

16,18

Динамика распада водородных кластеров на поверхности графена и стоун-уэльсовского графена

© А.И. Подливаев^{1,2}¹ Национальный исследовательский ядерный университет „МИФИ“, Москва, Россия² Научно-исследовательский институт проблем развития научно-образовательного потенциала молодежи, Москва, Россия

E-mail: AIPodlivayev@mephi.ru

Поступила в Редакцию 27 августа 2020 г.

В окончательной редакции 27 августа 2020 г.

Принята к публикации 30 августа 2020 г.

Методом молекулярной динамики изучается термическая устойчивость водородных кластеров, расположенных на поверхности графена и стоун-уэльсовского графена — недавно открытого аллотропа графена. Исследованы пяти, шести и семиатомные водородные кольца, а также компактные скопления из шестнадцати атомов водорода, адсорбированных на данных углеродных структурах. Определены каналы распада водородных кластеров и температурные зависимости времени их жизни. Найдены значения энергий активации и частотных факторов в законе Аррениуса.

Ключевые слова: углерод, графен, водород, устойчивость, молекулярная динамика.

DOI: 10.21883/FTT.2020.12.50223.177

1. Введение

Создание методом дефолиации монослоя графита-графена [1] с аномально высокой проводимостью [2] и прочностью [3] стимулировало поиск его аллотропов, а также детальное изучение свойств этого материала. Допированием квазидвумерных углеродных структур атомами иных элементов были синтезированы графан [4], графин [5], графдин [6], диаман на подложке SiC (0001) [7] и фторированный алмаз (F-диаман) на подложке CuNi (111) [8]. В рамках различных теоретических моделей было предсказано множество двумерных углеродных структур (смотри, например, работы [9–16]).

Только за последние два года синтезировано квазидвумерное вещество — композит полианилина и оксида графена [17] и были предсказаны ψ -графен [18], PBCF-графен [19], M-графен [20], азуграфен (azugraphene [21]) и стоун-уэльсовский графен [22].

Интерес к стоун-уэльсовскому графену в настоящей работе обусловлен тем, что это вещество обладает термодинамической устойчивостью, превышающей устойчивость всех известных ранее аллотропов, уступая в этой характеристике только исходному графену, и его энергия выше энергии графена на величину 0.149 eV/atom. Ближайший к нему по энергии связи азуграфен [21] энергетически менее выгоден на величину 16 meV/atom. Стоун-уэльсовский графен может быть представлен как графен с периодически расположенными в нем дефектами Стоуна–Уэльса (Stone–Wales, SW [23]). Элементарная ячейка данного аллотропа может быть получена из соответствующей ячейки графена путем трансформации Стоуна–Уэльса при по-

вороте одной связи на угол 90° . Авторами работы [22] новый материал был назван SW-графеном. Элементарная ячейка SW-графена и соответствующая ячейка графена, состоящие из 16 атомов углерода, представлены на рис. 1, *b* и 1, *a*, соответственно.

Насыщение водородом углеродных структур существенно изменяет их механические и электронные характеристики. Полное двустороннее гидрирование графена и SW-графена, обладающих высокой проводимостью, превращает их в диэлектрический графан [4] и SW-графан [24]. По данным работ [25] и [26], ширина запрещенной зоны в графане $E_g = 5.4$ и 5.34 eV соответственно. При полном и частичном гидрировании ψ -графена [27] образуются устойчивые диэлектрические структуры с шириной запрещенной зоны, сопоставимой с шириной запрещенной зоны графана. В SW-графане и графане величины E_g практически совпадают [24]. Термическая устойчивость границы раздела

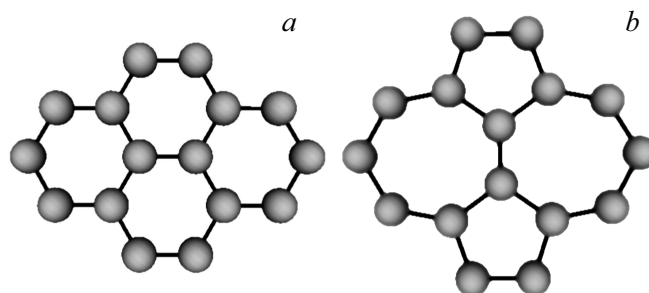


Рис. 1. Элементарные ячейки C_{16} графена (*a*) и SW-графена (*b*). Жирной чертой отмечена C–C-связь, поворот которой на 90° приводит к образованию дефекта Стоуна–Уэльса.

графен-графан [28] делает возможным формирование устойчивых диэлектрических областей на поверхности графена, что может найти применение, например, при создании резонансно-туннельных структур в элементах современной электроники [29]. В работе [28] показано, что диффундирующий по поверхности графена атом водорода притягивается к массиву гидрированного графена, и это обеспечивает термическую устойчивость макроскопической области гидрированного графена.

