

02

Колебательные процессы при распространении акустической волны в монослойном фосфоре

© И.А. Шепелев,^{1,2} И.Д. Колесников,² С.В. Дмитриев³

¹ Альметьевский государственный нефтяной институт,
423462 Альметьевск, Татарстан, Россия

² Саратовский национальный исследовательский государственный университет им. Н.Г. Чернышевского,
410012 Саратов, Россия

³ Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН,
450075 Уфа, Россия
e-mail: igor_sar@li.ru

Поступило в Редакцию 17 января 2024 г.

В окончательной редакции 17 января 2024 г.

Принято к публикации 17 января 2024 г.

Акустические волны возникают в кристаллах в результате медленного непрерывного сжатия и являются эффективным способом передачи энергии на большие расстояния вглубь кристалла без существенного изменения его свойств. Распространение акустических волн в двумерных материалах изучено гораздо меньше, чем в трехмерных кристаллах. Моделирование методами молекулярной динамики используется для анализа динамики акустических волн в однослойном фосфоре. Проанализированы механизмы распространения волны в разных кристаллографических направлениях и влияние на свойства волны из-за высокой анизотропии решетки фосфора. В рамках анализа изучены колебания атомов, через которые проходит акустическая волна, как в инертной, так и в движущейся системе координат. Это позволило детально проанализировать процесс распространения волны и динамику колебаний атомов, возникающих после прохождения через них волны. В целом результаты вносят вклад в понимание нелинейной динамики локализованных возбуждений в двумерных материалах.

Ключевые слова: многослойный фосфорен, двумерные материалы, метод молекулярной динамики.

DOI: 10.61011/JTF.2024.03.57375.8-24

Введение

Отслоение графена от трехмерного вещества — графита [1] — стало важным прорывом в научных исследованиях и открыло новое направление в синтезе и изучении различных двумерных материалов. Прогресс в технологиях отслоения и обработки слоистых материалов привел к возможности создания новых однослойных материалов, включая фосфорен — двумерный слой черного фосфора [2]. Несмотря на то что черный фосфорен является наиболее стабильной формой фосфора, его синтез был достигнут лишь спустя многие десятилетия после открытия самого химического элемента фосфора. Графен и фосфорен представляют собой монослойные кристаллические структуры, состоящие из одних и тех же атомов. Открытие фосфора открыло новые перспективы для исследований этого материала и его потенциальных применений в различных областях.

В 2014 г. были проведены исследования, фокусирующиеся на изучении электронных свойств монослоя или нескольких слоев черного фосфора [3]. Эти исследования показали, что фосфорен обладает полупроводниковой проводимостью и характеризуется высокой подвижностью носителей заряда. Это означает, что фосфорен обладает значительным потенциалом для разработки

электронных устройств высокой эффективности и производительности. Также были подтверждены перспективы использования фосфора в различных технологических приложениях. Его способность лучше поглощать свет по сравнению с другими двумерными материалами, такими как графен, делает его потенциально полезным для различных электронных приложений, включая фотодетекторы и светодиоды.

Фосфорен как относительно новый объект исследования привлекает большое внимание научного сообщества. В последние годы было опубликовано значительное количество обзорных статей, посвященных этому двумерному материалу. Эти обзоры подробно описывают его свойства, методы производства и разнообразные устройства, созданные на основе фосфора [4]. Они предоставляют информацию о его свойствах и потенциале применения фосфора в различных областях.

Одним из важных аспектов фосфора является то, что он обладает уникальными тепловыми характеристиками, которые существенно отличаются от свойств макромасштабного трехмерного черного фосфора [5]. Оказалось, что фосфорен обладает высокой термостабильностью, что означает, что он сохраняет свои свойства даже при очень высоких температурах без деградации его кристаллической структуры. Это открывает новые перспективы для его использования в различных тепло-

вых приложениях, где требуется высокая стабильность и эффективность.

Также, по видимости фосфорен может стать эффективным термоэлектрическим материалом с высокой электропроводностью и низкой теплопроводностью [6]. Термоэлектрические материалы обладают способностью преобразовывать тепловую энергию в электрическую. Фосфорен благодаря его свойствам является перспективным кандидатом для создания термоэлектрических устройств, например, термогенераторов. Более того, фосфорен может служить катализатором благодаря своей высокой поверхностной активности и возможности изменять свою структуру в процессе реакции. Это открывает новые возможности для различных химических процессов и промышленных производств, где требуется эффективный и гибкий катализ.

