

МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ДВУМЕРНЫХ sp^2 -УГЛЕРОДНЫХ НАНОМАТЕРИАЛОВ

Р. И. Бабичева^{a*}, С. В. Дмитриев^{b,c}, Е. А. Корзникова^{b,d}, К. Жоу^{a,e**}

^a *Environmental Process Modelling Centre, Nanyang Environment & Water Research Institute, Nanyang Technological University, 1 Cleantech Loop, CleanTech One Singapore 637141, Singapore*

^b *Институт проблем сверхпластичности металлов Российской академии наук 450001, Уфа, Россия*

^c *Национальный исследовательский Томский государственный университет 634050, Томск, Россия*

^d *Уфимский государственный авиационный технический университет 410008, Уфа, Россия*

^e *School of Mechanical and Aerospace Engineering, Nanyang Technological University Singapore 639798, Singapore*

Поступила в редакцию 29 января 2019 г.,
после переработки 8 февраля 2019 г.
Принята к публикации 8 февраля 2019 г.

Графен — двумерный кристалл, в котором sp^2 -гибридизированные атомы углерода соединены валентными связями с тремя соседями. Теоретически были предсказаны и другие двумерные углеродные структуры, в которых каждый атом углерода соединен валентными связями с тремя соседями. В данной работе методом молекулярной динамики анализируются механические свойства и структурные трансформации таких материалов при одноосном и двухосном растяжениях. Построены зависимости мембранных усилий от приложенной деформации, определены предельные значения мембранных усилий и деформаций. Три исследованные структуры различаются плотностью, и можно было ожидать, что прочность структур должна уменьшаться с уменьшением плотности. Однако оказалось, что такая корреляция проявляется не во всех случаях, и менее плотная структура может оказаться более прочной за счет того, что все межатомные связи в ней оказываются более равнонагруженными. Полученные результаты могут быть полезны при анализе потенциала использования sp^2 -углеродных мембран в различных технологиях.

DOI: 10.1134/S0044451019070083

1. ВВЕДЕНИЕ

Углерод, элемент четвертой группы таблицы Менделеева, способен образовывать колоссальное количество полиморфных структур, в том числе и двумерных, в которых все или часть атомов могут иметь sp^2 -гибридизацию, а остальные — sp^1 -гибридизацию [1–10]. Механические свойства таких структур активно изучаются [11–17] в связи с их применением в композиционных [18–20] и теплопроводящих [21] материалах, в технологиях опреснения

и очистки воды [22–25] и др. Известно, что упругая деформация двумерных материалов изменяет их электронные [26, 27] и оптические [28] свойства, фононный спектр [29–32], теплопроводность [33–36], упругие константы и скорости звука [37].

Чувствительность механических и физических свойств к упругой деформации материалов связана с тем, что она изменяет межатомные расстояния, уменьшая или увеличивая жесткость межатомных связей соответственно при их растяжении и сжатии, а также может менять симметрию кристаллической решетки. Управление свойствами материалов при помощи приложения упругих деформаций широко изучается, в том числе, и для графена [38]. Данный метод относительно прост в реализации, позволяя

* E-mail: ri.babicheva@gmail.com

** K. Zhou

ет непрерывно изменять различные характеристики материалов, причем если деформация определенного знака приводит к снижению желаемых свойств, то смена знака деформации непременно приведет к их повышению.

Для успешного использования упругой деформации как метода модификации свойств материалов необходимо знать пределы их упругого деформирования. Для графена данная задача решалась в ряде экспериментальных и теоретических работ [39–44]. В данной работе помимо графена рассматриваются два других двумерных sp^2 -полиморфа углерода. Рассчитываются мембранные усилия как функции одноосной или двухосной деформации растяжения и изучаются структурные трансформации, возникающие под действием деформации.

2. ОПИСАНИЕ МОДЕЛИ

В данной работе рассматривались три двумерные углеродные структуры, представленные на рис. 1, где ромбами выделены трансляционные ячейки минимальной площади. Все атомы в данных структурах соединены валентными связями с тремя соседями и находятся в состоянии sp^2 -гибридизации. В трансляционной ячейке графена (Gr0) имеются два атома, в то время как в ячейках структур Gr1 и Gr2 насчитывается соответственно шесть и двенадцать атомов. В расчетах используются ячейки, имеющие форму максимально близкую к квадрату и содержащие 512, 180 и 360 атомов соответственно в структурах Gr0, Gr1 и Gr2.

