

08,10

Влияние деформации на радиационное формирование межслоевых перемишек в двухслойном графене

© А.И. Подливаев^{1,2}

¹ Национальный исследовательский ядерный университет „МИФИ“, Москва, Россия

² Научно-исследовательский институт проблем развития научно-образовательного потенциала молодежи, Москва, Россия

E-mail: AIPodlivayev@mephi.ru

Поступила в Редакцию 26 февраля 2024 г.

В окончательной редакции 26 февраля 2024 г.

Принята к публикации 20 марта 2024 г.

В рамках неортогональной модели сильной связи исследовано влияние равномерного растяжения двухслойного графена на процесс радиационного формирования межслоевых перемишек в этой структуре. Модельные расчеты показали, что растяжение двухслойного графена на 5% увеличивает в ~ 2 раза суммарную вероятность образования дефектов всех типов. При этом показано, что от деформации не зависит доля структур с межслоевыми перемишками, которые обладают достаточной термической устойчивостью для долговременного существования при комнатной температуре. В деформированном и недеформированном двухслойном графене эта доля равна $\sim 15\%$. Одна из найденных устойчивых структур с межслоевой перемишкой является разновидностью пары Френкеля и обладает энергией активации отжига равной 2.11 eV. В более ранней работе при моделировании облучения недеформированного двухслойного графена в рамках аналогичной модели данный дефект не наблюдался.

Ключевые слова: двухслойный графен, радиационные дефекты, межслоевые перемишки, деформация, молекулярная динамика.

DOI: 10.61011/FTT.2024.05.58082.63

1. Введение

Свойства планарной структуры — графена [1] — с высокой подвижностью носителей заряда [2] и уникальной прочностью [3] могут эффективно управляться комбинированием графена как с планарными структурами, так и с отдельными элементами и молекулами. Подобная адаптация свойств монослоя графена в настоящее время активно изучается поскольку может иметь практическое применение при создании таких элементов графеновой электроники как транзисторы, микроконденсаторы, биосенсоры и т.п. (см. например работы [4–8]). Практическая возможность управления механическими и электронными свойствами активировала поиск родственных графену планарных структур, состоящих из одного или нескольких атомных слоёв. Так, в 2019 г. была синтезирована двухслойная структура „графен–борофен“ [9] с высокой устойчивостью и упругостью этой гетероструктуры, которая может найти применение в опто- и акустоэлектронике [10,11]. Был предсказан [12], а позже синтезирован [13] диаман — двухслойная углеродная наноструктура с межслоевыми ковалентными связями. Теоретические исследования показали, что диаман может применяться при создании оптоэлектронных устройств [14]. Исходным материалом при синтезе диамана является двухслойный графен (Bilayer Graphene, BG), который также может

применяться при создании элементов графеновой электроники. Так в работе [15] был представлен синтез BG и показана возможность управления шириной запрещенной зоны. Возможность управления межзонной щелью вертикальным электрическим полем делает BG перспективным материалом при создании нового типа транзисторов [16,17]. Возможно использование BG в качестве датчика влажности [18] и адсорбента ядовитых газов [19]. Показана потенциальная возможность применения дефектного двухслойного графена в качестве биосенсора [20]

Контролируемое формирование ковалентных межслоевых связей существенно расширяет спектр возможных применений BG. Формирование предельно возможного числа связей переводит структуру BG в диаман. В работе [21] в рамках теории функционала плотности (density functional theory, DFT) показана перспективность применения в электронике двухслойных перфорированных графеновых структур с межслоевыми перемишками. Рассмотрено возможное применение таких структур в качестве аккумуляторов для хранения водорода.

В работе [22] посредством статического и динамического моделирования изучается процесс образования межслоевых перемишек в BG под воздействием радиационного облучения, а также термическая устойчивость этих перемишек. Моделирование в работе [22] проводилось в рамках модели сильной связи (Nonorthogonal

Tight-Binding Model — NTBM, [23]) с дисперсионными поправками [24], которые позволяют адекватно учитывать межслоевое взаимодействие в графите и двухслойном графене. В работе [22] было показано, что под действием облучения в структуре ВГ действительно могут возникать межслоевые перемычки. При этом характер повреждения в структуре ВГ отличается от повреждения графита.