Метод молекулярной динамики является высокоэффективным инструментом для изучения трансформации структуры двумерных материалов. Он позволяет проводить подробное моделирование различных процессов в материалах на атомарном уровне, открывая новые возможности для понимания их поведения и свойств. Например, с помощью метода молекулярной динамики можно исследовать процессы отслаивания и скольжения графеновых нанолент, что является важным аспектом для понимания и контроля структурных изменений в таких материалах [7]. Также данный метод позволяет моделировать термически и механически индуцированную пульсацию в двумерных материалах [8]. Другим примером является возможность изучения поверхностных пульсаций и твистонов, что способствует более глубокому пониманию взаимодействия материала с окружающей средой и его реакции на внешние воздействия [9]. Также посредством моделирования возможно изучение возбуждения и движения солитонов, ударных волн в графене и других двумерных материалах.

Метод молекулярной динамики является полезным инструментом для изучения передачи тепла, энергии и массы в двумерных материалах. Он позволяет исследовать различные аспекты тепловой динамики, включая баллистическую передачу тепла и выравнивание энергии в двумерной гармонической решетке графена, что важно для понимания теплопроводности и других энергетических свойств двумерных материалов и может быть полезно при разработке новых термоэлектрических устройств [10]. Кроме того, метод молекулярной динамики позволяет изучать влияние локализованных ударных нагрузок и колебаний в двумерных материалах, включая пространственно-локализованные колебательные моды, такие как дискретные бризеры. Последние могут быть важными при анализе механических свойств и устойчивости материалов [11]. С использованием метода молекулярной динамики также можно моделировать поведение двумерных материалов при экстремальных условиях, таких как высокие температуры и высокие давления, что позволяет более глубоко понять роль

нелинейных каналов энергии в экстремальных условиях [12].

Двумерные материалы, используемые в различных устройствах, часто подвергаются экстремальным динамическим нагрузкам. Исследование механизмов передачи энергии в таких материалах, включая нелинейные эффекты, играет важную роль в понимании их свойств и поведения в условиях высокоскоростной деформации [10]. Научные исследования подтверждают, что поведение двумерных материалов при высокоскоростной деформации существенно отличается от их поведения при низких скоростях деформации [11]. Это имеет особое значение при рассмотрении материалов, таких как углеродные нанотрубки, которые при воздействии ударной волны испытывают значительно большее повреждение по сравнению со статическим сжатием при том же значении давления [12].

Однако существуют двумерные материалы, которые обладают особыми свойствами, способными справиться с высокоскоростной деформацией без разрушения. Например, графен обладает потенциалом быть использованным в качестве материала, способного поглощать ударные волны и смягчать их эффект, а также в качестве слоя, отражающего и ослабляющего ударные волны [13,14]. Эти исследования указывают на перспективы использования двумерных материалов в области защиты от ударных волн и других высокоэнергетических динамических нагрузок.

Фосфорен в отличие от графена и нитрида бора обладает более сложной пространственной структурой и состоит из двух субатомных слоев, что придает фосфору иные свойства по сравнению с графеном. Фосфорен является высокоанизотропным материалом, т.е. его свойства существенно зависят от направления. Например, модуль Юнга фосфорена в направлении „зигзаг“ составляет от 90 до 166 GPa, в то время как в направлении „кресло“ он составляет от 40 до 44 GPa [15]. Исследования показывают, что фосфорен, подвергнутый кратковременному высокоинтенсивному воздействию, может проявлять схожие с графеном и нитридом бора свойства солитонной волны сжатия [16,17]. Такие волны возбуждаются при кратковременной локализованной высокоинтенсивной деформации материала.

Целями настоящей работы являются анализ динамики атомов при возбуждении и распространении акустических волн, возникающих в материале при медленном продольном сжатии, выявление разницы в колебательной динамике атомов в зависимости от дальности распространения акустической волны, влияние на нее направления распространения и скорости сжатия кристаллической решетки.

1. Методы исследования

Фосфорен — это материал, представляющий собой однослойный кристалл, состоящий из атомов фосфора.