Молекулярно-динамические расчеты проводились с использованием свободно распространяемого пакета прикладных программ LAMMPS [45]. Взаимодействие между атомами описывалось потенциалом AIREBO [46], который демонстрирует достаточную точность в описании межатомных

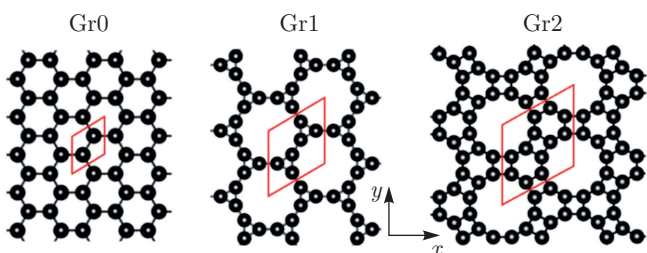


Рис. 1. Структура графена (Gr0) и двух других sp^2 -структур углерода, исследованных в данной работе. Выделены трансляционные ячейки, содержащие 2, 6, 12 атомов углерода соответственно в структурах Gr0, Gr1, Gr2

взаимодействий в углеродных аллотропах [47] и поэтому широко используется для исследования их механических свойств [47–50]. Уравнения движения атомов интегрировались по методу Верле четвертого порядка с временным шагом 0.5 фс.

Использовались периодические граничные условия и NVT-ансамбль (постоянное число частиц N , постоянный объем V и постоянная температура T). В направлении, перпендикулярном плоскости структуры, размер расчетной ячейки составлял 20 Å с целью создания слоя вакуума, предотвращающего взаимодействие структуры с ее периодическими образами.

До деформации структуры подвергались релаксации и последующей термализации, т. е. выдержке при температуре деформации в течение 100 пс при нулевых значениях мембранных усилий (в этом случае применялся NPT-ансамбль и вместо постоянства объема выдерживались нулевые мембранные усилия). В результате релаксации были установлены равновесные параметры решетки структур при нулевой температуре. Стороны равновесных ромбических трансляционных ячеек равны 2.42, 5.78 и 6.985 Å соответственно для структур Gr0, Gr1 и Gr2. Таким образом, в структурах Gr0, Gr1 и Gr2 на один атом в среднем приходится площадь соответственно 2.54, 4.82 и 3.52 Å². Наиболее плотной структурой является графен, а наименее плотной — структура Gr1.

Рассматривались три типа деформации структур: одноосное растяжение вдоль осей x ($\epsilon_{xx} > 0$, $\epsilon_{yy} = 0$) и y ($\epsilon_{xx} = 0$, $\epsilon_{yy} > 0$), а также двухосное растяжение ($\epsilon_{xx} = \epsilon_{yy} > 0$). Деформация осуществлялась пошагово, с инкрементом 0.001, с последующей выдержкой в условиях NVT-ансамбля в течение 1 пс. Деформирование происходило до деформации 0.5, таким образом, длительность расчета составляла 500 пс. Исследовано два значения температуры, 10 К и 300 К.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

На рис. 2 для всех трех исследованных структур приведены рассчитанные мембранные усилия $T_x = T_y$ как функции деформации двухосного растяжения, $\epsilon_{xx} = \epsilon_{yy}$, для температур деформирования 10 К (синие кривые) и 300 К (красные кривые). Сплошными, штриховыми и пунктирными кривыми даны результаты соответственно для Gr0, Gr1 и Gr2.