Общей чертой всех найденных дефектных конфигураций ВГ является существенное повреждение обеих графеновых плоскостей вблизи перемычки. Однако, эффективность образования термически устойчивых перемычек была низкой. Большинство ($\sim 85\%$) образовавшихся перемычек обладали низкой термической устойчивостью, не допускающей возможности их практического применения. Основная причина неустойчивости данных конфигураций в близком расположении остановившегося первично выбитого атома (ПВА) от места его исходной дислокации в неповрежденном ВГ. Цель настоящей работы — определение особенностей радиационного образования межслоевых перемычек в равномерно растянутом ВГ. Интерес к исследованию влияния деформации обусловлен двумя правдоподобными предположениями.

Во-первых, растяжение плоскостей ВГ в поперечном направлении увеличит сопротивляемость каждой графеновой плоскости смещению в поперечном направлении. Такое смещение вызывает ПВА, каналирующий между плоскостями. Уменьшение смещений подавляет процесс передачи энергии ПВА окружающему кристаллу, вследствие чего ПВА удаляется от места исходного расположения на большее расстояние и образовавшийся дефект может быть более устойчивым. Косвенно это предположение подтверждается расчетами работы [22]. В этой работе (где сопоставляются траектории ПВА в графите и в ВГ при равных начальных скоростях) показано, что длина пробега ПВА в графите выше, что связано большей сопротивляемостью поперечному смещению плоскостей графита.

Во-вторых, растяжение облегчает процесс образования необходимого повреждения обеих плоскостей, что повышает вероятность формирования перемычки (в том числе термически устойчивой).

2. Методы расчета

Аналогично работе [22] для моделирования выбрано приближение сильной связи [23,24]. Программная реализация потенциала NTBM [23] опубликована в работе [25]. Результаты данного подхода хорошо согласуются с результатами DFT для структур, содержащих атомы углерода в состояниях с различными типами гибридизации [26]. Данная модель успешно применялась для исследования множества систем, состоящих из атомов углерода, водорода, азота и кислорода (см., например, работы [22–26] и ссылки в них).

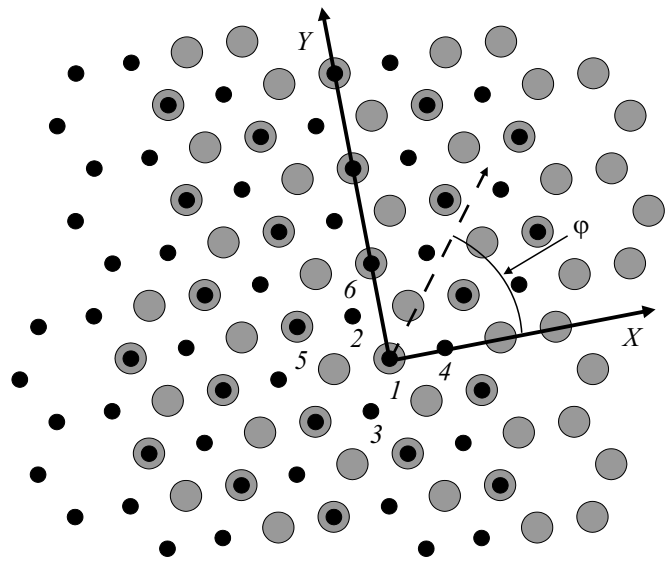


Рис. 1. Расчетная ячейка ВГ из 128 атомов (вид сверху). Серыми большими шариками обозначена нижняя графеновая плоскость (64 атома), черными маленькими — верхняя (64 атома).

Для исследования ВГ использовалась 2×2 сверхъячейка C_{128} , состоящая из двух слоев C_{64} (см. работу [34]). Декартовы координаты выбраны так, что слой ВГ перпендикулярен оси Z . На рис. 1 представлен фронтальный вид расчетной ячейки с декартовыми и сферическими координатами. Форма исходной ячейки идентична принятой в работе [22], в которой представлен также боковой вид ячейки.

При расчетах использовались периодические граничные условия двух типов. Вектора трансляции недеформированной V_0 и равномерно растянутой в направлениях (X, Y) структуры V_{stress} равны $(13.241, 0, 0)$, $(1.918, 13.101, 0)$, $(0, 0, \infty)$ и $(13.903, 0, 0)$, $(2.014, 13.756, 0)$, $(0, 0, \infty)$ (Å) соответственно. В работе [28] (проведенной в рамках аналогичного потенциала NTBM) отмечено, что равномерное растяжение в пределах 5% является упругим и такая величина деформации далека от критической, приводящей к разрыву структуры.