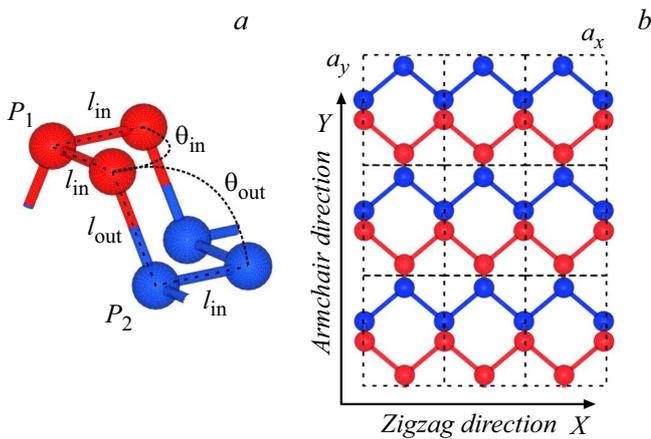


Рис. 1. Схематичное изображение кристаллической решетки фосфора. *a* — изображение одной трансляционной ячейки в перспективе, *b* — вид сверху на 3 × 3 трансляционных ячеек фосфора. Каждая ячейка выделена штрихованной линией.

Визуально он представляет собой двумерный материал со сложной пространственной топологией, которая схематично показана на рис. 1. Одной из характерных особенностей фосфора является его двухуровневая структура. Каждая трансляционная ячейка фосфора состоит из четырех атомов фосфора, которые распределены по двум параллельным уровням в плоскости XY.

В верхнем уровне фосфора атомы фосфора обозначаются как P_1 , тогда как в нижнем уровне — P_2 . Это разделение на верхний и нижний уровни создает особую структуру с двумя видами валентных связей. Одна из них, называемая l_{in} , находится только в одном и том же уровне (либо верхнем P_1 , либо нижнем P_2) и называется внутренней связью. Другая связь, называемая l_{out} , соединяет атомы в разных уровнях P_1 и P_2 и называется внешней связью, как показано на рис. 1, *a*. Также, в свою очередь, такая топология позволяет выделить два разных типа валентных углов связей, обозначаемых как θ_{in} (внутренний угол) и θ_{out} (внешний угол) соответственно.

Исследования в [18] позволили определить достаточно эффективный подход к описанию взаимодействия атомов фосфора с использованием потенциала Стиллинджера-Вебера (SW). Этот потенциал, ранее успешно применявшийся для моделирования атомных взаимодействий в кремнии [19]. При описании взаимодействия атомов фосфора таким потенциалом хорошо воспроизводятся кристаллическая структура, скорость звука и дисперсия фононов, полученные в результате первопринципных расчетов. Потенциал SW состоит из двух частей: двухчастичного члена, описывающего длины связей, и трехчастичного члена, описывающего углы связей.

Значения параметров потенциала выбраны в соответствии с работой [18]. При использовании этих значений параметров получают следующие параметры решетки:

длина внутренней связи составляет $l_{in} = 2.21 \text{ \AA}$, а длина связи между атомами из верхнего и нижнего уровней равна $l_{out} = 2.258 \text{ \AA}$. Параметры решетки фосфора имеют значения $a_x = 3.284 \text{ \AA}$ и $a_y = 4.59 \text{ \AA}$. Углы связей $\theta_{in} = 95.999^\circ$ и $\theta_{out} = 104.0^\circ$. Энергия равновесия на атом составляет $\Delta E = 3.48 \text{ eV}$. Нужно отметить, что все эти значения очень близки к результатам, полученным при расчетах первыми принципами в работе [20].

Для молекулярно-динамического моделирования взаимодействия атомов фосфора используется широко применяемый программный пакет LAMMPS [21]. Интегрирование уравнений движения атомов выполняется методом Верле с шагом времени 0.2 fs. Граничные условия периодические во всех трех направлениях. Однако в направлении Z был введен вакуумный слой толщиной 20 Å, чтобы исключить взаимодействие рассматриваемого листа фосфора с его периодическими образами.

