Письма в ЖЭТФ, том 114, вып. 3, с. 172 – 178

Двухслойный Стоун-Уэльсовский графен: структура, устойчивость и межслоевая теплопроводность

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

[+]*Национальный исследовательский ядерный университет "МИФИ", 115409 Москва, Россия*

[*]*Научно-исследовательский институт Проблем развития научно-образовательного потенциала молодежи, 119620 Москва, Россия*

Поступила в редакцию 10 июня 2021 г.
После переработки 22 июня 2021 г.
Принята к публикации 6 июля 2021 г.

В рамках неортогональной модели сильной связи исследована структура, устойчивость и межслоевая теплопроводность двухслойного Стоун-Уэльсовского графена. Среди нескольких метастабильных изомеров, отличающихся взаимным расположением слоев, выделена самая устойчивая конфигурация. Установлено, что рассматриваемая структура характеризуется более сильным межслоевым взаимодействием, чем двухслойный графен, но ее жесткость в вертикальном направлении на 17 % меньше. Методом молекулярной динамики исследован теплообмен между двумя слоями Стоун-Уэльсовского графена, один из которых изначально охлажден до 0 K, а второй нагрет до $77 \div 7000$ K. Определена зависимость межслоевой теплопроводности от деформации исследуемой двухслойной структуры. Показано, что интенсивность межслоевого теплообмена сильно зависит от температуры и деформации. Выявлены и объяснены особенности межслоевого взаимодействия в двухслойном Стоун-Уэльсовском графене, не характерные для обычного двухслойного графена.

DOI: 10.31857/S1234567821150064

Введение. Двухслойный графен (Bilayer Graphene, BG) представляет собой двумерный углеродный материал, состоящий из двух параллельно расположенных графеновых слоев. Фотоэмиссионные эксперименты доказали возможность управлять электронной структурой BG [1]. Поворот одного из слоев BG относительно другого на некоторый угол θ порождает семейство двухслойных материалов с очень необычными зонными структурами. Например, BG с $\theta = 1.1^\circ$, отнесенный в работе [2] к категории "странных металлов", проявляет сверхпроводящие свойства [3, 4]. Возможность управления межзонной щелью при помощи вертикального электрического поля делает BG перспективным материалом для транзисторов нового типа [5, 6]. Большая удельная поверхность и повышенная по сравнению с графеном жесткость BG позволяют использовать его в качестве датчика влажности [7] или поглотителя ядовитых газов [8]. Внешнее давление, гидрогенизация или фторирование позволяют получать из BG диаманы – необычные двухслойные материалы с ковалентно связанными слоями [9].

К настоящему времени открыто множество аллотропов графена, которые представляют собой sp^2- или sp/sp^2-гибридизованные углеродные листы одноатомной толщины. К таким структурам можно отнести азуграфен [10], ψ-графен [11], T-графен [12], фаграфен [13], пентаграфен [14], модификации графиновых слоев [15] и др. Они притягиваются друг к другу за счет сил ван-дер-Ваальса и могут формировать двухслойные структуры, подобные BG. Примером такой структуры является двухслойный азуграфен, предсказанный и теоретически исследованный в 2019 г. в работе [10]. Среди известных аллотропов графена наибольшей устойчивостью обладает Стоун-Уэльсовский графен [16]. Расчеты из первых принципов предсказывают, что его энергия всего на 149 мэВ/атом выше энергии графена [16]. Неортогональная модель сильной связи [17] дает близкое значение 161 мэВ/атом [18]. Элементарная ячейка Стоун-Уэльсовского графена [19] может быть получена из 16-атомной ячейки графена поворотом центральной C–C связи на 90° (см. рис. 1).

Потенциальная возможность синтеза SW-графена следует из его высокой термодинамической устойчивости, наибольшей среди всех двумерных аллотропов углерода (после графена) [16]. В работе [20] теоретически обоснован механизм образования устойчивых углеродных структур низкой размерности, ключевую роль в котором играет миграция