Начальные координаты атомов соответствовали деформированной структуре ВГ V_{stress} (см. рис. 1). При этом начальные значения межатомных сил равнялись нулю, а начальные значения скоростей равнялись нулю за исключением скорости единственного ПВА. Рассматривались два неэквивалентных варианта — в качестве ПВА выбирался атом с индексом $N_r = 1$ или с индексом $N_r = 2$ (см. рис. 1). Зенитный угол Θ направления начальной скорости ПВА принимал значения $(4/6, 5/6, 6/6) \times \pi$. Азимутальный угол ϕ принимал значения $(0/4, 1/4, 2/4, 3/4, 4/4) \times \pi$. Начальная кинетическая энергия E_0 ПВА принимала значения 21, 24, 27, 30, 33, 36 и 39 eV.

В настоящей работе так же, как и в работе [22], динамическое моделирование образования радиационных дефектов проводилось в рамках микроканонического ансамбля [35]. Применялся алгоритм Верле с временным шагом 0.3 fs. Динамическое моделирование проводилось для 3000 временных шагов, что соответствует реальному времени ~ 1 ps. После завершения динамической фазы дефектообразования структура равномерным сжатием возвращалась в нерастянутое состояние V_0 . После этого проводилась минимизация потенциальной энергии по координатам всех атомов. Данный подход позволяет выделять идентичные типы радиационных дефектов, образованных в исходно деформированном и недеформированном кристаллах. Для сопоставления характеристик радиационных дефектов определялись следующие величины: E_{rel} — энергия этого дефекта при нулевой температуре (энергия Вигнера). E_a — энергия активации отжига данного дефекта. A — частотный фактор в следующей формуле Аррениуса

$$\tau^{-1}(T) = A \exp(-E_a/k_B T), \quad (1)$$

где T — температура, k_B — константа Больцмана. $Dist$ — это расстояние от ПВА в конечном дефектном состоянии до центра вакансии в верхней плоскости BG. Обозначим радиус-вектор центра вакансии \mathbf{R}_{vac} . Если первично выбитым является атом с индексом $N_r = 1$ (см. рис. 1), то $\mathbf{R}_{\text{vac}} = (\mathbf{R}_2 + \mathbf{R}_3 + \mathbf{R}_4)/3$, где \mathbf{R}_i — радиус-вектор соответствующего граничного атома вакансии. Для ПВА с индексом $N_r = 2$, $\mathbf{R}_{\text{vac}} = (\mathbf{R}_1 + \mathbf{R}_5 + \mathbf{R}_6)/3$.

Посредством пакета программ [25] и нового алгоритма поиска седловых точек между двумя устойчивыми состояниями [36] исследуются наиболее вероятные траектории движения системы при отжиге дефекта. При этом определяются седловые конфигурации в пространстве обобщенных координат, что позволяет найти энергию активации отжига E_a . Частотный фактор A в формуле (1) определялся по формуле Виньярда (Vineyard [37]) из фоновых спектров системы в метастабильном дефектном состоянии и в седловой точке. Переменной $N_{\text{coord}} = C2, C3$ обозначено число ковалентных связей атома (две и три связи соответственно), формирующего мостик между графеновыми плоскостями с атомами этих плоскостей.

3. Результаты и обсуждение

Также как в работе [22] детально изучались только локальные дефекты с малым удалением ПВА от образовавшейся вакансии ($Dist < 4 \text{ \AA}$). При этих значениях величины $Dist$ наиболее энергетически выгодные конфигурации спиро-междоузельных атомов не наблюдались. Спиро-междоузельный атом (spiro interstitial [38]) расположен между соседними плоскостями графита или BG и ковалентно связан с двумя атомами углерода верхней и двумя атомами нижней атомных плоскостей. Найденные

Характеристики радиационных дефектов

	$Dist$ (\AA)	E_{rel} (eV)	E_a (eV)	N_{coord}	M (наст. работа)	M (работа [22])
B1	3.23	12	1.52	C3	3	2
B2	2.74	12.2	1.05	C3	1	0
B3	3.19	12.2	0.99	C3	1	0
B4	1.90	9.5	0.51	C3	11	2
B5	1.99	10.7	0.08	C3	1	0
B6	3.23	12.1	1.26	C3	1	0
B7	1.85	9.9	0.075	C2	4	4
B8	1.92	9.32	0.062	C3	4	1
B9	3.52	12.2	2.11	C3	1	0
B10	1.93	13.1	0.204	C3	1	0
I1	> 4	—	—	C2	5	2
I2	> 4	—	—	C2	52	25
Decay	—	—	—	—	24	20
Total sum					109	56

в настоящей работе дефектные конфигурации частично совпадают с конфигурациями, представленными в работе [22] и ниже (в основном тексте) обозначаются как: B1-B10, Decay, I1, I2. В конфигурациях B1-B10 (Bridge) присутствуют межслоевые мостики. Символом Decay обозначена конфигурация, в которых один атом в результате радиационного удара удаляется от остальной структуры на расстояние, исключающее межатомное взаимодействие. Из 24 случаев наблюдения данного дефекта удалялся от структуры ПВА, и только в трех случаях ПВА (при центральном ударе) передавал свой импульс другому атому, который далее отрывался от структуры. Суммарное количество дефектов M всех типов с некоторыми их основными характеристиками представлено в таблице.