Кристаллическая решетка фосфора, используемая в моделировании, состоит из 192 000 атомов. Ее размеры зависят от направления сжатия решетки: для случая сжатия вдоль направления „зигзаг“ решетка имеет размеры $367.18 \times 19.7 \times 2.0 \text{ nm}$, а для сжатия вдоль направления „кресло“ размеры составляют $27.54 \times 266.7 \times 2.0 \text{ nm}$. В процессе моделирования кристаллическая решетка фосфора подвергается непрерывному сжатию с помощью поршня, который движется с постоянной скоростью u вдоль одного из кристаллографических направлений. Это сжатие приводит к интенсивному нагреванию решетки и возбуждению акустических или ударных волн в зависимости от скорости поршня. Важно отметить, что в настоящей работе не учитываются стохастические эффекты температуры кристалла, поэтому предполагается, что начальная температура решетки равна 0 K. Это означает, что все атомы находятся в своих равновесных положениях до тех пор, пока не подвергнутся воздействию акустических или ударных волн, возбужденных в кристалле вследствие сжатия решетки.

2. Результаты

При сжатии кристаллической решетки со скоростью меньше скорости звука в фосфоре, в ней возбуждается акустическая волна, распространяющаяся вдоль одного из кристаллографических направлений — „кресла“ или „зигзага“. В результате такого воздействия происходит сильное нагревание решетки на границе фронта акустической волны. При этом сжатие решетки происходит значительно быстрее скорости движения поршня, а именно оно происходит со скоростью звука в фосфоре. Механизм такого смещения относительно положения равновесия осуществляется посредством акустической волны. До тех пор, пока волна не дошла до атома, расположенном вдоль одного из кристаллографических направлений, по которому распространяется волна, он покоится в своем положении равновесия. После того