Термическая устойчивость малых гидрированных областей на поверхностях графена и SW-графена была исследована в работе [30]. Основными объектами исследования в этой работе были шестиатомное гидрированное кольцо на поверхности графена, а также пяти, шести и семиатомные кольца на поверхности SW-графена. Было показано, что эти водородные кластеры термически устойчивы при температурах близких к комнатной. Термическая устойчивость в работе [30] была исследована методом статического моделирования, при котором из физических соображений выбирается наиболее вероятный путь распада, и определяется потенциальный барьер, отделяющий исходную структуру от продуктов распада. Достоинством такого подхода является высокая точность определения энергии активации выбранного канала распада, а основным недостатком — необходимость перебора множества каналов для определения пути распада с минимальной энергией активации. Альтернативным методом статического моделирования является метод молекулярной динамики (ММД), позволяющий исследовать эволюцию нагретой до определенной температуры атомной системы в режиме реального времени вплоть до распада этой системы. Такой подход позволяет определить, во-первых, температурную зависимость времени жизни системы, а также энергию активации распада, и, во-вторых, наиболее вероятные каналы термического распада.

Основной целью представленной работы является определение методом молекулярной динамики термической устойчивости водородных колец и более крупных водородных кластеров на поверхности графена и SW-графена.

2. Методы расчета

Для моделирования графена и SW-графена использованы сверхъячейки C_{144} , состоящие из 9 примитивных ячеек аналогичные тем, которые были исследованы в работе [30]. Соответствующие элементарные ячейки C_{16} представлены на рис. 1, *a* и *b*, а сверхъячейки C_{144} — на рис. 2. Граничные условия были периодическими в двух планарных направлениях (x, y) и свободными в поперечном направлении z . Периоды сверхъячеек определялись из условия минимума потенциальной энергии при релаксации по координатам всех атомов.

Динамическое моделирование цепочек проводилось в рамках микроканонического ансамбля [31], в котором

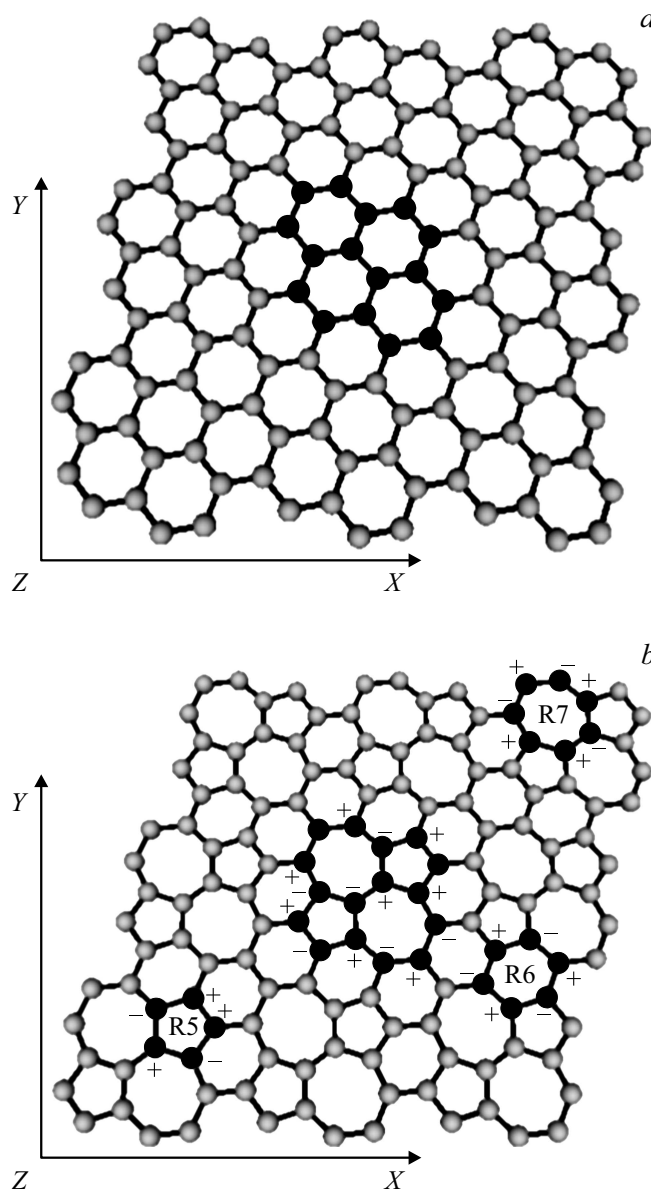


Рис. 2. Расчетные сверхъячейки C_{144} графена (*a*) и SW-графена (*b*) с отмеченными на них областями гидрирования. Черным цветом отмечены атомы углеродного остова, образующие ковалентную связь с атомами водорода.