Детальный перечень характеристик дефектов при различных углах вылета и энергиях ПВА представлен в Приложении к статье. Так же, как и в работе [22] основная масса образовавшихся при облучении межслоевых мостиков термически неустойчива. Практический интерес из перечисленных в таблице представляют только дефекты B1 и B9 с энергиями активации равными, соответственно, 1.52 и 2.11 eV. Действительно, третий по величине энергии активации мостик B6 с величиной E_a 1.26 eV имеет частотный фактор $A = 5 \cdot 10^{14} \text{ s}^{-1}$. При таких параметрах время жизни данного дефекта в соответствие с выражением (1) при температурах 300 и 500 K равно месяц и 0.01 с соответственно. Этого времени жизни недостаточно для устойчивой эксплуатации при комнатной температуре. Для срав-

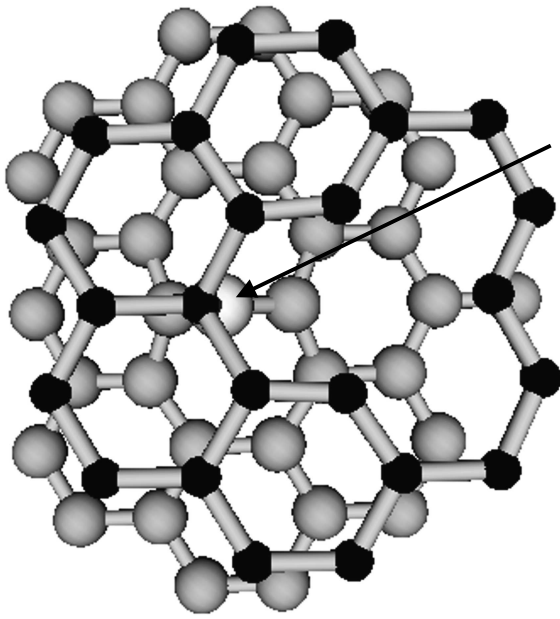


Рис. 2. Фрагмент структуры ВГ с дефектом В1 из 57 атомов (вид сверху). Серыми большими шариками обозначена нижняя графеновая плоскость, черными маленькими — верхняя. Светлым большим шариком — ПВА, образующий межслоевой мостик (отмечен стрелкой).

нения частотные факторы отжига дефектов В1 и В9 (энергии активации 1.52 и 2.11 eV) равны $2.3 \cdot 10^{14}$ и $2.2 \cdot 10^{13} \text{ s}^{-1}$. При таких значениях параметров времена отжига дефектов В1 и В9 равны, соответственно, $1.4 \cdot 10^{11}$ и $1.3 \cdot 10^{22} \text{ s}$ при температуре $T = 300 \text{ K}$. При температуре $T = 500 \text{ K}$ эти величины равны, соответственно, 9 и $8 \cdot 10^7 \text{ s}$. Этой устойчивости достаточно для долговременного существования мостика при комнатной температуре. Поэтому в настоящей работе детальное описание формы дано только для дефекта В9 и, частичное, для дефекта В1. Более полное описание дефекта В1 представлено в работе [22], а фронтальный вид этого дефекта представлен на рис. 2. В деформированной структуре данный дефект наблюдался в трех вариантах облучения при $N_r = 2$, $E_0 = 24 \text{ eV}$ со следующими угловыми параметрами: ($\Theta/\pi = 4/6$, $\varphi/\pi = 0/4$); ($\Theta/\pi = 4/6$, $\varphi/\pi = 3/4$); ($\Theta/\pi = 6/6$, $\varphi/\pi = 0/4$). Фактически, ввиду малой удаленности межплоскостного мостика от вакансии верхней графеновой плоскости ($Dist = 3.23 \text{ \AA}$) дефект В1 можно рассматривать как пару Френкеля. Энергетические характеристики этого дефекта коррелируют с соответствующими характеристиками пары Френкеля, определенными в рамках DFT. Так в обзоре [39] энергия пары Френкеля лежит в интервале 10.6–13.7 eV (12 eV в настоящей работе), а энергия активации отжига, приведенная в работе [40] равна 1.3 eV (1.52 eV в настоящей работе).

