

Влияние дислокационных диполей с разным плечом на деформационное поведение графена: молекулярная динамика

© А.Х. Ахунова^{1,2}, Ю.А. Баимова^{1,2}

¹Институт проблем сверхпластичности металлов РАН,
450001 Уфа, Россия

²Уфимский университет науки и технологий,
450076 Уфа, Россия
e-mail: akhunova.a.a@gmail.com

Поступило в Редакцию 16 января 2023 г.

В окончательной редакции 16 января 2023 г.

Принято к публикации 16 января 2023 г.

При помощи метода молекулярной динамики проанализированы особенности деформационного поведения и процесс разрушения графена, содержащего дислокационные диполи с различным плечом. Учтено коробление графена в процессе деформации, что сильно понижает его прочность. Установлено, что повышение температуры слабо влияет на механические свойства графена с дислокационными диполями в отличие от бездефектного графена и графена с дефектом Стоуна–Уэльса. Показано, что изменение расстояния между дислокациями в диполе не оказывает заметного влияния на модуль упругости и прочность графена, однако наличие дислокационных диполей может влиять на коробление графена в процессе растяжения.

Ключевые слова: графен, дислокационный диполь, механические свойства, молекулярная динамика.

DOI: 10.21883/JTF.2023.04.55030.6-23

Введение

Дефекты кристаллической структуры естественным образом появляются в графене в процессе его синтеза, что особенно характерно для его крупномасштабного производства. Дефекты также могут появляться в результате внешних воздействий в локальных зонах концентрации напряжений как во время синтеза графена, так и при высоких температурах [1–4]. Наличие дефектов кристаллической решетки может существенно влиять на механические [3–7], химические [8], электронные и транспортные [9–11] свойства графена.

Одним из наиболее распространенных дефектов является дефект Стоуна–Уэльса (СУ), который образуется за счет поворота связи С–С в плоскости листа графена с преобразованием четырех соседних шестиугольников в два пятиугольника и два семиугольника [1,12,13]. Также дефект СУ можно рассматривать как дислокационный диполь (ДД), в котором две краевые дислокации с противоположными знаками вектора Бюргерса смещены на один период решетки [14,15]. Эта пара дислокаций также может быть разделена некоторым расстоянием, называем плечом диполя. Как правило, наличие ДД приводит к короблению графена [14,16,17]. Прочность бездефектного графена очень высока, однако реальный графен содержит структурные дефекты, которые ухудшают его механические свойства [3–7,18–20]. Например, прочность на разрушение дефектного графена зависит от температуры и скорости деформации [21]. Установлено, что повышение температуры снижает механические свойства как бездефектного, так и дефектного графена [22]. В работе [23] проведено исследование влия-

ния дефектов и легирования на механические свойства графена и обнаружено, что расположение дефектов и их концентрация являются важными факторами при определении его механических свойств. Прочность графена очень важна для будущего развития высокопроизводительных графеновых материалов и устройств из различных областей, в частности, при создании гибких сверхтонких дисплеев.

Еще одна важная проблема, которая до сих пор остается актуальной — это устойчивость графена. Неустойчивость двумерных (2D) структур обсуждалась еще в работах Ландау, Пайерлса и Мермина [24–26]. Согласно теореме Мермина–Вагнера [26], длинноволновые флуктуации разрушают дальнедействующий порядок двумерных кристаллов. Однако стабильность 2D-материала достигается за счет образования складок [27]. Действительно, однослойный графен может спонтанно образовывать складки, вызванные температурным фактором [28–30]. Вызванное дефектами складкообразование также наблюдалось и в других исследованиях [31,32].

Влияние складок на свойства графена является нетривиальным вопросом. Показано, что даже изначально плоский графен может сморщиваться при приложенной деформации [33,34]. Такое коробление графена уменьшает его модуль упругости, изменяет коэффициент Пуассона [35,36]. С другой стороны, графен с монотонно распределенными складками демонстрирует высокую прочность [35]. Интересно, что корругированный графен можно даже использовать для повышения прочности металлических композитов [37,38].

В настоящей работе с помощью метода молекулярной динамики исследовалось деформационное поведение