1)e-mail: ksgrishakov@yahoo.com

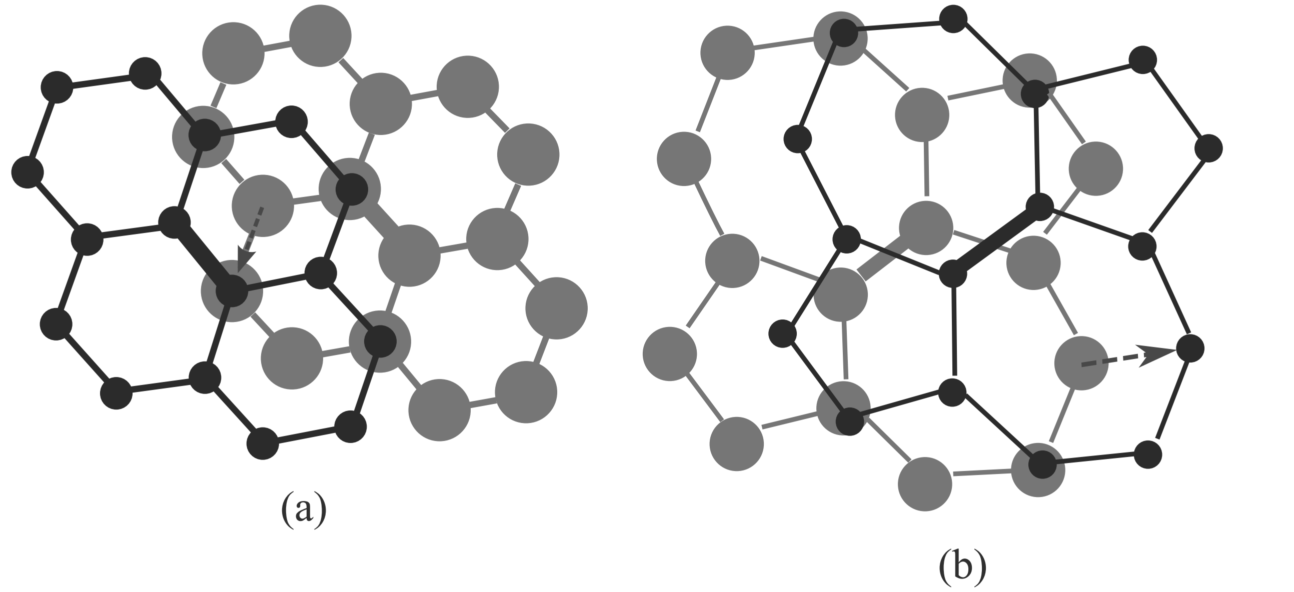

Рис. 1. Фронтальный вид структуры АВ двухслойного графена (a) и двухслойного Стоун-Уэльсовского графена (b). Серыми большими кружками отмечены атомы нижней, малыми черными – верхней графитовой плоскости. Пунктирными стрелкой обозначено направление относительного смещения графеновых плоскостей, переводящего конфигурацию АВ в АА

дефектов Стоуна-Уэльса. Известны способы понижения энергии этих дефектов: деформация [21] и наличие адсорбировавшегося водорода [22]. К объединению дефектов Стоуна-Уэльса в плотные скопления может приводить их взаимное притяжение на больших расстояниях, вызванное поперечным искривлением графенового листа вокруг этих дефектов [23, 24].

В настоящей работе рассматривается структура, устойчивость и межслоевая теплопроводность двухслойного Стоун-Уэльсовского графена (Bilayer Stone-Wales Graphene, BSWG).

Однородный нагрев двухслойного графена существенно влияет на его электронную систему [2, 3, 25]. Процессы межслоевого теплообмена играют большую роль при неравномерном нагреве слоев. Такой нагрев возникает, например, при облучении структуры потоком быстрых заряженных частиц, падающих под острым углом и рассеивающихся на верхнем слое. Отметим, что в экспериментах по импульсному лазерному нагреву многослойных нанотрубок характерная плотность энергии составляет ~ 1 Дж/см^2 [26, 27], что соответствует ~ 150 мэВ/атом. Неодинаковый нагрев слоев также может быть получен, например, при пропускании импульсного тока через двухслойную систему, один из слоев которой имеет пониженную проводимость из-за наличия областей, допированных фтором [28, 29], хлором [30] или водородом [31], что может блокировать протекание тока через этот слой.

В нашей работе [32] рассматривался процесс теплообмена между слоями BG. Было показано существование двух конкурирующих процессов, происходящих в BG при нагреве одного из слоев. При высоких температурах преобладал термический распад нагретого слоя или его отслоение. При более низких температурах нагретый слой охлаждался за счет межслоевого теплообмена, так что BG не разрушался. Согласно выводам работы [32], интенсивность межслоевого теплообмена в BG существенно зависит от начальной температуры нагретого слоя и резко возрастает вблизи температуры плавления графена.