Наиболее устойчивый дефект В9 из образовавшихся при облучении деформированного ВГ возникает

при следующих параметрах ПВА: $N_r = 2$, $E_0 = 30 \text{ eV}$, $\Theta/\pi = 5/6$, $\varphi/\pi = 0/4$. Форма этого дефекта представлена на рис. 3. Также как и в конфигурации В1 ПВА образует межслоевой мостик и ковалентно связан одной связью с атомом верхней графеновой плоскости. В обоих дефектах В1 и В9 ПВА в нижней плоскости разрывает С–С-связь и образует на ее месте две ковалентных связи (см. рис. 3). Фактически, ПВА является для нижней плоскости междоузельным атомом. При этом, отличие дефекта В1 от В9 заключается в ориентации разрываемой связи (см. рис. 2 и 3).

Различие энергий E_{rel} дефектов В1 и В9 невелико (12 и 12.2 eV), однако энергии активации отжига E_a заметно различаются (1.52 и 2.11 eV соответственно).

При оптимальной траектории в процессе отжига дефекта В9 структура ВГ проходит через множество промежуточных локально устойчивых конфигураций.

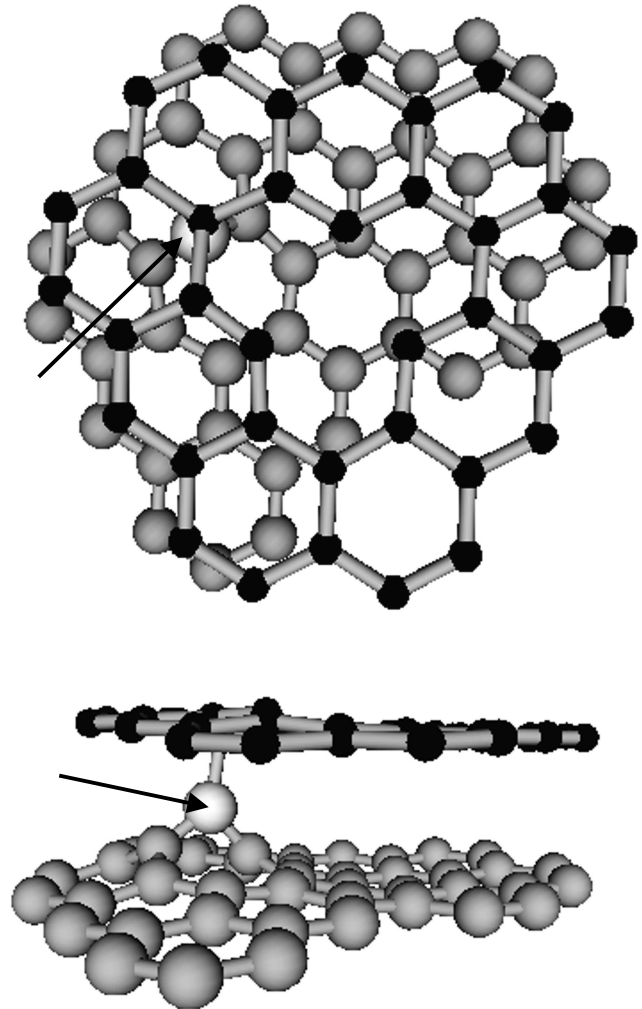


Рис. 3. Фрагмент структуры ВГ с дефектом В9 из 80 атомов (вид сверху и боковой вид). Серыми большими шариками обозначена нижняя графеновая плоскость, черными маленькими — верхняя. Светлым большим шариком — ПВА, образующий межслоевой мостик (отмечен стрелкой).

На рис. 4 представлена зависимость потенциальной энергии вдоль оптимальной траектории, определенной по цепному алгоритму работы [36]. Начальная точка траектории соответствует дефекта В9, а конечная — бездефектной конфигурации. Также на рис. 4 представлена мера межатомных сил при движении вдоль оптимальной траектории. В качестве меры сил выбран модуль максимальной (по всем атомам структуры) силы, действующей на один атом. Локально устойчивые конфигурации, через которые проходит траектория, характеризуются точками минимумов на кривой потенциальной энергии, представленной на рис. 4 и нулевыми (малыми) величинами мер сил. На рис. 4 видно, что мера сил, в частности, пренебрежимо мала в начальной, конечной и в седловой конфигурации. Седловая конфигурация (точка с максимальной энергией на рис. 4) определяет энергию активации отжига. Анализ фоновых частот показал, что начальная и конечная конфигурации устойчивы — в их спектре отсутствуют мнимые частоты. В седловой конфигурации присутствует единственная мнимая частота, величина которой равна 598 cm^{-1} . Форма данной седловой конфигурации представлена на рис. 5. На этом рисунке видно, что в седловой конфигурации восстановилась идеальная структура нижней графеновой плоскости. Атом, который являлся межплоскостным мостиком оторвался от нижней плоскости. При этом образовалась вторая ковалентная связь ПВА с верхней плоскостью.