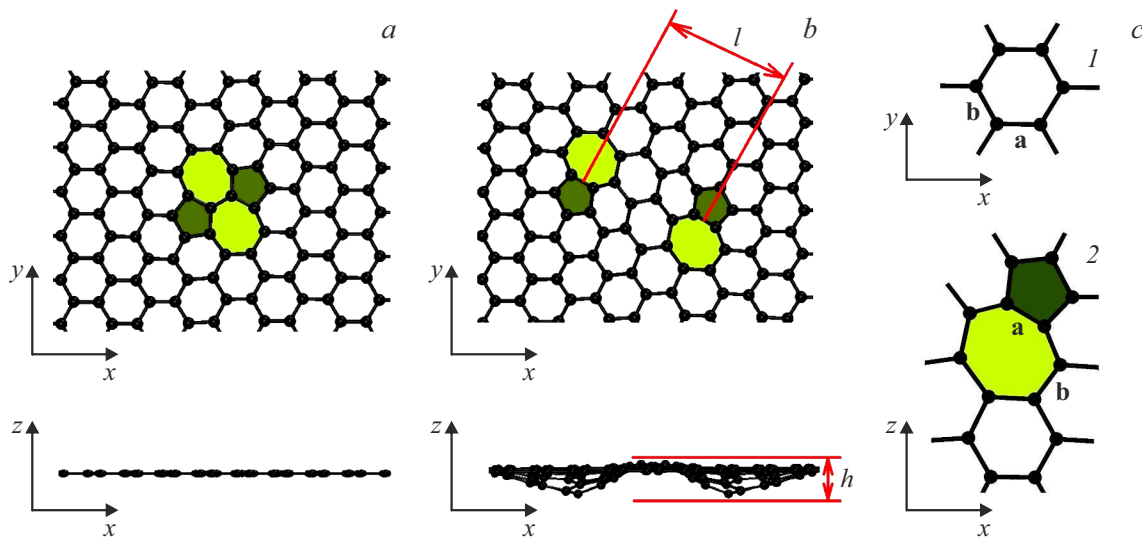


Рис. 1. Фрагмент ячейки графена в двух проекциях: *a* — графен с дефектом СУ, *b* — графен с ДД₂. Здесь *l* — расстояние между двух дислокаций, называемое плечом диполя, *h* — высота пузыря, образованного дефектом. Геометрические параметры всех рассмотренных ДД приведены в тексте; *c* — обозначение связей в бездефектном (1) и дефектном графене (2): *a* — связь в направлении „кресло“, *b* — в направлении „зигзаг“.

графена, содержащего дислокационные диполи разной длины, при нулевой и комнатной температурах. Целью настоящей работы было изучить, как наличие дефектов и складок влияет на процесс растяжения и разрушения графена.

1. Методика исследований

Рассматривалась расчетная ячейка графена размером $74 \times 103 \text{ \AA}$ в двумерном пространстве (x, y). Чтобы предотвратить взаимодействие графена с собственными периодическими изображениями, размер ячейки вдоль оси z задавался равным 200 \AA . Всего ячейка содержала 31 000 атомов углерода. Для каждой структуры перед растяжением проводился процесс минимизации энергии системы. Поля деформаций в графене, вызываемые наличием дислокаций, приводят к его короблению [39], однако в настоящей работе периодические граничные условия, приложенные вдоль направлений x и y , коробление подавляли. Таким образом, графен находился в области устойчивости (в плоской конфигурации), а возмущения, индуцированные ДД, вызвали образование пузыря в области каждой дислокации, что хорошо согласуется с работами [40,41], в которых методами молекулярной динамики и *dft*-анализа исследовались процессы образования и эволюции дислокационных пар, разделенных различным расстоянием.

Дислокационный диполь состоит из двух дислокаций (дефект 5–7), разделенных расстоянием, которое определяется как плечо диполя l , как показано на рис. 1. Высота h от плоскости графена до вершины пузыря изменяется по мере увеличения расстояния между дислокациями, причем немонотонно. В данной задаче угол ориен-

тации диполей равен $\pi/6$, хотя он может варьироваться в больших пределах [42]. Хорошо известный дефект СУ можно рассматривать как ДД с нулевым плечом [42]. Вектор Бюргера B для дислокаций, составляющих ДД, определяется как $B = \sqrt{3}a$, где $a = 1.42 \text{ \AA}$ — длина связи С–С в графене. Далее структуры с ДД будут обозначены как ДД_{*n*}, где нижний индекс n указывает расстояние между двумя парами дислокаций в количестве разделяющих их гексагонов. В качестве примера на рис. 1 представлены фрагменты ячеек с дефектом СУ и ДД₂.

Были рассмотрены 6 видов ДД: СУ (с нулевыми плечом $l = 0 \text{ \AA}$ и высотой $h = 0 \text{ \AA}$); ДД₂ (с плечом $l = 6 \text{ \AA}$ и высотой $h = 1.89 \text{ \AA}$); ДД₄ ($l = 11 \text{ \AA}$, $h = 2 \text{ \AA}$); ДД₆ ($l = 15 \text{ \AA}$, $h = 1.25 \text{ \AA}$); ДД₈ ($l = 20 \text{ \AA}$, $h = 1.22 \text{ \AA}$); ДД₁₀ ($l = 25 \text{ \AA}$, $h = 1.78 \text{ \AA}$).

Отметим, что высота пузыря немонотонно зависит от размера плеча. Это может объясняться высокой нелинейностью явления коробления графена, на которое влияет не только исходная геометрия образца, тип, количество [41,43] и угол ориентации диполей, но и заданные периодические граничные условия [44]. В дальнейшем является целесообразным проведение исследований влияния различных периодических граничных условий на процесс формирования пузырей на дефектах.

Структуры графена с дефектами были получены с использованием собственных программных пакетов. Моделирование одноосного растяжения в направлениях оси x („кресло“) и оси y („зигзаг“) проводилось с помощью программного пакета LAMMPS. Взаимодействие между атомами углерода описывалось потенциалом AIREBO [45].

Одноосное растяжение проводилось при постоянной скорости деформации 0.005 ps^{-1} в изотермических усло-

Значения предела прочности σ_{UTS} , деформации разрушения ε_F и модуля упругости E графена в зависимости от плеча диполя l при испытаниях на растяжение в направлении „кресло“ (индекс „a“)/„зигзаг“ (индекс „z“)

Температура, К	$l, \text{Å}$	$\sigma_{UTS}^a, \text{GPa}$	$\sigma_{UTS}^z, \text{GPa}$	ε_F^a	ε_F^z	E^a, GPa	E^z, GPa
0	Графен	8.14	7.11	0.51	0.43	16.43	13.94
	0	5.67	6.33	0.49	0.42	16.36	13.86
	6	1.56	1.48	0.49	0.41	4.14	3.29
	11	1.27	1.32	0.49	0.42	3.76	3.00
	15	1.20	1.47	0.49	0.41	3.87	3.45
	20	1.07	1.43	0.49	0.41	3.76	3.34
	25	1.24	1.45	0.49	0.4	3.95	3.52
300	Графен	3.02	6.50	0.26	0.41	15.83	13.64
	0	2.96	4.90	0.26	0.38	15.82	13.53
	6	0.74	0.93	0.23	0.34	3.97	3.57
	11	0.67	0.83	0.26	0.34	3.41	3.11
	15	0.69	1.06	0.24	0.37	3.73	3.42
	20	0.68	0.98	0.24	0.36	3.53	3.34
	25	0.72	1.02	0.24	0.36	3.69	3.34