сумма потенциальной и кинетической энергии сохраняется при движении атомов. В качестве исходной выбиралась равновесная атомная конфигурация (см. рис. 2, *a* и *b*). Начальные скорости атомов подчинялись распределению Максвелла с различными температурами. Роль температуры в микроканоническом ансамбле играет так называемая микроканоническая температура T_m , определяемая по формуле [32,33] $\langle E_{kin} \rangle = k_B T_m (3n - 3) / 2$, где $\langle E_{kin} \rangle$ — усредненная по времени кинетическая энергия системы, n — число атомов в ней, k_B — постоянная Больцмана, $(3n - 3)$ — число кинетических степеней свободы планарной системы с периодическими граничными условиями. Предполагается, что значение полного импульса

системы равно нулю. Этот подход известен как „теория ограниченного теплового резервуара“ (finite heat bath theory) [34,35]. В рамках этой теории среднее время жизни — изолированной системы определяется следующим приближенным аналогом формулы Аррениуса [34,35]:

$$\tau^{-1}(T_m) \approx A \exp(-E_g/(k_B T^*)), \quad (1)$$

где A — частотный фактор, E_a — энергия активации, $T^* = T_m - E_a/2C$, $C = (3n-3)k_B$ — микроканоническая теплоемкость.

Межатомные взаимодействия описывались в рамках неортогональной модели сильной связи [36], менее точной, чем методы *ab-initio*, но превосходящей их по скорости счета. При этом данная модель демонстрирует хорошее согласование с методиками, основанными на теории функционала плотности, для систем, содержащих атомы углерода в состояниях с различными типами гибридизации [37]. Кроме того, она успешно применялась для исследования термической устойчивости кластеров C_{20} , графеновых и других углеродных систем (см. работы [38–43] и ссылки в них). Программная реализация на языке FORTRAN межатомного потенциала [36] опубликована в работе [44]. В этой программе представлен инструментарий, необходимый для атомистических расчетов — определение межатомных сил, поиск стационарных точек (локальных минимумов и седловых точек) на поверхности потенциальной энергии в пространстве обобщенных координат атомов, определение электронного и фононного спектра изучаемого кластера, и различные модификации ММД.

Для найденных межатомных сил уравнения движения Ньютона решались численно методом скоростей Верле (аналог метода Штёрмера второго порядка точности) с шагом по времени 0.3 fs.

Была исследована временная эволюция следующих углеводородных систем: первая структура на основе графена описывается химической формулой $C_{144}H_6$. и представлена на рис. 2, *a* атомами черного цвета. В данной структуре 6 атомов водорода ковалентно связаны с шестиатомным кольцом sp^3 -гибридизованных атомов углерода. При этом, атомы водорода, связанные с соседними атомами углеродного кольца расположены по разные стороны графеновой основы. Структура с таким расположением шести атомов водорода термодинамически наиболее устойчива (обладает минимальной потенциальной энергией).

Вторая структура с химической формулой $C_{144}H_{16}$. на основе графена также представлена на центральной части рис. 2, *a* атомами черного цвета. Плотное скопление атомов водорода и связанных с ними sp^3 -гибридизованных атомов углерода является, фактически, островком графана [4] на графеновой плоскости. Характер двустороннего расположения (чередования) атомов водорода на графеновой основе аналогичен предыдущей структуре.

Третья, четвертая, пятая и шестая структуры с химическими формулами $C_{144}H_5$, $C_{144}H_6$, $C_{144}H_7$ и $C_{144}H_{16}$

соответственно, формируются на основе SW-графена. Третья, четвертая и пятая структуры представляют собой гидрированные пяти, шести и семиатомные кольца на поверхности SW-графена. Схематические изображения этих колец на рис. 2, *b* отмечены символами R5, R6 и R7. Шестая структура с химической формулой $C_{144}H_{16}$ на основе SW-графена представлена на центральной части рис. 2, *b* атомами черного цвета. Плотное скопление атомов водорода и связанных с ними sp^3 -гибридизованных атомов углерода является островком SW-графана [24] на плоскости SW-графена. Знаками „+“ („–“) на рис. 2, *b* отмечены атомы углеродной основы, образующие ковалентную связь с атомами водорода, которые расположены над (под) SW-графеновой „плоскостью“.