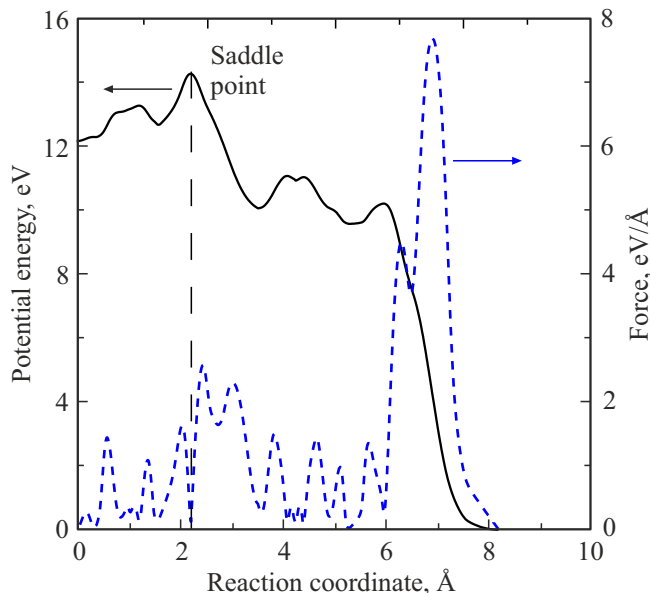


Рис. 4. Изменение потенциальной энергии и меры силы при трансформации структуры ВG с дефектом В9 в бездефектную конфигурацию. Сплошная черная линия соответствует потенциальной энергии, а пунктирная синяя — мере силы. Нулевое значение энергии соответствует энергии бездефектной конфигурации. Нулевое значение координаты реакции соответствует дефекту В9.

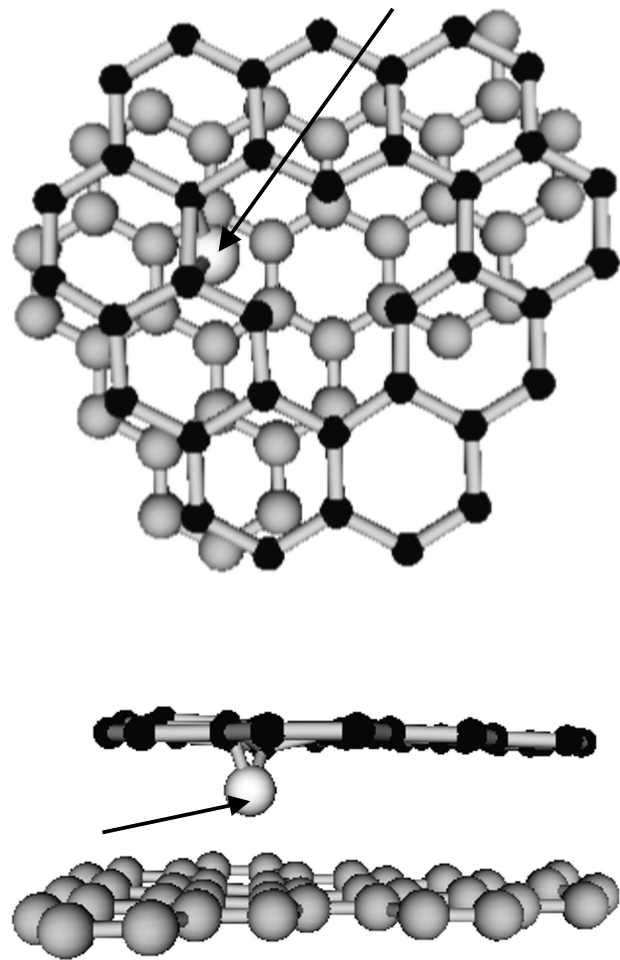


Рис. 5. Фронтальный и боковой виды фрагмента седловой конфигурации структуры ВG с дефектом В9 из 74 атомов. Обозначения атомов аналогичны рис. 2 и 3.