виях при температурах 0 и 300 К. Температура в процессе моделирования контролировалась термостатом Ноэ–Гувера с использованием nvt-ансамбля. Результаты моделирования, полученные при 300 К, усреднялись не менее чем по 50 испытаниям при заданных значениях деформации. Момент разрушения графена определялся по двум критериям: разрыв связи и резкое снижение потенциальной энергии системы. Эти два критерия дают близкое значение критического времени разрыва.

2. Результаты моделирования

2.1. Прочность на растяжение

Для простоты величины, полученные при растяжении в направлении „зигзаг“, будем обозначать верхним индексом z (zigzag), а в направлении „кресло“ — верхним индексом a (armchair). Все критические значения, такие, как предел прочности σ_{UT} , деформация разрушения ε_F и модуль упругости E для всех рассматриваемых структур приведены в таблице.

Из литературы известно, что прочность графена очень высока — около 100 GPa [20,46–48]. Однако результаты, полученные с помощью численных методов, в значительной степени зависят от методики моделирования [20]. Например, в [49] показано, что при динамической нагрузке ковалентные сетки из-за недостаточной релаксации структуры демонстрируют хрупкое разрушение вместо пластического. Растяжение композитов на основе графеновой сетки приводит к другому сценарию [50]: значения предела прочности ковалентных систем при динамическом нагружении могут быть завышены.

В настоящей работе условиями задачи разрешено коробление графена с целью исследования влияния естественного складкообразования на сопротивление разрушению. Известно, что энергия деформации в свободном графене может быть легко высвобождена за счет

образования складок [32]. Это согласуется с [33,34], где было показано, что при положительных значениях деформации в одном направлении и отрицательных значениях деформации в перпендикулярном направлении графен теряет свою устойчивость, и появляются складки различной ориентации. В настоящей работе при растяжении графена в одном направлении он одновременно может сжиматься в направлении, нормальном к оси растяжения. Это приводит к формированию в графене положительных напряжений вдоль оси растяжения и отрицательных напряжений вдоль оси сжатия. Этот факт известен и хорошо согласуется с литературными данными. Следует также отметить, что тип складок существенно влияет на модуль упругости и сопротивление разрушению [35,36]: при наличии малоамплитудного коробления графена деформация разрушения и модуль упругости ниже, чем у плоского графена, но не настолько, как в графене с высокоамплитудными складками.

Морщины и складки могут значительно снизить величину напряжений, создаваемых дефектами [39]. Таким образом, такие низкие значения $\sigma_{UTS}^a = 8.1 \text{ GPa}$ ($\sigma_{UTS}^z = 7.1 \text{ GPa}$) и высокие значения $\varepsilon_F^a = 0.51$ ($\varepsilon_F^z = 0.43$), приведенные в таблице, вполне объяснимы. При этом для графена деформация разрушения при растяжении в направлении „зигзаг“ выше, чем при растяжении в направлении „кресло“ ($\varepsilon_F^z > \varepsilon_F^a$). Это объясняется структурными изменениями, происходящими в графене при заданных условиях растяжения, что будет показано далее. Модуль упругости E определялся по углу наклона прямолинейных участков кривых „напряжение–деформация“. Здесь считается, что упругая деформация имеет место до появления первых складок амплитудой выше 0.5 Å .

По результатам моделирования было установлено, что кривые „напряжение–деформация“ для графена и графена с дефектом СУ приблизительно совпадают до точки

разрушения. Такое же поведение графена с дефектом СУ было показано ранее [51,52]. Наклон прямолинейного участка кривых для направления „кресло“ выше, чем для направления „зигзаг“, что соответствует разным модулям упругости (см. таблицу). Например, для графена $E^a = 16.4$ GPa и $E^z = 13.9$ GPa.

Температура также играет важную роль в снижении прочности графена независимо от наличия дефекта [53–55]. Тепловые флуктуации вызывают образование вакансий или дислокаций, поскольку температура увеличивает возможность движения атомов в структуре. Вследствие этого прочность графена значительно снижается. Предел прочности и деформация разрушения графена при растяжении вдоль направления „кресло“ при комнатной температуре понижается более чем в два раза по сравнению с расчетом при 0 К (см. таблицу). Аналогичные результаты получены для графена с дефектом СУ. Модуль упругости E практически не зависит от температуры, что согласуется с предыдущими исследованиями [56]. Повышение температуры значительно снижает σ_{UTS}^a графена и графена с дефектом СУ, в то время как для графена с ДД температура практически не влияет на σ_{UTS}^a . При растяжении в направлении „зигзаг“ влияние температуры не столь значительно.

Очень близкие значения углов наклона прямолинейных участков кривых „напряжение–деформация“ для всех структур с ДД показывает, что расстояние между дислокациями в диполе не оказывает заметного влияния на модуль упругости графена. Найденные значения E находятся в диапазоне от 3.76 до 4.14 GPa для растяжения вдоль направления „кресло“, и от 3.00 до 3.52 GPa для растяжения вдоль направления „зигзаг“. Отсюда можно сделать вывод, что наличие ДД не оказывает существенного влияния на упругие свойства графена. Ранее в экспериментальных и теоретических исследованиях было показано, что упругие свойства подобным образом не зависят от типа границы зерен [7,57].