Из-за своей напряженной структуры, включающей пяти- и семиугольные циклы, Стоун-Уэльсовский графен не достигает исключительных механических характеристик, характерных для графена [33, 34]. Моделирование предсказывает, что бездефектный графен плавится при $4500 \div 5100$ К [35–37], в то время как температура плавления Стоун-Уэльсовского графена оценивается в 3800 К [17]. Согласно теоретическим расчетам, модуль Юнга и коэффициент Пуассона Стоун-Уэльсовского графена равны, соответственно, 857 ГПа и 0.39 [17]. Эти величины отличаются от экспериментально измеренных модуля Юнга графена (1.0 ± 0.1 ТПа [38]) и коэффициента Пуассона графита (0.16 [39]). Более низкая устойчивость и механическая прочность Стоун-Уэльсовского графена, а также особенности межслоевого взаимодействия в нем обуславливают отличия свойств BSWG и BG. Настоящая работа посвящена выявлению и объяснению этих отличий.

Постановка задачи. Мы рассматривали теплоизолированный BSWG, не связанный с подложкой. Использовались периодические граничные условия в плоскости листов BSWG и свободные условия в перпендикулярном направлении. Транслируемая ячейка содержала по 32 атома (по 16 атомов углерода в каждом слое), как показано на рис. 1. Размеры ячейки и сдвиг одного слоя относительно другого оптимизировались, а угол относительного поворота слоев друг относительно друга оставался равным нулю.

Молекулярно-динамическое моделирование межслоевой теплопроводности проводилось с использованием микроканонического ансамбля [40]. В начальный момент времени атомы одного слоя были неподвижны, а атомам второго слоя сообщались случайные скорости, распределенные по закону Максвелла и соответствующие температурам 77, 300, 1000, 3000, 5000 или 7000 К, как это делалось в работе [32]. Наивысшая рассматриваемая температура немного ниже удвоенной температуры плавления монослоя, благодаря чему возможны три конкурирующих процесса: расслоение, плавление нагретого слоя или его охлаждение за счет передачи энергии другому слою. Начальный импульс системы выбирался равным нулю. В процессе движения атомов импульс и полная энергия системы не менялись. Этот подход известен как "теория ограниченного теплового резервуара" (*finite heat bath theory*) [41, 42]. Движения атомов рассчитывались методом Верле с шагом 0.3 фс. Характерное время τ выравнивания температуры слоев определялось алгоритмом, описанным в работе [32]. Этот алгоритм основан на экспоненциальной интерполяции временной зависимости разности микроканонических температур двух слоев. Декремент экспоненты определялся методом наименьших квадратов. Для каждой температуры рассчитывалось 4 варианта движения системы, которые различались начальным стохастическим распределением скоростей и термических смещений атомов. Это позволило определить дисперсию рассматриваемых физических величин.

Во всех расчетах использовался межатомный потенциал на основе неортогональной модели сильной связи [18], менее точной, чем методы *ab initio*, но превосходящей их по быстродействию. Программная реализация модели [18] опубликована в работе [43]. Эта модель демонстрирует хорошее согласование с результатами теории функционала плотности для структур, содержащих атомы углерода в состояниях с различными типами гибридизации [44]. Кроме того, она успешно применялась для исследования термической устойчивости фуллеренов, графена и похожих углеродных систем (см., например, работы [17, 34, 36, 45–47] и ссылки в них). Для описания ван-дер-Ваальсова межслоевого взаимодействия использовались поправки, предложенные в работе [32] и хорошо воспроизводящие экспериментально измеренные межслоевые расстояния и модуль упругости C_{zz} графита.

Моделирование межплоскостного теплообмена проводилось для ненапряженной (компоненты тензора деформаций $U_{XX} = U_{YY} = 0$), двуосно растянутой ($U_{XX} = U_{YY} = 0.05$) и одноосно сжатой ($U_{XX} = -0.1$, $U_{YY} = 0$) структуры BSWG. Выбранная растягивающая деформация (5 %) лежит в области упругости графена [48]. Одноосное сжатие на 10 % приводит к гофрированию графенового листа [32, 49]. Интерес к исследованию гофрированного образца, сжатого вдоль только одной оси, обусловлен двумя причинами. Во-первых, при такой деформации возможен равномерный нагрев верхнего слоя облучением образца быстрыми частицами, падающими под острым углом на поверхность BSWG параллельно образовавшимся гофрам. В этом случае отсутствуют участки "тени", что способствует равномерному нагреву. Во-вторых, из данных экспериментальной работы [50] следует, что выпуклые участки гофров адсорбируют атомы водорода интенсивнее вогнутых участков. Это дает возможность формировать продольные диэлектрические полосы водорода на графене, что может быть полезно для приложений графеновой электроники.