4. Заключение

Сопоставление процессов радиационного формирования межслоевых перемычек в ненапряженном и в растянутом кристаллах ВG показало, что двухосное растяжение структуры на 5% существенно увеличивает скорость образования радиационных дефектов. Кроме общих дефектов, возникающих как в ненапряженной структуре, так и в растянутом кристалле, при деформации ВG отмечалось формирование дефектов нового типа. Так была обнаружена термически устойчивая пара Френкеля с энергией активации $E_a = 2.11 \text{ eV}$. Общей чертой процессов радиационного формирования межслоевых перемычек является малая доля этих дефектов устойчивых при комнатной температуре по сравнению с общим количеством образовавшихся дефектов. Также вне зависимости от деформации общей характерной чертой всех обнаруженных устойчивых перемычек является существенное повреждение вблизи перемычки как нижней, так и верхней графеновых плоскостей.

Благодарности

Автор благодарен К.П. Катину за обсуждение результатов работы.

Финансирование работы

Работа выполнена при поддержке программы НИЯУ МИФИ „Приоритет 2030“.

Конфликт интересов

Автор заявляет, что у него нет конфликта интересов.

Приложение

Характеристики радиационных дефектов в деформированном двухслойном графене

Θ/π	φ/π	N_r	E_0					
			24 eV	27 eV	30 eV	33 eV	36 eV	
4/6	1	12	I2	I2	I2	Decay	Decay	Decay
0/4	2	B1	B2	B3	C4; 5.27	I2	I2	
4/6	1	I2	I2	I2	I2	C3; 4.868	I2	
1/4	2	B4	I2	I2	B4	I2	I2	
4/6	1	I2	I2	I2	I2	I2	I2	
2/4	2	I2	I2	I2	I2	I2	I2	
4/6	1	0	I2	I2	B5	I2	Decay	
3/4	2	B1	I1	I2	I2	I2	I2	
4/6	1	I1	I1	B6	I1	I1	C3; 8.07	
4/4	2	I2	I2	I2	B7	I2	Decay	
5/6	1	B8	0	I2	I2	C3; 4.77	Decay	
0/4	2	0	B4	B9*	Decay	Decay	Decay	
5/6	1	0	B8	B8	B10	I2	Decay	
1/4	2	B4	B4	B4	B4	B4	melt	
5/6	1	B8	0	0	I2	I2	I2	
2/4	2	B4	B4	B4	I2	I2	I2	
5/6	1	0	0	I2	I2	I2	I2	
3/4	2	0	0	0	B7	B4	I2	
5/6	1	0	0	0	Decay	Decay	Decay	
4/4	2	B7	I2	B7	B7	D1	D1	
6/6	1	0	0	Decay	Decay	Decay	Decay	
0/4	2	B1	Decay	Decay	Decay	Decay	Decay	