2.2. Анализ механизмов разрушения

Появление складок при данных условиях деформирования определяет вид кривых „напряжение–деформация“. На рис. 2,3 приведены зависимости напряжения (рис. 2, *a*, 3, *a*) и средней амплитуды складки (рис. 2, *b*, 3, *b*) от степени деформации для растяжения вдоль направления „кресло“ („зигзаг“) при температуре 0 К для графена, СУ, ДД₂ и ДД₆. Зависимости представлены только для ДД₂ и ДД₆, поскольку общее поведение графена с ДД практически одинаково. Все обнаруженные отличия будут рассмотрены в тексте. Здесь же приведена эволюция структуры рассмотренных ДД в критических точках.

Средняя амплитуда складок рассчитывается как $\bar{A} = 0.5(|A_{\max}| + |A_{\min}|)$, где A_{\max} — максимальная амплитуда, а A_{\min} — минимальная амплитуда складок. Полученное значение амплитуд хорошо согласуется с

литературными данными [30,32]. Вид зависимостей средней амплитуды от степени деформации для дефектов ДД₂ и ДД₆ показывает, что графен с любым ДД образует складки практически одной амплитуды.

Рассмотрим подробно кривые деформации при растяжении в направлении „кресло“. Поскольку кривые для ДД₂ и ДД₆ практически идентичны, в дальнейшем будем рассматривать только ДД₂. На кривых деформации можно выделить четыре стадии нагружения: I — после окончания упругой стадии и до точки А; II — между А и В; III — между В и С; IV — между С и D. Практически для всех структур в критических точках наблюдается одинаковый характер деформирования. Точку С можно рассматривать как предкритическое состояние. Отметим, что в точке D для бездефектного графена уровень критического напряжения выше, чем для дефектных структур.

Перед точкой А амплитуда складок постепенно увеличивается для всех структур. Следует отметить, что размер ячейки структуры по направлению x („кресло“) достаточно большой для получения двух складок с одинаковыми параметрами. Ранее в работе [32] было показано, что амплитуда и длина складки зависят от размера графеновой наноленты, что справедливо и для графена. Максимальное значение амплитуды для графена достигается в точке В, для графена с СУ и ДД₂ — при $\epsilon_{xx}^a = 0.3$. Отметим, что деформация происходит за счет двух факторов: изменения параметра решетки и изменения амплитуды складок графена.

Проанализируем трансформацию связей в структуре в процессе растяжения графена и графена с дефектами. Для простоты обозначим связи в направлении „кресло“ как a , в направлении „зигзаг“ — как b (рис. 2 *b*, 3 *b*). В графене с началом деформации связь a непрерывно растягивается до точки А, достигая значения 1.7 Å, которое сохраняется постоянным до точки С. Длина связи b начинает расти только после точки А. Поскольку после точки А связь a больше не может удлиняться, дальнейшая деформация происходит за счет увеличения амплитуды складок, изменения валентных углов и длины связи b . После точки С связь a снова начинает удлиняться вплоть до разрыва. Из рис. 2 видно, что в точке С графен распрямляется и, таким образом, преобладающим механизмом деформации является растяжение связей.

Если рассматривать структуры с ДД_{*n*}, то основные изменения длин связей происходят вблизи дефекта, а не непосредственно на нем. Связь a (общая для пентагона и гептагона, из которых состоит дислокация) ведет себя аналогично связи a в графене и является наиболее прочной. Остальные связи в дефекте и вблизи него практически не меняются до т. В. Затем происходит быстрое увеличение длины связи b , что делает возможным дальнейшее растяжение графена. Таким образом, можно сделать вывод, что, когда связи ориентированы вдоль направления растяжения (в данном случае — „кресло“), они могут обеспечивать растяжение с одновременным образованием складок. Но когда эти связи критически

