. Phys. **18**, 27432 (2016).
41. H. Yin, X. Shi, C. He, M. Martinez-Canales, J. Li, C. J. Pickard, C. Tang, T. Ouyang, C. Zhang, and J. Zhong, Phys. Rev. B **99**, 041405 (2019).