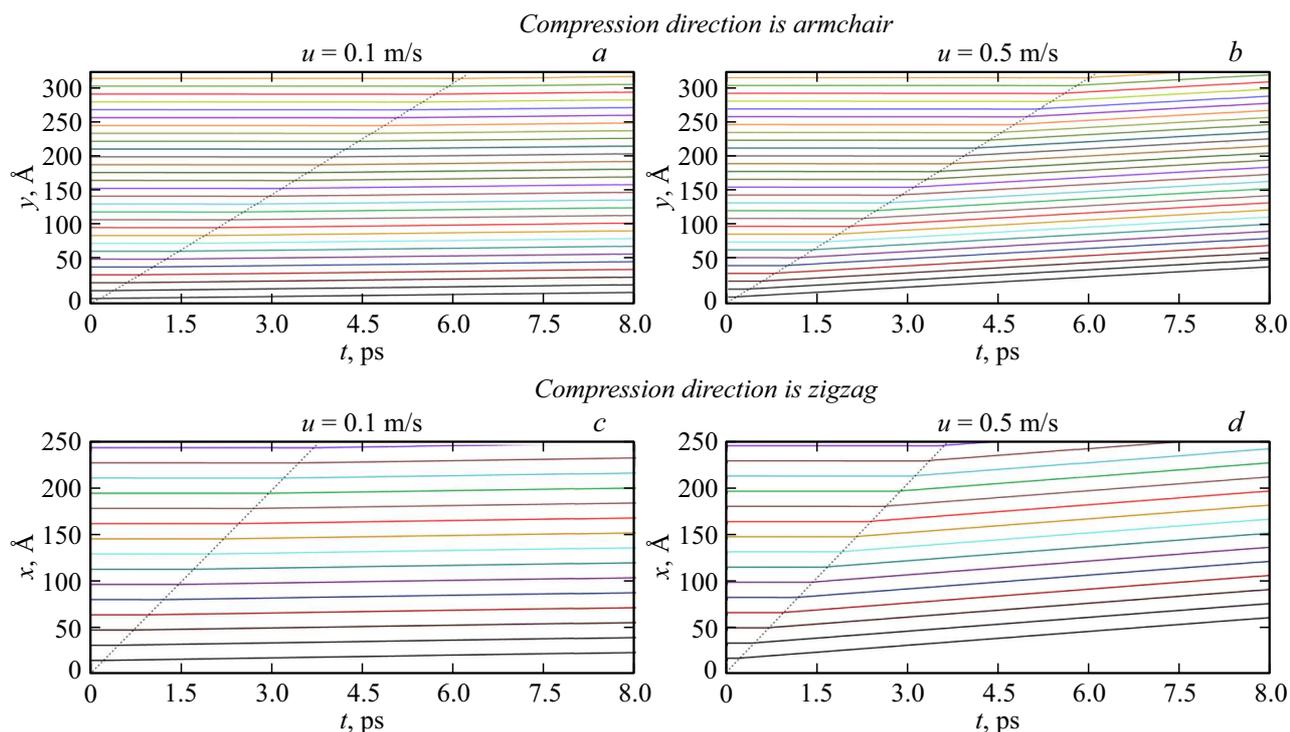


Рис. 2. Динамика координат атомов при распространении акустической волны возбужденной сжимающим кристаллическую решетку поршнем со скоростью $u = 0.1$ м/с (*a,c*) и $u = 0.5$ м/с (*b,c*) в направлении „кресло“ (*a,b*) и „зигзаг“ (*c,d*). Цветными линиями показаны кривые изменения координат каждого 10-го атома ряда вдоль кристаллографического направления. Пунктирной линией отмечен момент прохождения через атом волны.

как до атома доходит акустическая волна и проходит через него, он начинает смещаться со скоростью движения поршня, как и вся остальная часть решетки, через которую уже прошла волна. Этот процесс хорошо виден при рассмотрении динамики положения атомов, изображенном на рис. 2 для случая двух скоростей $u = 0.1$ (*a,c*) и 0.5 м/с (*b,d*) при распространении волны вдоль направления „кресло“ (*a,b*) и „зигзаг“ (*c,d*).

На графиках представлены временная динамика координаты y (для движения вдоль направления „зигзаг“) или x (для движения вдоль направления „кресло“) каждого десятого атома в атомарном ряду, расположенному вдоль одного из кристаллографического направления фосфорена. Они выделены линиями различного цвета. Можно заметить, что расстояние между атомами в случае распространения вдоль „кресла“ значительно меньше, чем для случая распространения вдоль „зигзага“. Это обусловлено строением фосфорена, в котором проекция межатомного расстояния по Y („кресло“) или X („зигзаг“) значительно различаются (рис. 1, *b*). На графике хорошо видно, что до того момента как волна дошла до атома, он покоился и не двигался (горизонтальная линия, без наклона на рис. 2), несмотря на сжатие решетки. Однако после прохождения волны через атом, он приходит в движение со скоростью, близкой к скорости движения поршня. Разница в скоростях поршня хорошо заметна при сравнении графиков

(при $u = 0.5$ м/с угол наклона значительно выше, чем при $u = 0.1$ м/с). На графиках в момент прохождения через атомы волны появляется излом, соответствующий началу смещения атомов. По этому моменту возможно определить скорость распространения акустической волны. Эти временные точки соединены линией, по тангенсу угла наклона которой и вычисляется скорость волны. Можно заметить, что, несмотря на значительно отличающиеся скорости поршня в одном кристаллографическом направлении, скорости движения волны одинаковые. Для акустических волн эта скорость определяется скоростью звука в кристалле и не зависит от скорости поршня. Заметим, что скорость волны в направлении „кресло“ значительно ниже, чем при движении вдоль „зигзага“. Это связано с выраженной анизотропией фосфорена. Если вычислить скорость движения волны по графику, то окажется, что она равняется значению скорости звука, указанному в литературе: 4.6 км/с для движения вдоль „кресла“ и 8 км/с для распространения вдоль „зигзага“.

Возникает вопрос, как именно происходит прохождение волны через атомы? Они начинают только смещение со скоростью поршня либо имеет место также колебательная динамика? И меняется ли такая динамика по мере распространения акустической волны во времени и пространстве? Изучение этих проблем осложняется тем, что до волны атомы покоятся, а сразу после про-