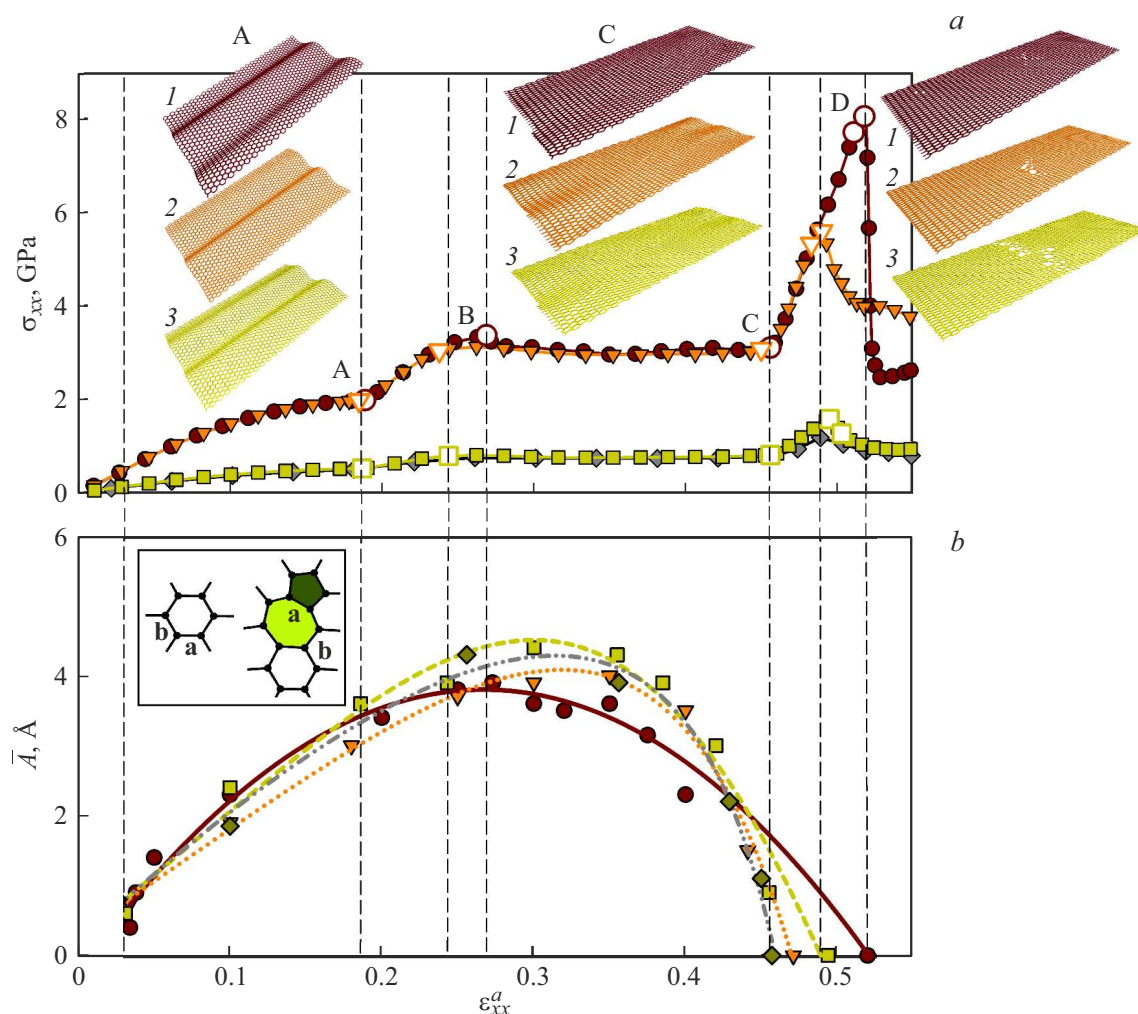


Рис. 2. Результаты моделирования растяжения вдоль направления „кресло“ при $T = 0$ К. Вертикальные тонкие черные штриховые линии показывают различные стадии деформации. *a* — зависимость напряжения от деформации для графена (круг), графена с дефектом СУ (треугольник), ДД₂ (квадрат) и ДД₆ (ромб). Точки А, В, С, D обозначают переход из одной стадии нагружения в другую для каждой структуры. Структура в критических точках А, С и в момент разрушения приводится в аксонометрической проекции: графен (1), графен с СУ (2) и графен с ДД₂ (3); *b* — средняя амплитуда складок \bar{A} как функция степени деформации для бездефектного графена (круг), графена с СУ (треугольник), ДД₂ (квадрат) и ДД₆ (ромб). Символами показаны численные данные, линиями — их аппроксимация. Там же приведена иллюстрация обозначения связей в бездефектном и дефектном графене: *a* — связь в направлении „кресло“, *b* — в направлении „зигзаг“.

напряжены, основную роль начинают играть связи с другой ориентацией.

Отметим, что расположение дефекта влияет на распределение складок. Дефект СУ в процессе деформации располагается на стенке одной из складок, в то время как ДД₂ размещается между двумя складками. Увеличение плеча диполя приводит к небольшому перераспределению в структуре: каждая дислокация в диполе располагается на стенках противоположных складок. После перехода от волнистого графена к плоскому для всех рассмотренных структур в точке С происходит еще одно структурное преобразование: гексагоны с равным размером длин связей трансформируются в вытянутые, и это является докритическим превращением. В бездефектном графене разрушение начинается в любом

месте его базисной плоскости. Для графена с ДД распрямление складок начинается от места расположения дефекта, а затем после полного распрямления графена происходит его разрушение, причем разрыв начинается близко к дефекту и проходит по диагонали от гексагона.

Следует отметить, что графен с ДД₆ демонстрирует тенденцию к появлению третьей складки, но наличие дефекта препятствует этому. Более того, графен с ДД₆–ДД₁₀ не превращается полностью в плоский перед разрушением. Также при растяжении этих структур появляется новый дефект 5–8–5.

При растяжении по направлению „зигзаг“ ситуация несколько проще: определяются только две стадии — после окончания упругой стадии и до точки I, и между