Список литературы

- [1] K.S. Novoselov, A.K. Geim, S.V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S.V. Dubonos, I.V. Grigorieva, A.A. Firsov. *Science* **306**, 666 (2004).
- [2] K.S. Novoselov, A.K. Geim, S.V. Morozov, D. Jiang, M.I. Katsnelson, I.V. Grigorieva, S.V. Dubonos, A.A. Firsov. *Nature* **438**, 197 (2005).
- [3] А.Е. Галашев, О.Р. Рахманова. *УФН* **184**, 1045 (2014).
- [4] К.А. Крылова, Л.Р. Сафина, Р.Т. Мурзаев, С.А. Щербинин, Ю.А. Баимова, Р.Р. Мулоков. *ФТТ* **65**, 1579 (2023).
- [5] К.Г. Михеев, Р.Г. Зонов, Н.В. Чучкалов, Г.М. Михеев. *ФТТ* **66**, 280 (2024).
- [6] С.Ю. Давыдов. *ФТТ* **66**, 306 (2024).
- [7] С.Ю. Давыдов, А.А. Лебедев. *ФТТ* **65**, 2048 (2023).
- [8] К.Г. Михеев, А.В. Сюгаев, Р.Г. Зонов, Д.Л. Булатов, Г.М. Михеев. *ФТТ* **65**, 353 (2023).
- [9] X. Liu, M.C. Hersam. *Sci. Adv.* **5** (2019). <https://doi.org/10.1126/sciadv.aax6444>
- [10] A.I. Kochaev, K.P. Katin, M.M. Maslov, R.M. Meftakhutdinov. *J. Phys. Chem. Lett.* **11**, 5668 (2020).
- [11] A.I. Kochaev, M.M. Maslov, K.P. Katin, V. Efimov, I. Efimova. *Mater. Today Nano.* **20**, 100247 (2022).
- [12] Л.А. Чернозатонский, П.Б. Сорокин, А.Г. Квашнин, Д.Г. Квашнин. *Письма в ЖЭТФ* **90**, 144 (2009).
- [13] P.V. Bakharev, M. Huang, M. Saxena, S.W. Lee, S.H. Joo, S.O. Park, J. Dong, D.C. Camacho-Mojica, S. Jin, Y. Kwon, M. Biswal, F. Ding, S.K. Kwak, Z. Lee, R.S. Ruoff. *Nature Nanotechnol.* **15**, 59 (2019).
- [14] L.A. Chernozatonskii, K.P. Katin, V.A. Demin, M.M. Maslov. *Appl. Surf. Sci.* **537**, 148011 (2021).
- [15] T. Ohta, A. Bostwick, T. Seyller, K. Horn, E. Rotenberg. *Science* **313**, 951 (2006).
- [16] Y. Zhang, T. Tang, C. Girit. *Nature* **459**, 820 (2009).
- [17] G. Fiori, G. Iannaccone. *IEEE Electron Device Lett.* **30**, 261 (2009).
- [18] M.-C. Chen, C.-L. Hsu, T.-J. Hsueh. *IEEE Electron Device Lett.* **35**, 590 (2014).
- [19] Y. Tang, Z. Liu, Z. Shen. *Sens. Actuators B* **238**, 182 (2017).
- [20] С.Ю. Давыдов. *ФТТ* **66**, 2050 (2022).
- [21] В.А. Демин, Д.Г. Квашнин, П. Ванчо, Г. Марк, Л.А. Чернозатонский. *Письма в ЖЭТФ* **112**, 328 (2020).
- [22] А.И. Подливаев. *Письма в ЖЭТФ* **117**, 456 (2023).
- [23] M.M. Maslov, A.I. Podlivaev, K.P. Katin. *Mol. Simulation* **42**, 305 (2016).
- [24] А.И. Подливаев, К.С. Гришаков, К.П. Катин, М.М. Маслов. *Письма в ЖЭТФ* **113**, 182 (2021).
- [25] K.P. Katin, K.S. Grishakov, A.I. Podlivaev, M.M. Maslov. *J. Chem. Theory Comput.* **16**, 2065 (2020).
- [26] K.P. Katin, M.M. Maslov. *J. Phys. Chem. Solids* **108**, 82 (2017).
- [27] Л.А. Опенов, А.И. Подливаев. *Письма в ЖЭТФ* **109**, 746 (2019).
- [28] А.И. Подливаев, К.С. Гришаков, К.П. Катин, М.М. Маслов. *Письма в ЖЭТФ* **113**, 182(2021).
- [29] А.И. Подливаев, К.С. Гришаков, К.П. Катин, М.М. Маслов. *Письма в ЖЭТФ* **114**, 172 (2021).
- [30] А.И. Подливаев. *Письма в ЖЭТФ* **115**, 384 (2022).
- [31] K.P. Katin, M.M. Maslov. *Mol. Simulation* **44**, 703 (2018).
- [32] Л.А. Опенов, А.И. Подливаев. *ФТТ* **57**, 1450 (2015).
- [33] А.И. Подливаев, Л.А. Опенов. *ФТТ* **61**, 604 (2019).
- [34] А.И. Подливаев. *Письма в ЖЭТФ* **111**, 728 (2020).

- [35] E.M. Pearson, T. Halicioglu, W.A. Tiller. *Phys. Rev. A* **32**, 3030 (1985).
- [36] K.P. Katin, A.I. Podlivaev, A.I. Kochaev, P.A. Kulyamin, Y. Baueudinov, A.A. Grekova, I.V. Bereznitskiy, Mikhail M. Maslov. *Flat Chem.*, **44**, 100622 (2024).
<https://doi.org/10.1016/j.flatc.2024>.
- [37] G.V. Vineyard. *J. Phys. Chem. Solids*. **3**, 121 (1957).
- [38] A.A. El-Barbary. *Appl. Surf. Sci.* **426**, 238 (2017).
- [39] S.B. Isbill, A.E. Shields, D.J. Mattei-Lopez, R.J. Kapsimalis, J.L. Niedziela. *Comput. Mater. Sci.* **195**, 110477 (2021).
- [40] C.P. Ewels, R.H. Telling, A.A. El-Barbary, M.I. Heggie and P.R. Briddon. *Phys. Rev. Lett.* **91**, 025505 (2003).

Редактор Ю.Э. Кутаев