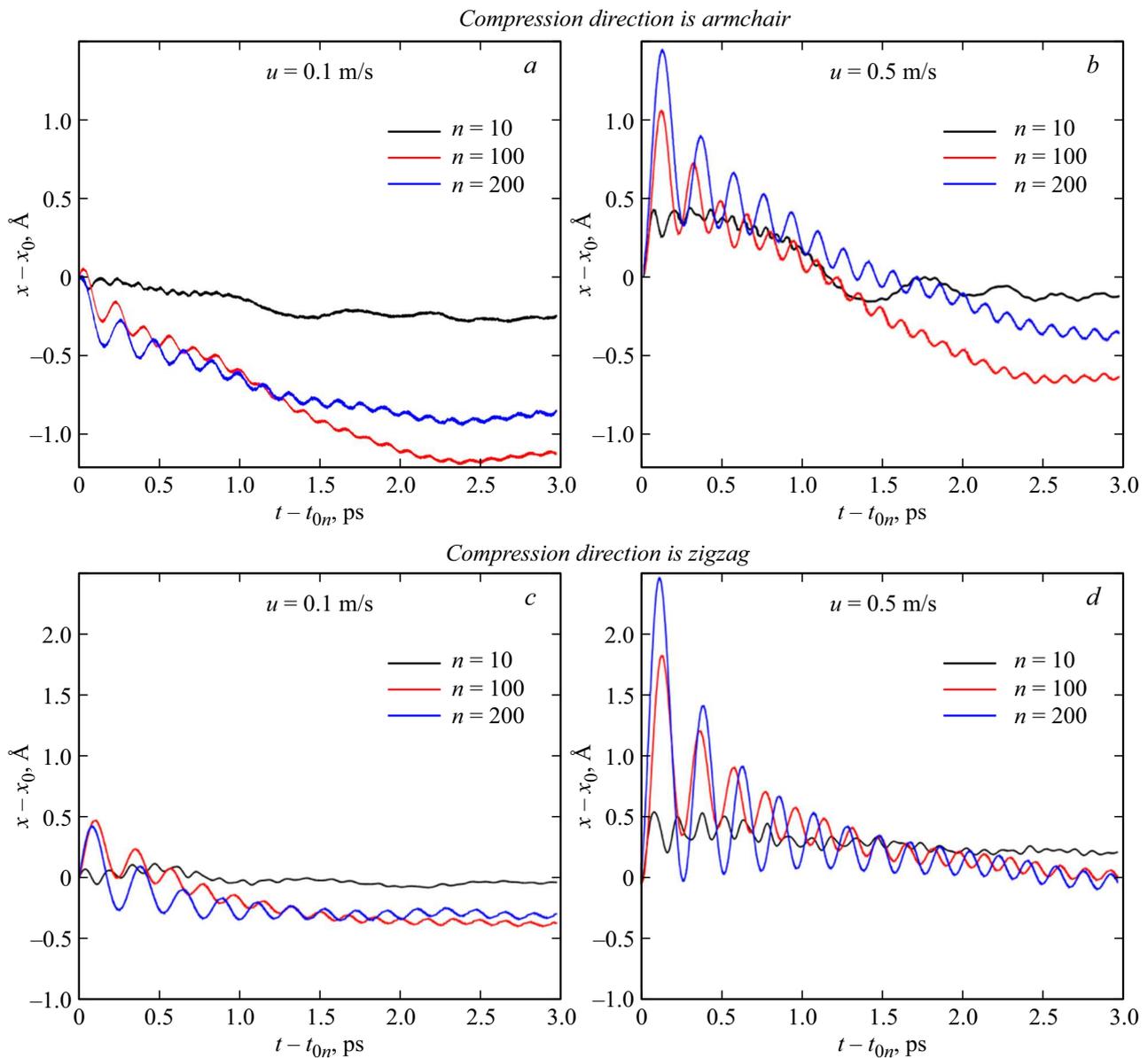


Рис. 3. Динамика координат атомов с номером $n = 10, 100$ и 200 в атомарном ряду в движущейся системе координат начиная с момента прохождения через атом волны t_n при распространении акустической волны возбужденной сжимающим кристаллическую решетку поршнем со скоростью $u = 0.1$ м/с (*a,c*) и 0.5 м/с (*b,d*) в направлении „кресло“ (*a,b*) и „зигзаг“ (*c,d*).

хождения волны начинают смещаться. Следовательно, колебательная динамика на фоне смещения становится незаметной. Для решения этой трудности был разработан алгоритм, позволяющий рассматривать динамику положения атома в движущейся системе координат, что компенсирует эффект смещения и позволяет рассматривать поведение атомов более детально.