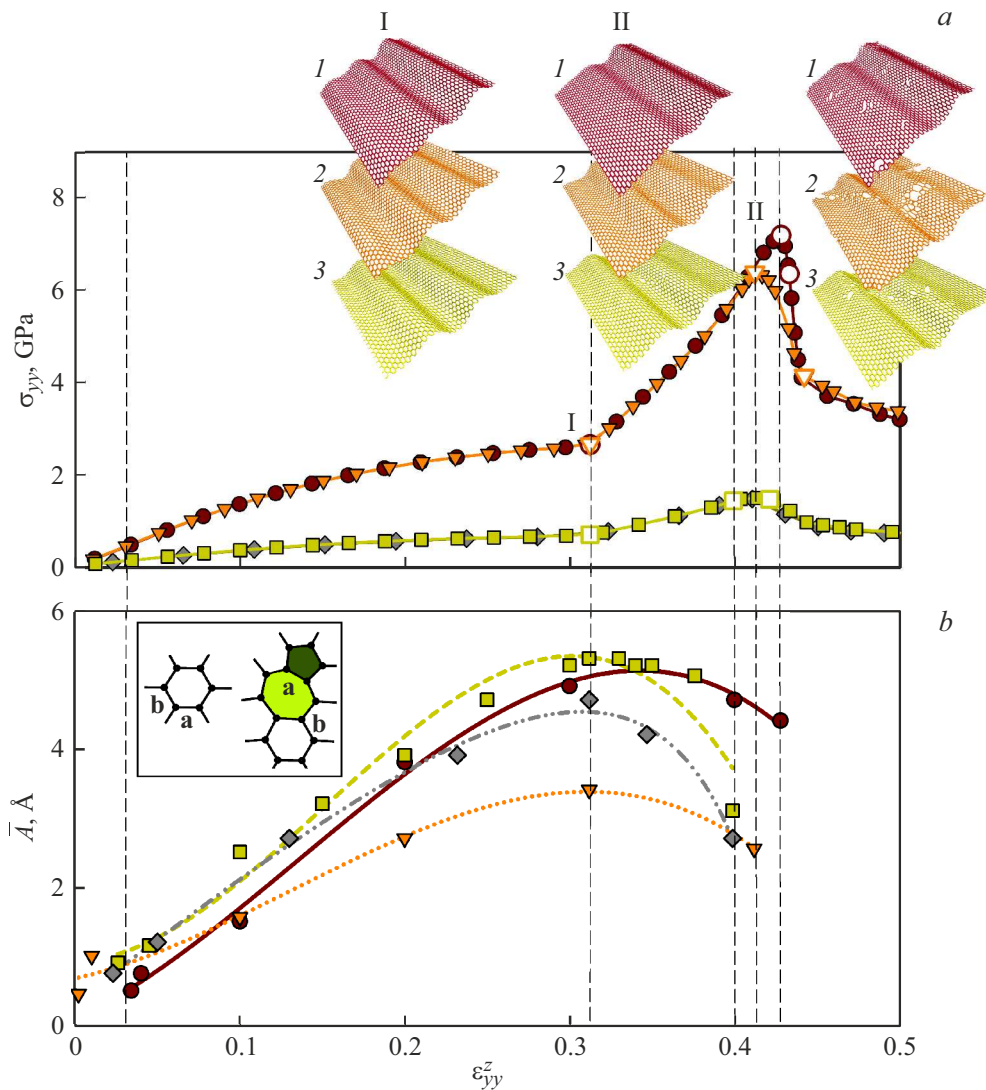


Рис. 3. Результаты моделирования растяжения вдоль направления „зигзаг“ при $T = 0$ К. Вертикальные тонкие черные штриховые линии показывают различные стадии деформации. *a* — зависимость напряжения от деформации для графена (круг), графена с дефектом СУ (треугольник), ДД₂ (квадрат) и ДД₆ (ромб). Точки I и II обозначают переход из одной стадии нагружения в другую для каждой структуры. Структура в критических точках I, II и в момент разрушения приводится в аксонометрической проекции: графен (1), графен с СУ (2) и графен с ДД₂ (3); *b* — средняя амплитуда волн \bar{A} как функция степени деформации для бездефектного графена (круг), графена с СУ (треугольник), ДД₂ (квадрат) и ДД₆ (ромб). Символами показаны численные данные, линиями — их аппроксимация. Там же приведена иллюстрация обозначения связей в бездефектном и дефектном графене: *a* — связь в направлении „кресло“, *b* — в направлении „зигзаг“.

токами I и II. Складки не исчезают вплоть до разрушения, при этом они не равномерны, в отличие от растяжения по направлению „кресло“. Это объясняется тем, что длины структуры недостаточно для получения равномерных складок. Графен имеет три складки в точке I и две складки в точке II, в обоих случаях разной амплитуды. Однако наличие дефектов влияет на конфигурацию складок — для графена с СУ и ДД образуются более равномерные складки с близкими значениями амплитуд. Аналогично случаю растяжения в направлении „кресло“, значения амплитуд непрерывно увеличивается до точки I, а затем медленно уменьшается до точки II.

Проанализируем трансформацию связей в структуре. Для бездефектного графена связь *b*, ориентированная почти в том же направлении, что и направление растяжения, слабее и быстро удлиняется до точки I. После этого все изменения связей и валентных углов приводят к непрерывному увеличению как связи *a*, так и *b*, пока не наступит докритическая стадия. Для графена с ДД на первой стадии деформации (даже при $\epsilon_{yy}^z = 0.11$) наблюдается резкое удлинение связи *b*, которая находится вблизи дефекта. Связи, вдоль которых была приложена деформация растяжения, являются самыми слабыми в графене. При растяжении графена с ДД разрушение начинается вблизи дефекта.

Заключение

Таким образом, с помощью атомистического моделирования изучено влияние дислокационного диполя на прочность графена. Проанализированы механические свойства графена при растяжении вдоль направления „кресло“ и „зигзаг“ при 0 и 300 К. При этом рассматривается случай растяжения, при котором разрешено естественное коробление графена.

При наличии складок в графене процесс разрушения достаточно сложен и включает образование складок на начальной стадии деформирования и возвращение к плоской форме на поздних стадиях растяжения. При этом происходят непрерывные и достаточно разнообразные изменения длин связей, а также появление новых дефектов. Все эти механизмы не противоречат друг другу, а действуют одновременно, что приводит к достаточно высокой деформации разрушения. Однако предел прочности при растяжении и модуль Юнга графена со складками очень низкие, поскольку коробление делает графен намного слабее.