Временная эволюция перечисленных структур была исследована при температурах $T_m = 2000, 2500, 3000, 3500$ и 4000 К. Расчет движения каждой атомной структуры при фиксированной температуре проводился для четырех различных вариантов начальных распределений скоростей и смещений атомов вплоть до термического распада. Изучаемая углеводородная система считалась распавшейся, когда один из атомов водорода в процессе эволюции удалялся на расстояние более 5 \AA от атома углеродной основы, с которым он исходно образовывал ковалентную связь.

3. Результаты и их обсуждение

3.1. Каналы распада графеновых систем $C_{144}H_6$ и $C_{144}H_{16}$

При распаде углеводородных систем $C_{144}H_6$ и $C_{144}H_{16}$ на основе графена было обнаружено три канала термического распада этих систем — поверхностная диффузия атомов водорода без отрыва их от графеновой основы, десорбция атомарного водорода и десорбция молекулярного водорода. В некоторых случаях наблюдался распад сразу по нескольким каналам (например, поверхностная диффузия и десорбция атомарного водорода). Термического распада углеродной основы не наблюдалось. Количество распадов систем $C_{144}H_6$ и $C_{144}H_{16}$ по различным каналам и при различных температурах представлено в табл. 1.

Из данных табл. 1 следует, что преобладающим каналом распада конфигурации с шестиатомным кольцом является поверхностная диффузия (12 распадов при всех температурах). Вероятность десорбции атомарного водорода несколько ниже (8 распадов), что соответствует результатам работы [30]. Для системы $C_{144}H_{16}$ вероятности распадов по каналам поверхностной диффузии и десорбции атомарного водорода практически равны (7 и 6 распадов соответственно), при этом существенно, более чем в три раза, возрастает вероятность десорбции молекулярного водорода. Тенденцию к десорбции молекул H_2 можно объяснить тем, что в системе $C_{144}H_{16}$ поверхностная диффузия затруднена, поскольку некоторые

Таблица 1. Количество распадов водородных кластеров на поверхности графена по различным каналам

Кластер	Канал	T (K)				
		2000	2500	3000	3500	4000
C ₁₄₄ H ₆	Поверхностная диффузия	3	3	1	3	2
	Десорбция атома H	1	1	2	2	2
	Десорбция молекулы H ₂	0	0	2	0	0
C ₁₄₄ H ₁₆	Поверхностная диффузия	3	2	1	1	0
	Десорбция атома H	0	2	1	2	1
	Десорбция молекулы H ₂	1	0	2	1	3

атомы водорода окружены соседними атомами водорода, что препятствует перескоку их на соседний узел. Это же обстоятельство способствует увеличению вероятности образования водородных пар.

3.2. Каналы распада систем на основе SW-графена

При распаде углеводородных систем C₁₄₄H₅, C₁₄₄H₆, C₁₄₄H₇ и C₁₄₄H₁₆ на основе SW-графена было обнаружено четыре канала термического распада. Три из них совпадают с каналами распада графеновых систем — это поверхностная диффузия атомов водорода без отрыва их от графеновой основы, десорбция атомарного водорода, десорбция молекулярного водорода. Четвертым каналом (отсутствующим в структурах на основе графена) является распад углеродного каркаса SW-графена.

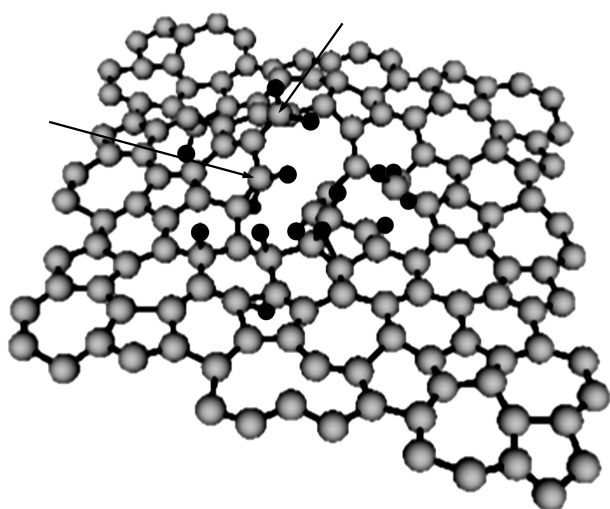


Рис. 3. Структура C₁₄₄H₁₆ на основе SW-графена после распада углеродного каркаса при температуре 3500 К. Маленькими черными шариками обозначены атомы водорода. Стрелками отмечены атомы углерода, которые образуют ковалентную связь с двумя атомами водорода.

Распад углеродного каркаса SW-графена и отсутствие такого распада в графеновых структурах объясняется различием в температурной устойчивости графена и SW-графена. Температура плавления SW-графена равна 3500 К [41], а температура плавления графена, определенная в рамках различных подходов лежит в интервале 4500–5100 К [45–47].