Энергия межслоевого взаимодействия E_{lay} в двухслойной структуре, содержащей N атомов углерода, определялась по формуле $E_{\text{lay}} = (E(bilayer) - 2E(monolayer))/N$.

Результаты. Статические характеристики. На рисунке 1a и b изображены 16-атомные периодические ячейки BG и BSWG. Как известно, для BG конфигурация AA соответствует локальному минимуму энергии, а AB – глобальному минимуму (см. [32, 51] и ссылки в них). Для BSWG мы рассмотрели всевозможные вектора относительного смещения слоев, что позволило определить его оптимальную конфигурацию, которая оказалась подобна AB (см. рис. 1b). Существуют также несколько метастабильных конфигураций BSWG с более высокой потенциальной энергией. На рисунке 2 представлены линии уровней потенциальной энергии BSWG (в единицах

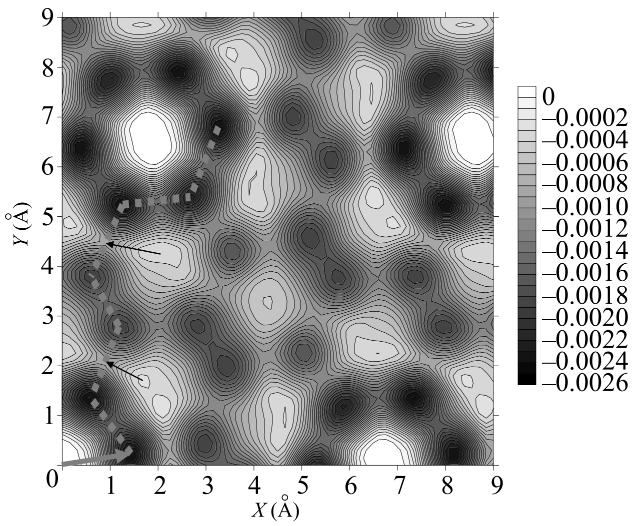

Рис. 2. Линии уровней потенциальной энергии (эВ/атом) при смещении верхнего слоя Стоун-Уэльсовского графена относительно нижнего на вектор трансляции с координатами (X, Y)

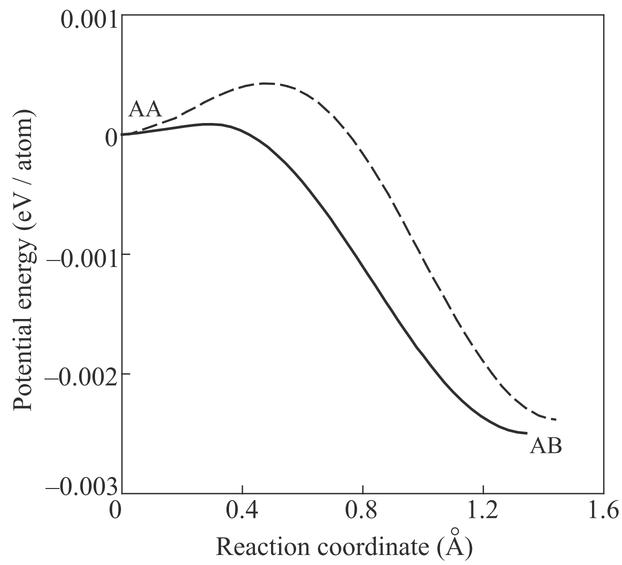

Рис. 3. Зависимость энергии межслоевого взаимодействия двухслойного графена (пунктирная линия) и Стоун-Уэльсовского графена (сплошная линия) при параллельном смещении верхней графеновой плоскости над нижней вдоль вектора трансляции, переводящего конфигурацию AA в AB

эВ/атом) в зависимости от горизонтального смещения слоев друг относительно друга. За нулевое значение потенциальной энергии принята энергия конфигурации AA, когда один слой располагается точно над другим, а расстояние между уровнями равно 0.1 мэВ/атом. Затемненные области соответствуют стабильным и метастабильным конфигурациям. Жирной стрелкой серого цвета отмечен вектор, переводящий структуру AA в AB. Вследствие симметрии структуры и периодических граничных условий на рис. 2 попадают несколько эквивалентных конфигураций AA и AB. Стабильная конфигурация AB и метастабильные конфигурации ниже по энергии конфигурации AA на $\sim$2.5 и $\sim$1.5 мэВ/атом соответственно.