Температура, сморщивание и наличие дефектов являются основными факторами, влияющими на механические свойства графена. Наличие дислокационного диполя с плечом более 15 Å может повлиять на особое распределение складок, например, предотвратить их образование. Увеличение длины плеча диполя не приводит к существенному снижению предела прочности графена при растяжении. Для графена с дислокационным диполем повышение температуры не приводит к значительному снижению прочности графена.

Финансирование работы

Исследование выполнено при финансовой поддержке госзадания ИПСМ РАН (молодежная лаборатория).

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] J.B. Wu, M.L. Lin, X. Cong, H.N. Liu, P.H. Tan. *Chem. Society Rev.*, **47**, 1822 (2018). DOI: 10.1039/c6cs00915h
- [2] P.M. Taylor, R.J. Wheatley, N.A. Besley. *Carbon*, **113**, 299 (2017). DOI:10.1016/j.carbon.2016.11.059
- [3] M. Braun, F. Arca, M. Ariza. *Intern. J. Mechan. Sci.*, **209**, 106702 (2021). DOI: 10.1016/j.ijmecsci.2021.106702
- [4] A. Cao, B. Shen, Q. Lin, S. Chen, Z. Huang, Z. Ji, Z. Zhang. *Computational Mater. Sci.*, **173**, 109423 (2020). DOI: 10.1016/j.commatsci.2019.109423
- [5] S. Ajori, A. Ameri, R. Ansari. *Superlattices and Microstructures*, **142**, 106526 (2020). DOI: 10.1016/j.spmi.2020.106526
- [6] Y. Fu, T. Ragab, C. Basaran. *Mater. Sci.*, **124**, 142 (2016). DOI: 10.1016/j.commatsci.2016.07.022
- [7] T.H. Liu, C.W. Pao, C.C. Chang. *Carbon*, **50**, 3465 (2012). DOI: 10.1016/j.carbon.2012.03.012
- [8] T.A. Oliveira, P.V. Silva, V. Meunier, E.C. Girão. *Carbon*, **201**, 222 (2023). DOI: 10.1016/j.carbon.2022.08.079
- [9] H. Wang, Y. Wang, B. Bai, X. Guo, J. Xue. *Appl. Surf. Sci.*, **531**, 147347 (2020). DOI: 10.1016/j.apsusc.2020.147347
- [10] M. Shakeri. *Superlattices and Microstructures*, **128**, 116 (2019). DOI: 10.1016/j.spmi.2019.01.019
- [11] F. Wang, X. Xu, J. Mao. *Diamond Related Mater.*, **109**, 108037 (2020). DOI: 10.1016/j.diamond.2020.108037
- [12] A.K. Manna, S.J. Gilbert, S.R. Joshi, T. Komesu, S. Varma. *Physica E*, **143**, 115329 (2022). DOI: 10.1016/j.physe.2022.115329
- [13] А.И. Подливаев, Л.А. Опенов. *ФТТ*, **57** (4), 802 (2015).
- [14] S.T. Skowron, I.V. Lebedeva, A.M. Popov, E. Bichoutskaia. *Chem. Society Rev.*, **44**, 3143 (2015). DOI: 10.1039/c4cs00499j
- [15] M. Ariza, M. Ortiz. *J. Mechan. Phys. Solids*, **58**, 710 (2010). DOI: 10.1016/j.jmps.2010.02.008
- [16] Y. Yao, S. Wang, J. Bai, R. Wang. *Physica E*, **84**, 340 (2016). DOI: 10.1016/j.physe.2016.08.004
- [17] M. Lazar. *Phys. Lett. A*, **377**, 423 (2013). DOI:10.1016/j.physleta.2012.12.005
- [18] L. Xu, N. Wei, Y. Zheng. *Nanotechnology*, **24**, 505703 (2013). DOI: 10.1088/0957-4484/24/50/505703
- [19] Y.X. Du, L.J. Zhou, J.G. Guo. *Mater. Chem. Phys.*, **288**, 126412 (2022). DOI: 10.1016/j.matchemphys.2022.126412
- [20] M. Torkaman-Asadi, M. Kouchakzadeh. *Comput. Mater. Sci.*, **210**, 111457 (2022). DOI: 10.1016/j.commatsci.2022.111457
- [21] M.A.N. Dewapriya, R.K.N.D. Rajapakse. *J. Appl. Mechan.*, **81**, 081010 (2014). DOI: 10.1115/1.4027681
- [22] K.K. Gupta, S. Dey. In: *Lecture Notes on Multidisciplinary Industrial Engineering*, ed. by R.G. Narayanan, S.N. Joshi, U.S. Dixit. (Springer, Singapore, 2019), p. 793. DOI: 10.1007/978-981-32-9072-3_66
- [23] K.K. Gupta, T. Mukhopadhyay, A. Roy, S. Dey. *J. Mater. Sci. Technol.*, **50**, 44 (2020). DOI: 10.1016/j.jmst.2020.03.004
- [24] L.D. Landau. *Phys. Z. Sowjet Union*, **11**, 56 (1937).
- [25] R. Peierls. *Helv. Phys. Acta*, **7**, 81 (1934).
- [26] N.D. Mermin. *Phys. Rev.*, **176**, 250 (1968).
- [27] D. Nelson, L. Peliti. *J. Physique*, **48**, 1085 (1987). DOI: 10.1051/jphys:019870048070108500
- [28] A. Fasolino, J.H. Los, M.I. Katsnelson. *Nature Mater.*, **6**, 858 (2007). DOI: 10.1038/370nmat2011
- [29] V.B. Shenoy, C.D. Reddy, A. Ramasubramaniam, Y.W. Zhang. *Phys. Rev. Lett.*, **101**, 245501 (2008). DOI: 10.1103/physrevlett.101.245501
- [30] S. Deng, V. Berry. *Mater. Today*, **19**, 197 (2016). DOI: 10.1016/j.mattod.2015.10.002
- [31] C. Wang, L. Lan, Y. Liu, H. Tan. *Comput. Mater. Sci.*, **77**, 250 (2013). DOI: 10.1016/j.commatsci.2013.04.051
- [32] T. Zhang, X. Li, H. Gao. *J. Mechan. Phys. Solids*, **67**, 2 (2014). DOI: 10.1016/j.jmps.2014.02.005
- [33] J.A. Baimova, S.V. Dmitriev, K. Zhou. *Physica Status Solidi (b)*, **249**, 1393 (2012). DOI: 10.1002/pssb.201084224
- [34] J.A. Baimova, S.V. Dmitriev, K. Zhou, A.V. Savin. *Phys. Rev. B*, **86**, 035427 (2012). DOI: 10.1103/physrevb.86.035427
- [35] H. Qin, Y. Sun, J.Z. Liu, M. Li, Y. Liu. *Nanoscale*, **9**, 4135 (2017). DOI: 10.1039/c6nr07911c
- [36] J.N. Grima, S. Winczewski, L. Mizzi, M.C. Grech, R. Cauchi, R. Gatt, D. Attard, K.W. Wojciechowski, J. Rybicki. *Tailoring Adv. Mater.*, **27**, 1455 (2014). DOI: 10.1002/387adma.201404106