Формы распадов каркаса в структурах C₁₄₄H₅, C₁₄₄H₆, C₁₄₄H₇ и C₁₄₄H₁₆ не существенно различаются между собой и заключаются в разрыве одной или нескольких близких C–C связей. Характерный пример такого повреждения представлен на рис. 3. На этом рисунке виден разрыв в виде многоатомного кольца. Края разрыва расходятся в различные стороны от исходной SW-графеновой плоскости. Принципиальной особенностью всех наблюдаемых разрывов является их локализация в области исходного гидрирования структуры. Атомы водорода ослабляют ближайшие к ним C–C связи. Этот результат коррелирует с выводами работ [48,49] о снижении прочности C–C связи адсорбированным водородом. Расчеты, проведенные в работе [48] были выполнены с использованием теории функционала плотности (DFT), а работе [49] — в рамках неортогональной модели сильной связи [36].

Еще одной особенностью, часто встречающейся в разрывах, является перераспределение атомов водорода при котором к атому углеродной основы, находящемуся

Таблица 2. Количество распадов водородных кластеров на поверхности SW-графена по различным каналам

Кластер	Канал	T (K)				
		2000	2500	3000	3500	4000
C ₁₄₄ H ₅	Поверхностная диффузия	4	1	2	1	1
	Десорбция атома H	0	1	0	1	1
	Десорбция молекулы H ₂	0	1	0	1	0
	Распад каркаса C ₁₄₄	0	1	2	2	2
C ₁₄₄ H ₆	Поверхностная диффузия	1	3	1	0	2
	Десорбция атома H	1	0	1	3	2
	Десорбция молекулы H ₂	0	0	1	1	0
	Распад каркаса C ₁₄₄	2	1	1	0	0
C ₁₄₄ H ₇	Поверхностная диффузия	2	1	2	0	0
	Десорбция атома H	1	1	2	3	2
	Десорбция молекулы H ₂	1	2	0	0	1
	Распад каркаса C ₁₄₄	0	0	0	1	1
C ₁₄₄ H ₁₆	Поверхностная диффузия	2	1	1	1	0
	Десорбция атома H	1	2	1	0	0
	Десорбция молекулы H ₂	1	0	2	1	3
	Распад каркаса C ₁₄₄	0	1	0	2	3

Таблица 3. Характеристики термического распада углеводородных систем $C_{144}H_N$ ($N = 5, 6, 7, 16$) на основе графена и SW-графен

	№	E_a , eV	$A \cdot 10^{-13}$, s^{-1}	$\tau(T = 77 \text{ K})$, s	$\tau(T = 273 \text{ K})$, s
Графен	6	0.89 ± 0.14 $1.61^* [30]$	3.6 ± 0.5	$5 \cdot 10^{44}$	$0.7 \cdot 10^3$
	16	0.82 ± 0.15	3.2 ± 0.5	$1.4 \cdot 10^{40}$	43
SW-графен	5	1.00 ± 0.11 $1.25^* [30]$	3.8 ± 0.4	$7 \cdot 10^{51}$	$8 \cdot 10^4$
	6	1.35 ± 0.19 $1.36^* [30]$	27 ± 5	$8 \cdot 10^{73}$	$3 \cdot 10^{10}$
	7	0.99 ± 0.23 $1.27^* [30]$	9.5 ± 2.3	$6 \cdot 10^{50}$	$2 \cdot 10^4$
	16	1.04 ± 0.14	7.2 ± 1.0	$2 \cdot 10^{54}$	$2 \cdot 10^5$

Примечание. Символом „*“ отмечены значения энергий активации, полученные в работе [30] методом статического моделирования.

на границе разрыва, присоединяются два атома водорода (происходит спонтанная пассивация границы разрыва). Два атома углерода с такой пассивацией отмечены стрелками на рис. 3.

Количество распадов данных систем по различным каналам при различных температурах представлено в табл. 2. Из данных таблицы видно, что вероятности распадов по различным каналам различаются не очень сильно. Это позволяет проводить качественную оценку температурной зависимости времени жизни данных структур безотносительно к отдельным каналам термического распада.