На рисунке 3 представлены зависимости потенциальной энергии взаимодействия слоев BG и BSWG в зависимости от смещения вдоль вектора, переводящего метастабильные конфигурации AA этих структур в стабильные конфигурации AB. На этом рисунке видно, что термодинамическая устойчивость конфигурации AA почти одинакова для BG и BSWG: энергетическое отличие от конфигурации AB составляет 2.5 и 2.4 мэВ/атом соответственно. Однако энергетические барьеры, препятствующие переходу от AA к AB конфигурации, сильно различаются: они равны 0.42 и 0.08 мэВ/атом, соответственно. Таким образом, слои BSWG легче "скользят" друг относительно друга. На рисунке 2 серой пунктирной линией обозначена траектория, при движении по которой верхний слой BSWG перейдет из конфигурации AB в эквивалентную конфигурацию, отличающуюся сдвигом на вектор трансляции слоя. Черными стрелками обозначены равные потенциальные барьеры, разделяющие две эквивалентные конфигурации AB. Высота этих барьеров для BSWG и BG равна 1.9 и 2.8 мэВ/атом соответственно.

Расчет показал, что межслоевое расстояние в BG и BSWG зависит от деформации этих структур. Межслоевые расстояния в рассматриваемых ненапряженном, растянутом и гофрированном BSWG равны 3.35, 3.34 и 3.64 Åсоответственно. В BG эти расстояния составляют 3.35, 3.33 и 3.78 Å. Модуль упругости BSWG C_{ZZ}, определяемый как вторая производная энергии межслоевого взаимодействия по межслоевому расстоянию, равен 1.73 эВ/атом. Это несколько ниже, чем аналогичная величина в BG (2.083 эВ/атом). Значения $E_{\rm lay}$ в ненапряженном, растянутом и гофрированном BSWG равны 23.8, 21.6 и 20.8 мэВ/атом соответственно. Аналогичные величины для BG составляют 25, 23 и 13 мэВ/атом, соответственно [32]. Отличительной особенностью BSWG оказалось то, что энергия межслоевого взаимодействия почти не ослабевает при сжатии.

Результаты. Динамические характеристики. На рисунке 4 и в табл. 1 представлены значения характерного времени межслоевого теплообмена в ненапряженных и деформированных BSWG в зависимости от начальной температуры нагретого слоя.

Таблица 1. Характерное время межслоевого теплообмена и распада (пс) двухслойного графена [32] и двухслойного Стоун-Уэльсовского графена. Время распада приведено в скобках для тех температур, при которых он наблюдался

	T (K)	77	300	1000	3000	5000	7000
$U_{XX} = 0$ $U_{YY} = 0$	BSWG	78.9 ± 13.9	58.0 ± 5.6	38 ± 2.5	38.2 ± 4.6	48.8 ± 4.9	1.4 ± 0.3 $1(0.6 \pm 0.1)$
	BG [32]	25.4 ± 5.2	97.6 ± 19.5	85.8 ± 6.4	57.2 ± 2.6	60.7 ± 3.5	2.7 ± 0.8 (0.9 ± 0.3)
$U_{XX} = 0.05$ $U_{YY} = 0.05$	BSWG	56.0 ± 10.7	51.2 ± 5.8	56.2 ± 3.5	55.1 ± 13.9	3.8 ± 0.8 $(1.5 \pm 0.3$	0.8 ± 0.15 (0.4 ± 0.1)
	BG [32]	19.4 ± 7.7	60.1 ± 9.3	62.1 ± 8.1	79.1 ± 13.6	101 ± 11.7	1.7 ± 0.3 (1.8 ± 0.3)
$U_{XX} = -0.1$ $U_{YY} = 0.0$	BSWG	72.3 ± 12.1	61.2 ± 5.7	47.9 ± 1.5	33.6 ± 3.5	20.4 ± 5.1 (5.6 ± 0.6)	1.2 ± 0.5 (0.5 ± 0.1)
	BG [32]	235 ± 41	94.2 ± 6.5	70.7 ± 11.1	43.9 ± 2.0	38.4 ± 3.9	1.6 ± 0.4 (0.4 ± 0.1)