- [37] S. Zhao, Y. Zhang, J. Yang, S. Kitipornchai. *Carbon*, **168**, 135 (2020). DOI: 10.1016/j.carbon.2020.06.054
- [38] S. Zhao, Y. Zhang, J. Yang, S. Kitipornchai. *J. Mater. Sci. Technol.*, **120**, 196 (2022). DOI: 10.1016/j.jmst.2021.392.12.042
- [39] H.S. Seung, D.R. Nelson. *Phys. Rev. A*, **38**, 1005 (1988). DOI: 10.1103/physreva.38.1005
- [40] G.-D. Lee, E. Yoon, K. He, A.W. Robertson, J.H. Warner. *Nanoscale*, **6**, 14836 (2014). DOI: 10.1039/c4nr04718d
- [41] Y. Kawamura, Y. Ohta. *Comp. Mater. Sci.*, **205**, 111224 (2022). DOI: 10.1016/j.commatsci.2022.111224
- [42] E. Ertekin, D.C. Chrzan, M.S. Daw. *Phys. Rev. B*, **79**, 155421 (2009). DOI: 10.1103/physrevb.79.155421
- [43] Y. Liu, B. I. Yakobson. *Nano Lett.*, **10**, 2178 (2010).
- [44] S. Chen. *Buckling and Topological Defects in Graphene and Carbon Nanotubes* (UC Berkeley Electronic Theses and Dissertations, University of California, Berkeley, 2012), <https://escholarship.org/uc/item/59v245r8>
- [45] S.J. Stuart, A.B. Tutein, J.A. Harrison. *Chem. Phys.*, **112**, 6472 (2000). DOI: 10.1063/1.481208
- [46] C. Lee, X. Wei, J.W. Kysar, J. Hone. *Science*, **321**, 385 (2008). DOI: 10.1126/science.1157996
- [47] G. Zhang, H. Liu, Y. Chen, H. Qin, Y. Liu. *J. Mechan. Phys. Solids*, **169**, 105080 (2022). DOI: 10.1016/j.jmps.2022.105080
- [48] M. Chen, S. Quek, Z. Sha, C. Chiu, Q. Pei, Y. Zhang. *Carbon*, **85**, 135 (2015). DOI: 10.1016/j.carbon.2014.12.092
- [49] K. Zhou, B. Liu. In book: *Molecular Dynamics Simulation*, ed. by E. Thompson. (Elsevier Inc., U.S., 2022), p. 129. DOI: 10.1016/b978-0-12-816419-8.00010-6
- [50] K.A. Krylova, L.R. Safina, S.A. Shcherbinin, J.A. Baimova. *Methodology for Materials*, **15**, 4038 (2022). DOI: 10.3390/ma15114038
- [51] B. Mortazavi, S. Ahzi. *Carbon*, **63**, 460 (2013). DOI: 10.1016/j.carbon.2013.07.017
- [52] N. Jing, Q. Xue, C. Ling, M. Shan, T. Zhang, X. Zhou, Z. Jiao. *RSC Advances*, **2**, 9124 (2012). DOI: 10.1039/c2ra21228e
- [53] A.I.C. Mihaila, T. Susi, J. Kotakoski. *Scientific Reports*, **2**, 9124, (2019). DOI: 10.1038/s41598-019-49565-4
- [54] T. Susi, J.C. Meyer, J. Kotakoski. *Nature Rev. Phys.*, **1**, 397 (2019). DOI: 10.1038/s42254-019-0058-y
- [55] O. Dyck, S. Yeom, S. Dillender, A.R. Lupini, M. Yoon, S. Jesse. *Carbon*, **201**, 212 (2023). DOI: 10.1016/j.carbon.2022.09.006
- [56] H. Zhao, N.R. Aluru. *J. Appl. Phys.*, **108**, 064321 (2010). DOI: 10.1063/1.3488620
- [57] C.S. Ruiz-Vargas, H.L. Zhuang, P.Y. Huang, A.M. van der Zande, S. Garg, P.L. McEuen, D.A. Muller, R.G. Hennig, J. Park. *Nano Lett.*, **11**, 2259 (2011). DOI:10.1021/nl200429f