3.3. Температурная зависимость времени жизни структур

На рис. 4–6 представлена зависимость логарифма времени жизни изучаемых структур от обратной температуры. Приближение методом наименьших квадратов температурной зависимости времени жизни аррениусовской экспонентой (1) позволяет определить энергии активации и частотные факторы термического распада. Соответствующие аррениусовские зависимости представлены на рис. 4–6 сплошными и пунктирными линиями. В табл. 3 представлены энергии активации и частотные факторы, полученные по данным рис. 4–6, а также энергии активации, полученных в работе [30] методом статического моделирования. Потенциал межатомного взаимодействия, граничные условия исходных структур в данной работе и в работе [30] идентичны. Однако, метод статического моделирования, применяемый в работе [30] позволил изучить только каналы распада, связанные с перемещением одного атома водорода в то время как ММД позволяет определить любой возможный канал. Сопоставление энергий активации, полученных в данной работе и в работе [30], а также данные табл. 1 и 2 показывает, что удаление одиночного

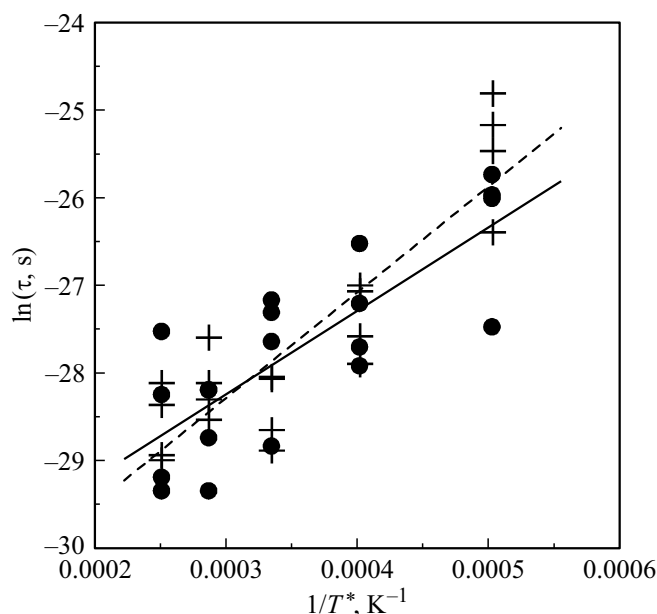


Рис. 4. Зависимость времени жизни τ -структур $C_{144}H_{16}$ на основе графена и SW-графена от обратной температуры T^* (см. текст). Кружки и крестики — результаты численного счета для структур $C_{144}H_{16}$ на основе графена и SW-графена соответственно. Сплошная и пунктирная линии — линейная аппроксимация методом наименьших квадратов для графена и SW-графена соответственно.

атома водорода не является преобладающим каналом распада.

Аррениусовская экстраполяция позволяет качественно оценить времена жизни данных структур при низких температурах, недоступных для прямого моделирования. В табл. 3 представлены соответствующие времена жизни при температурах жидкого азота и заморозки воды. Из данных этой таблицы видно, что при температуре жидкого азота времена жизни всех структур являются

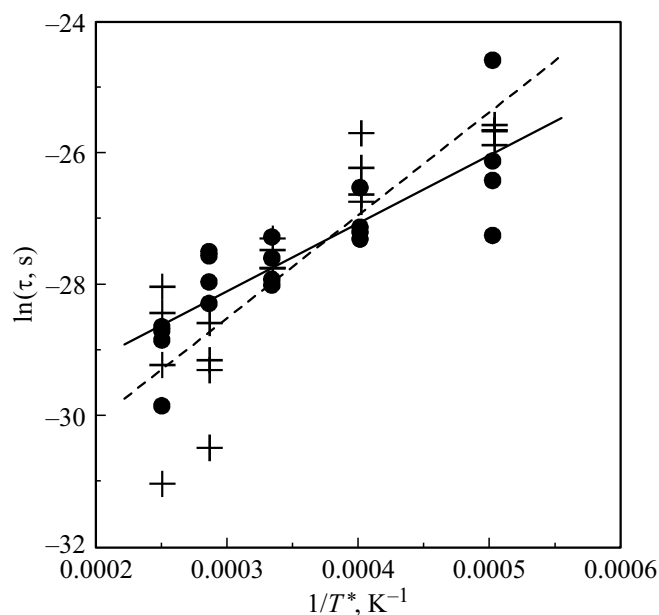


Рис. 5. То же, что на рис. 4, для структур $C_{144}H_6$ на основе графена и SW-графена.