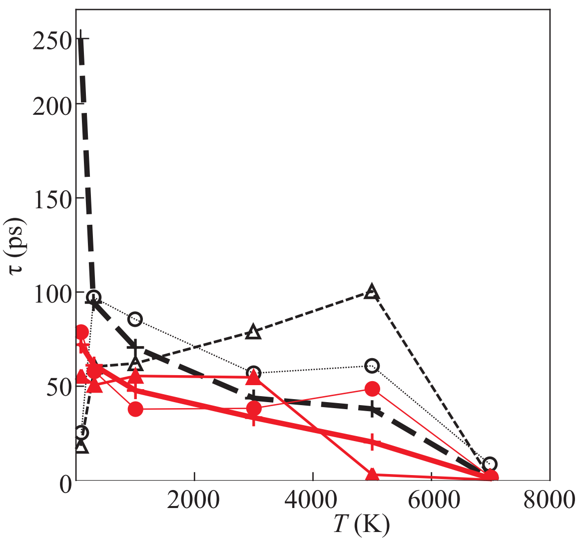

Рис. 4. (Цветной онлайн) Температурные зависимости времени межплоскостной теплопередачи в двухслойном графене (пунктирные черные линии) и Стоун-Уэльсовском графене (сплошные красные линии). Маленькие кружки и тонкие линии – время теплопередачи в ненапряженном кристалле. Треугольники и линии средней толщины – время теплопередачи в двухосно-растянутом (на 5 %); кристалле. Кресты и жирные линии – аналогичные характеристики для гофрированных кристаллов с одноосным сжатием (−10 %)

Из приведенных данных видно, что характер зависимости межслоевой теплопроводности от деформации и температуры неодинаков для BG и BSWG. При комнатной и более высоких температурах межслоевой теплообмен в BSWG происходит гораздо интенсивнее, чем в BG, при всех рассматриваемых деформациях. Это объясняется описанной выше разницей межслоевого взаимодействия в рассматриваемых структурах: межслоевое расстояние в BSWG на ~ 4 % ниже, а энергия межслоевого взаимодействия в 1.6 раза выше, чем в BG. Этими особенностями BSWG объясняется также отсутствие в нем сдвига верхнего слоя вдоль гребня гофра, которое наблюдается в сжатом BG при высоких температурах [32]. Кроме того, в ходе молекулярно-динамического моделирования BSWG ни разу не наблюдалось расслоения структуры, как это имело место для BG [32]. Единственным каналом разрушения BSWG было плавление и (для высоких температур) последующая фрагментация нагретого слоя. На рисунке 5 представлен характерный вид гофрированного

Рис. 5. Гофрированная структура BSWG после распада горячего слоя. Начальная температура $T = 7000$

BSWG после распада нагретого слоя с начальной температурой 7000 K. На этом рисунке видно, что в нагретом слое образуются смежные многоатомные кольца. По мере накопления таких дефектов, значительная часть атомов углерода приобретает *sp*-гибридизацию, так что слой превращается в "клубок" карбиновых нитей аналогично тому, как это наблюдалось при моделировании BG [32].

Невозможность термического расслоения BSWG можно объяснить совокупностью двух причин. Первая причина – достаточно высокое значение энергии межслоевого взаимодействия E_{lay}, которая слабо меняется при растяжении и даже увеличивается при сжатии BSWG. Вторая причина – низкая температура плавления Стоун-Уэльсовского графена (~ 3800 K [17]) по сравнению с графеном (~ 5100 K [35], обе температуры плавления получены в рамках одной и той же неортогональной модели сильной связи [18]). Вероятность расслоения BG и BSWG определяется в основном величиной E_{lay}, но из-за сравнительно низкой температуры плавления распад нагретого слоя BSWG происходит раньше, чем его отрыв. Общей характерной чертой BG и BSWG является резкое увеличение интенсивности межслоевого теплообмена вблизи порога плавления, что видно из табл. 1. Отметим также малость времени плавления по сравнению с характерным временем теплопередачи. Это подтверждает вывод о том, что межслоевая теплопередача может предотвращать плавление нагретого слоя.