Зависимости координаты (X или Y в зависимости от направления распространения волны) атомов относительно их положения равновесия в движущейся системе координат представлены на рис. 3 для $n = 10, 100, 200$ атомов, где n — номер атома в атомарном ряду. Данные графики показывают, как происходит процесс распространения волны через атом, а также как он в

последствии рассеивает в виде фононов полученную энергию. В момент прохождения через атом последний получает смещение относительно положения равновесия, после чего начинает колебаться с затухающей амплитудой. Можно заметить, что колебания атомов тем сильнее, чем дальше удаленность волны. Это объясняется тем, что из-за непрерывного сжатия решетки напряженности в ней все увеличиваются и энергия волны также монотонно растет. Как следствие, волна все больше отклоняет атом от положения равновесия. При этом частота остаточных колебаний положения атомов, наоборот, уменьшается с распространением волны. Самая высокая частота колебаний положения атома наблюдается в начале решетки, а далее становится все

меньше. Это можно объяснить тем, что волна движется значительно быстрее скорости поршня и с удалением от начала решетки атомы все меньше испытывают влияние сжатия, следовательно, диссипация полученной энергии уменьшается, о чем свидетельствует уменьшение частоты колебаний. Также стоит отметить, что частота колебаний атомов заметно меньше при распространении акустической волны в направлении „зигзаг“ (примерно на 25%). Интересно, что во время распространения волны вдоль „кресла“ имеет место незначительное замедление акустической волны по мере распространения. Об этом свидетельствует спадающее во времени значение положения атома на рис. 3 (в движущейся системе координат) (оно становится отрицательным), причем это отклонение увеличивается по мере распространения волны. Для случая распространения вдоль зигзага такого эффекта не наблюдается.

Заключение

Исследование непрерывного сжатия монослойной решетки фосфорена вдоль одного из кристаллографических направлений показало, что при дозвуковых скоростях сжимающего поршня в решетке возбуждается акустическая волна. Было обнаружено, что скорость акустической волны не зависит от скорости движения поршня и определяется скоростью звука в кристалле. В силу высокой анизотропии фосфорена, скорости акустических волн почти в 2 раза отличаются в зависимости от направления распространения, а именно 4.6 km/s в направлении „кресло“ и 8 km/s в направлении „зигзаг“. Также была выявлена невозможность применения потенциала SW с параметрами для фосфорена [18] при высокой скорости движения поршня, так как происходит коллапсирование решетки, часть атомов вблизи поршня получают огромную кинетическую энергию, вследствие чего решетка быстро теряет устойчивость.

Была изучена динамика атомов, через которые распространяется акустическая волна. Для этого его динамика была рассмотрена в движущейся системе координат со скоростью поршня, так как после прохождения волны атом начинает смещаться с этой скоростью в направлении движения поршня. В момент, когда через атом проходит волна, он получает дополнительный импульс и отклоняется от исходного положения. Далее он релаксирует обратно, затем вперед и так далее, совершая фоновые колебания. Частота этих колебаний характеризует диссипацию полученной энергии в решетку — чем она выше, тем выше диссипация энергии. В фосфорене максимальная частота фоновых колебаний наблюдается на начальном этапе распространения волны, и она уменьшается при ее дальнейшем распространении. Также отметим, что в силу непрерывного сжатия акустическая волна постоянно получает дополнительную энергию и диссипация энергии на остаточные колебания атомов полностью компенсируется.

В дальнейшем планируется модификация потенциала с более правильным описанием сжимающей части потенциала, чтобы была возможность исследовать динамику ударных волн.