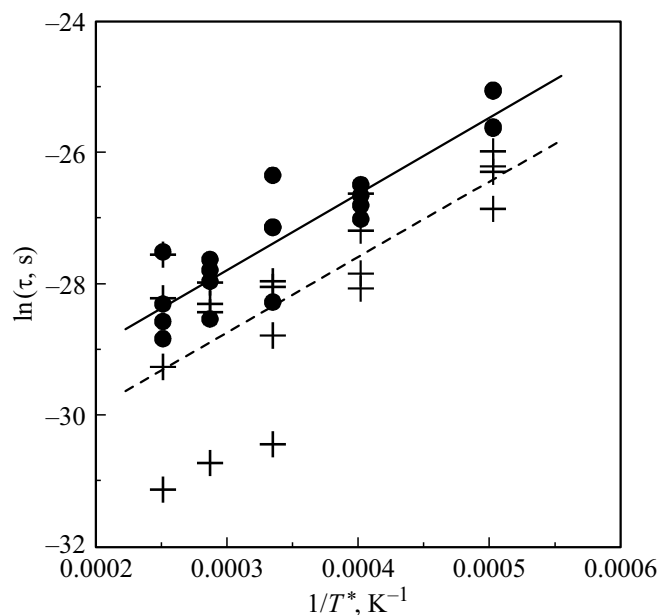


Рис. 6. То же, что на рис. 4, для структур $C_{144}H_5$ и $C_{144}H_7$ на основе SW-графена. Кружки и сплошная линия соответствуют структуре $C_{144}H_5$, а крестики и пунктирная линия — структуре $C_{144}H_7$.

макроскопическими. Однако, только структура $C_{144}H_6$ SW-графена обладает достаточной устойчивостью для приложений в графеновой электронике при температуре близкой к комнатной.

4. Заключение

В настоящей работе термическая устойчивость углеводородных структур $C_{144}H_n$ ($n = 5, 6, 7, 16$) на основе

графена и изучена путем динамического компьютерного моделирования в широком диапазоне температур. Определены температурные зависимости времен жизни τ этих кластеров до момента их распада и типы каналов распада. Установлено, что температурная устойчивость данных структур, полученная при моделировании в реальном времени, ниже, чем устойчивость, предсказанная ранее в рамках упрощенной модели статического моделирования. При температуре жидкого азота эти структуры достаточно устойчивы для применения их в качестве элементов графеновой электроники. Однако при температурах близких к комнатной, достаточной устойчивостью обладает только шестиатомное водородное кольцо на поверхности SW-графена. При этом полученные результаты свидетельствуют о том, что для целей аккумуляции водорода в водородной энергетике, где необходимо обратимое накопление/выделение водорода структуры на основе графена и SW-графена вполне пригодны. Более перспективным для этого применения представляется графен, поскольку в отличие от SW-графена в нем при высоких температурах наблюдается только десорбция водорода без плавления углеродной основы.

Финансирование работы

Работа поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (грант № 18-02-00278-а) и выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках Программы повышения конкурентоспособности Национального исследовательского ядерного университета „МИФИ“.

Конфликт интересов

Автор заявляет, что у него нет конфликта интересов.

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] J.O. Sofo, A.S. Chaudhari, G.D. Barber. *Phys. Rev. B* **75**, 153401 (2007).
- [5] 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, K.S. Novoselov. *Science* **323**, 610 (2009).
- [6] Y. Li, L. Xu, H. Liu, Y. Li. *Chem. Soc. Rev.* **43**, 2572 (2014).
- [7] Y. Gao, T. Cao, F. Cellini, C. Berger, W.A. de Heer, E. Tosatti, E. Riedo, A. Bongiorno. *Nature Nanotechnology* **13**, 133 (2018).