Заключение. Статическое моделирование BSWG выявило, что он имеет несколько существенных отличий от BG. Во-первых, BSWG обладает меньшей жесткостью в поперечном направлении. Во-вторых, слои BSWG легче смещаются друг относительно друга. В-третьих, в BSWG невозможно формирование конфигурации AA из-за ее низкой устойчивости. В-четвертых, BSWG характеризуется меньшим межслоевым расстоянием и более сильным межслоевым взаимодействием.

Динамическое исследование межслоевого теплообмена показало, что интенсивность этого процесса в BSWG выше, чем в BG, и слабее зависит от начальной температуры нагретого слоя и деформации структуры. Резкий рост межслоевой теплопроводности (более чем на порядок) наблюдается лишь вблизи температуры плавления Стоун-Уэльсовского графена. В интервале температур от комнатной до 7000 K межслоевая теплопроводность BSWG выше, чем у BG. Однако при криогенных температурах более симметричный BG демонстрирует лучшую межслоевую теплопроводность. Высокая теплопроводность при низких температурах характерна для бездефектных кристаллов алмаза, сапфира, кварца и алюминия (см. [52, 53] и ссылки к ним). При одноосном сжатии на 10 % BSWG, подобно BG, становится гофрированным. Однако в отличие от BG, тепловой контакт между его слоями при этом не нарушается. Характерное время межслоевого теплообмена в гофрированном BSWG монотонно, почти линейно падает до нулевого значения в рассмотренном температурном интервале 77–7000 K.

Столь заметные различия свойств BSWG и BG делают интересным исследование свойств комбинированного двухслойного материала, один слой которого представляет собой графен, а другой – Стоун-Уэльсовский графен.

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

1. T. Ohta, A. Bostwick, T. Seyller, K. Horn, and E. Rotenberg, Science **313**, 951 (2006).
2. Y. Cao, D. Chowdhury, D. Rodan-Legrain, O. Rubies-Bigorda, K. Watanabe, T. Taniguchi, T. Senthi, and Pablo Jarillo-Herrero, Phys. Rev. Lett. **124**, 076801 (2020).
3. Y. Cao, V. Fatemi, S. Fang, K. Watanabe, T. Taniguchi, E. Kaxiras, and P. Jarillo-Herrero, Nature **556**, 43 (2018).
4. G. E. Volovik, Письма в ЖЭТФ **107**, 537 (2018).
5. 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).
6. G. Fiori and G. Iannaccone, IEEE Electron Device Letters **30**, 261 (2009).
7. M.-C. Chen, C.-L. Hsu, and T.-J. Hsueh, IEEE Electron Device Letters **35**, 590 (2014).
8. Y. Tang, Z. Liu, Z. Shen, W. Chen, D. Ma, and X. Dai, Sens. Actuators B **238**, 182 (2017).
9. Л. А. Чернозатонский, П. Б. Сорокин, А. Г. Квашнин, Д. Г. Квашнин, Письма в ЖЭТФ **90**, 144 (2009).
10. J. Liu and H. Lu, RSC Adv. **9**, 34481 (2019).
11. X. Li, Q. Wang, and P. Jena, J. Phys. Chem. Lett. **8**, 3234 (2017).
12. Y. Liu, G. Wang, Q. Huang, L. Guo, and X. Chen, Phys. Rev. Lett. **108**, 225505 (2012).
13. Z. Wang, X.-F. Zhou, X. Zhang, Q. Zhu, H. Dong, M. Zhao, and A. R. Oganov, Nano Lett. **15**, 6182 (2015).
14. S. Zhang, J. Zhou, Q. Wang, X. Chen, Y. Kawazoe, and P. Jena, Proc. Nat. Acad. Sci. **112**, 2372 (2015).
15. Е. А. Беленков, В. В. Мавринский, Т. Е. Беленкова, В. М. Чернов, ЖЭТФ **147**, 949 (2015).
16. 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).