Финансирование работы

Работа выполнена при финансовой поддержке Совета по грантам Президента РФ для государственной поддержки молодых ученых — кандидатов наук, грант № МК-891.2022.1.2.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] A.K. Geim, K.S. Novoselov. *Nature Mater.*, **6** (3), 183 (2007). DOI: 10.1038/nmat1849
- [2] J. Kang, W. Cao, X. Xie, D. Sarkar, W. Liu, K. Banerjee. *Micro-and Nanotechnology Sensors, Systems, and Applications VI*. SPIE. **9083**, 20-26 (2014). DOI: 10.1117/12.2051198
- [3] L. Li, Y. Yu, G.J. Ye, Q. Ge, X. Ou, H. Wu, D. Feng, X.H. Chen, Y. Zhang. *Nature Nanotechnol.*, **9** (5), 372 (2014). DOI: 10.1038/nnano.2014.35
- [4] X. Ling, H. Wang, S. Huang, F. Xia, M.S. Dresselhaus. *Proceed. National Academy Sci.*, **112** (15), 4523 (2015). DOI: 10.1073/pnas.1416581112
- [5] N. Yang, X. Xu, G. Zhang, B. Li. *Aip Adv.*, **2** (4), 041410 (2012). DOI: 10.1063/1.4773462
- [6] J. Zhang, Z. Dong, X. Wang, X. Zhao, J. Tu, Q. Su, G.S. Du. *J. Power Sources*, **270**, 1 (2014). DOI: 10.1016/j.jpowsour.2014.07.089
- [7] Z. Xue, G. Chen, Ch. Wang, R. Huang. *J. Mechan. Phys. Solids*, **158**, 104698 (2022). DOI: 10.1016/j.jmps.2021.104698
- [8] F.L. Thiemann, P. Rowe, E.A. Müller, A. Michaelides. *J. Phys. Chem. C*, **124** (40), 22278 (2020). DOI: 10.1021/acs.jpcc.0c05831
- [9] A.V. Savin, E.A. Korznikova, S.V. Dmitriev. *Phys. Rev. B*, **102** (24), 245432 (2020). DOI: 10.1103/PhysRevB.102.245432
- [10] P. Botella, X. Devaux, M. Dossot, V. Garashchenko, J.C. Beldzung, A.V. Soldatov, S. Ananev. *Phys. Stat. Solidi (B)*, **254** (11), 1700315 (2017). DOI: 10.1002/pssb.201700315
- [11] Z. Li, Y. Lv, L. Ren, J. Li, L. Kong, Y. Zeng, Q. Tao, R. Wu, H. Ma, B. Zhao, D. Wang, W. Dang, K. Chen, L. Liao, X. Duan, Y. Liu. *Nature Commun.*, **11** (1), 1151 (2020). DOI: 10.1038/s41467-020-15023-3
- [12] L.K. Galiakhmetova, D.V. Bachurin, E.A. Korznikova, A.M. Bayazitov, A.A. Kudreyko, S.V. Dmitriev. *Mechan. Mater.*, **174**, 104460 (2022). DOI: 10.1016/j.mechmat.2022.104460
- [13] C. Zhang, A. Godbole, G. Michal, C. Lu. *J. Alloys Compounds*, **860**, 158435 (2021). DOI: 10.1016/j.jallcom.2020.158435
- [14] Q. Wei, X. Peng. *Appl. Phys. Lett.*, **104** (25), 251915 (2014). DOI: 10.1063/1.4885215

- [15] I.A. Shepelev, A.P. Chetverikov, S.V. Dmitriev, E.A. Korznikova. *Comp. Mater. Sci.*, **177**, 109549 (2020). DOI: 10.1016/j.commatsci.2020.109549
- [16] I.A. Shepelev, I.D. Kolesnikov, E.A. Korznikova, S.V. Dmitriev. *Physica E: Low-Dimensional Systems and Nanostructures*, **146**, 115519 (2023). DOI: 10.1016/j.physe.2022.115519
- [17] I.A. Shepelev, S.V. Dmitriev, E.A. Korznikova. *Lett. Mater.*, **11** (1), 79 (2021). DOI: 10.22226/2410-3535-2021-1-79-83
- [18] W. Xu, L. Zhu, Y. Cai, G. Zhang, B. Li. *J. Appl. Phys.*, **117** (21), 214308 (2015). DOI: 10.1063/1.4922118
- [19] F.H. Stillinger, T.A. Weber. *Phys. Rev. B*, **31** (8), 5262 (1985). DOI: 10.1103/PhysRevB.31.5262
- [20] L. Zhu, G. Zhang, B. Li. *Phys. Rev. B*, **90** (21), 214302 (2014). DOI: 10.1103/PhysRevB.90.214302
- [21] A.P. Thompson, H.M. Aktulga, R. Berger, D.S. Bolintineanu, W.M. Brown, P.S. Crozier, P.J. in 't Veld, A. Kohlmeyer, S.G. Moore, T.D. Nguyen, R. Shan, M.J. Stevens, J. Tranchida, C. Trott, S.J. Plimpton. *Comp. Phys. Comm.*, **271**, 10817 (2022). DOI: 10.1016/j.cpc.2021.108171