- [8] P.V. Bakharev, M. Huang, M. Saxena, S.W. Lee, S.H. Joo, S.O. Park, J. Dong, D. Camacho-Mojica, S. Ji, Y. Kwon, M. Biswal, F. Ding, S.K. Kwak, Z. Lee, R.S. Ruoff. 2019 — [arxiv.org](https://arxiv.org/ftp/arxiv/papers/1901/1901.02131.pdf)
<https://arxiv.org/ftp/arxiv/papers/1901/1901.02131.pdf>
- [9] Л.А. Чернозатонский, П.Б. Сорокин, А.Г. Квашнин, Д.Г. Квашнин. Письма в ЖЭТФ **90**, 144 (2009).
- [10] J. Zhou, Q. Wang, Q. Sun, X.C. Chen, Y. Kawazoe, P. Jena. Nano Lett. **9**, 3867 (2009).
- [11] X.-L. Sheng, H.-J. Cui, F. Ye, Q.-B. Yan, Q.-R. Zheng, G. Su. J. Appl. Phys. **112**, 074315 (2012).
- [12] Y. Liu, G. Wang, Q. Huang, L. Guo, X. Chen. Phys. Rev. Lett. **108**, 225505 (2012).
- [13] Z. Wang, X.-F. Zhou, X. Zhang, Q. Zhu, H. Dong, M. Zhao, A.R. Oganov. Nano Lett. **15**, 6182 (2015).
- [14] S. Zhang, J. Zhou, Q. Wang, X. Chen, Y. Kawazoe, P. Jena. Proc. Nature Acad. Sci. **112**, 2372 (2015).
- [15] Е.А. Беленков, В.В. Мавринский, Т.Е. Беленкова, В.М. Чернов. ЖЭТФ **147**, 949 (2015).
- [16] H. Einollahzadeh, S.M. Fazeli, R.S. Dariani. Sci. Technol. Adv. Mater **17**, 610 (2017).
- [17] G.M. de Araújo, L. Codognoto, F.R. Simões. J. Solids State Electrochem. (2020).
<https://doi.org/10.1007/s10008-020-04517-1>
- [18] X. Li, Q. Wang, P. Jena. J. Phys. Chem. Lett. **8**, 3234 (2017).
- [19] W. Zhang, C. Chai, Q. Fan, Y. Song, Y. Yang. Chem. NanoMater **6**, 139 (2020).
- [20] C. Kou, Y. Tian, M. Zhang, E. Zurek, X. Qu, X. Wang, K. Yin, Y. Yan, L. Gao, M. Lu, W. Yang. 2D-Mater. **7**, 025047 (2020).
- [21] J. Liu, H. Lu. RSC Adv. **9**, 34481 (2019).
- [22] H. Yin, X. Shi, C. He, M. Martinez-Canales, J. Li, C.J. Pickard, C. Tang, T. Ouyang, C. Zhang, J. Zhong. Phys. Rev. B **99**, 041405 (2019).
- [23] A.J. Stone, D.J. Wales. Chem. Phys. Lett. **128**, 501 (1986).
- [24] А.И. Подливаев. Письма в ЖЭТФ **110**, 692 (2019).
- [25] S. Lebegue, M. Klintonberg, O. Eriksson, M.I. Katsnelson. Phys. Rev. B **79**, 245117 (2009).
- [26] А.И. Подливаев, Л.А. Опенов. Письма в ЖЭТФ **106**, 98 (2017).
- [27] X. Huang, M. Ma, L. Cheng, L. Liu. Physica E **115**, 113701 (2020).
- [28] Л.А. Опенов, А.И. Подливаев. Письма в ЖЭТФ **90**, 505 (2009).
- [29] Л.А. Чернозатонский, П.Б. Сорокин, Е.Э. Белова, Й. Брюнинг, А.С. Федоров. Письма в ЖЭТФ **85**, 84 (2007).
- [30] А.И. Подливаев. Письма в ЖЭТФ, **111**, 728 (2020).
- [31] E.M. Pearson, T. Halicioglu, W.A. Tiller. Phys. Rev. A **32**, 3030 (1985).
- [32] C. Xu, G.E. Scuseria. Phys. Rev. Lett. **72**, 669 (1994).
- [33] J. Jellinek, A. Goldberg. J. Chem. Phys. **113**, 2570 (2000).
- [34] С.Е. Клотс. Z. Phys. D **20**, 105 (1991).
- [35] J.V. Andersen, E. Bonderup, K. Hansen. J. Chem. Phys. **114**, 6518 (2001).
- [36] M.M. Maslov, A.I. Podlivaev, K.P. Katin. Mol. Simulation **42**, 305 (2016).
- [37] K.P. Katin, M.M. Maslov. J. Phys. Chem. Solids **108**, 82 (2017).
- [38] K.P. Katin, S.A. Shostachenko, A.I. Avhadieva, M.M. Maslov, Adv. Phys. Chem. **2015**, 506894 (2015).
- [39] А.И. Подливаев, Л.А. Опенов. ФТТ **60**, 160 (2018).
- [40] Л.А. Опенов, А.И. Подливаев. ФТТ **60**, 795 (2018).
- [41] Л.А. Опенов, А.И. Подливаев. Письма в ЖЭТФ **109**, 746 (2019).
- [42] Л.А. Опенов, А.И. Подливаев. ФТП **53**, 724 (2019).
- [43] И.Ю. Долинский, К.П. Катин, К.С. Гришаков, В.С. Прудковский, Н.И. Каргин, М.М. Маслов. ФТТ **60**, 816 (2018).
- [44] K.P. Katin, K.S. Grishakov, A.I. Podlivaev, M.M. Maslov. J. Chem. Theory Comp. **16**, 2065 (2020).
- [45] V.M. Bedanov, G.V. Gadiyak, Yu.E. Lozovik. Phys. Lett. A **109**, 289 (1985).
- [46] J.H. Los, K.V. Zakharchenko, M.I. Katsnelson, A. Fasolino. Phys. Rev. B **91**, 045415 (2015).
- [47] Л.А. Опенов, А.И. Подливаев. ФТТ **58**, 821 (2016).
- [48] A.J.M. Nascimento, R.W. Nunes. Nanotechnology **24**, 435707 (2013).
- [49] А.И. Подливаев, Л.А. Опенов. ФТТ **57**, 2485 (2015).

Редактор К.В. Емцев