17. M. M. Maslov, A. I. Podlivaev, and K. P. Katin, Molecular Simulation **42**, 305 (2016).
18. Л. А. Опенов, А. И. Подливаев, Письма в ЖЭТФ **109**, 746 (2019).
19. A. J. Stone and D. J. Wales, Chem. Phys. Lett. **128**, 501(1986).
20. Ю. Е. Лозовик, А. М. Попов, УФН **167**, 751 (1997).
21. T. Dumitrică and B. I. Yakobson, Appl. Phys. Lett. **84**, 2775 (2004).
22. A. J. M. Nascimento and R. W. Nunes, Nanotechnology **24**, 435707 (2013).
23. J. Ma, D. Alfe, A. Michaelides, and E. Wang, Phys. Rev. B **80**, 033407 (2009).
24. S. Deng and V. Berry, Mater. Today **19**, 197 (2016).
25. J. B. Oostinga, H. B. Heersche, X. Liu, A. F. Morpurgo, and L. M. K. Vandersypen, Nat. Mater. **7**, 151 (2008).
26. P. M. Korusenko, V. V. Bolotov, S. N. Nesov, S. N. Povoroznyuk, and I. P. Khailov, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms **358**, 131 (2015).
27. V. V. Bolotov, P. M. Korusenko, S. N. Nesov, S. N. Povoroznyuk, and E. V. Knyazev, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms **337**, 1 (2014).
28. 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).
29. K. S. Grishakov, K. P. Katin, V. S. Prudkovskiy, and M. M. Maslov, Applied Surface Science **463**, 1051 (2019).
30. B. Li, L. Zhou, D. Wu, H. Peng, K. Yan, Y. Zhou, and Z. Liu, ACS NANO **5**, 5957 (2011).
31. 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).
32. А. И. Подливаев, К. С. Гришаков, К. П. Катин, М. М. Маслов, Письма в ЖЭТФ **113**, 182 (2021).
33. J. A. Baimova, L. Bo, S. V. Dmitriev, K. Zhou, and A. A. Nazarov, Europhys. Lett. **103**, 46001 (2013).
34. С. В. Дмитриев, Ю. А. Баимова, А. В. Савин, Ю. С. Кившарь, Письма в ЖЭТФ **93**, 632 (2011).
35. Л. А. Опенов, А. И. Подливаев, ФТТ **58**, 821 (2016).
36. J. H. Los, K. V. Zakharchenko, M. I. Katsnelson, and A. Fasolino, Phys. Rev. B **91**, 045415 (2015).
37. Л. А. Опенов, А. И. Подливаев, Письма в ЖЭТФ **113**, 204 (2016).
38. C. Lee, X. Wei, J. W. Kysar, and J. Hone, Science **321**, 385 (2008).
39. O. L. Blakslee, J. Appl. Phys. **41**, 3373 (1970).
40. E. M. Pearson, T. Halicioglu, and W. A. Tiller, Phys. Rev. A **32**, 3030 (1985).
41. C. E. Klots, Z. Phys. D **20**, 105 (1991).
42. J. V. Andersen, E. Bonderup, and K. Hansen, J. Chem. Phys. **114**, 6518 (2001).
43. K. P. Katin, K. S. Grishakov, A. I. Podlivaev, and M. M. Maslov, J. Chem. Theory Comput. **16**, 2065 (2020).
44. K. P. Katin and M. M. Maslov, J. Phys. Chem. Solids **108**, 82 (2017).
45. А. И. Подливаев, Письма в ЖЭТФ **111**, 728 (2020).
46. А. И. Подливаев, Письма в ЖЭТФ **92**, 54 (2010).
47. А. И. Подливаев, ФТТ **62**, 979 (2020).
48. E. Cadelano, P. L. Palla, S. Giordano, and L. Colombo, Phys. Rev. Lett. **102**, 235502 (2009).
49. J. A. Baimova, S. V. Dmitriev, and K. Zhou, Phys. Stat. Sol. B **249**, 1393 (2012).
50. R. Balog, B. Jørgensen, J. Wells, E. Løgsgaard, P. Hofmann, F. Besenbacher, L. Hornekør, J. Am. Chem. Soc. **131**, 8744 (2009).
51. I. V. Lebedova, A. A. Knizhnik, A. M. Popov, Y. E. Lozovik, and B. V. Potapkin, Phys. Chem. Chem. Phys. **13**, 5687 (2011).
52. G. Fugallo, M. Lazzeri, L. Paulatto, and F. Mauri, Phys. Rev. B **88**, 045430 (2013).
53. F. Pobell, *Matter and Methods at Low Temperatures*, Springer, Berlin, Heidelberg (2007), p. 64.