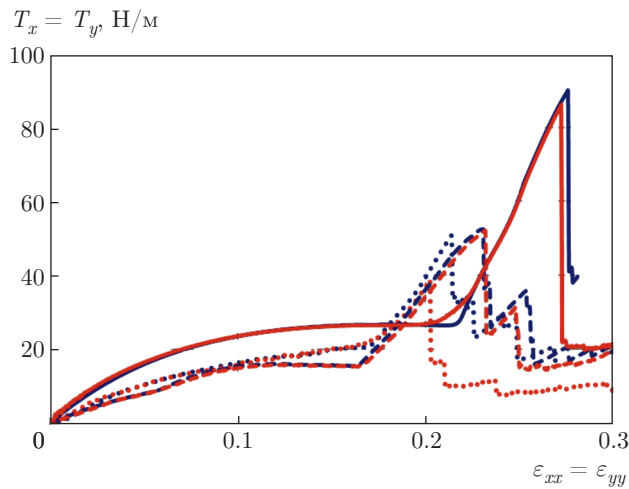


Рис. 2. (В цвете онлайн) Мембранные усилия $T_x = T_y$ как функции деформации двухосного растяжения, $\epsilon_{xx} = \epsilon_{yy}$, для структур Gr0, Gr1 и Gr2, показанные соответственно сплошными, штриховыми и пунктирными линиями. Синие (красные) кривые соответствуют деформированию при 10 К (300 К)

Все кривые имеют подобный вид и состоят из трех участков: рост мембранных усилий с постепенным насыщением сменяется вторым участком, характеризующимся быстрым ростом напряжений с последующим их резким падением, связанным с разрывом части межатомных связей. Дальнейшее растяжение на третьем участке характеризуется чередованием интервалов упрочнения со сбросами мембранных усилий. Каждому такому сбросу соответствует дополнительный разрыв межатомных связей. Максимальные значения мембранных усилий для графена составили 90 Н/м, а для структур Gr1 и Gr2 они не превышают отметки 52 Н/м. Разрыв первых связей в графене происходит при деформации 0.275, в структуре Gr1 при 0.23 и в структуре Gr2 при 0.2–0.22, в зависимости от температуры. Влияние температуры на кривые деформирования структур Gr0 и Gr1 незначительно, но оно более заметно для структуры Gr2. Как и следовало ожидать, во всех случаях повышение температуры деформирования приводит к снижению максимальных значений мембранных усилий и деформаций до разрыва первых связей.

На рис. 3 показаны кривые одноосного растяжения графена (Gr0) вдоль оси x (сплошные линии) и y (штриховые линии) при температурах 10 К (синие кривые) и 300 К (красные кривые). Для растяжения вдоль оси x (y) приведено мембранное усилие T_x (T_y).

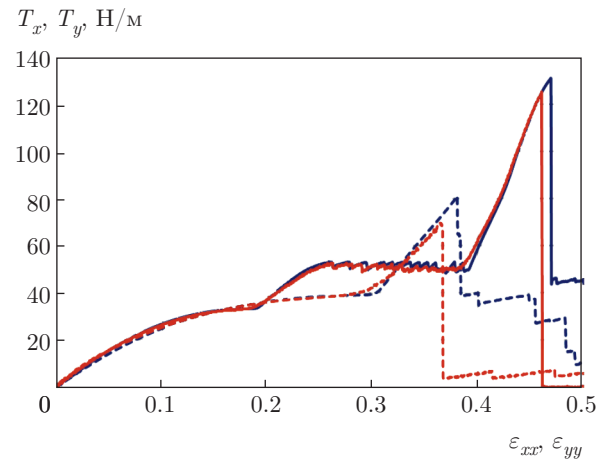


Рис. 3. Мембранные усилия T_x и T_y в графене Gr0 как функции одноосной деформации соответственно ϵ_{xx} при $\epsilon_{yy} = 0$ и ϵ_{yy} при $\epsilon_{xx} = 0$. Растяжение вдоль оси x (y) показано сплошными (штриховыми) линиями. Синие (красные) кривые соответствуют деформированию при 10 К (300 К)

Интересно развивается деформация графена при растяжении вдоль оси x (сплошные кривые на рис. 3). В этом случае на кривых деформирования, которые очень слабо зависят от температуры, можно выделить пять участков. На первом участке вплоть до $\epsilon_{xx} = 0.19$ идет рост мембранного усилия T_x с насыщением. Далее, в интервале $0.19 < \epsilon_{xx} < 0.26$ происходит более быстрый рост усилий. На третьем участке, $0.26 < \epsilon_{xx} < 0.38$, растяжение графена происходит при практически постоянном значении мембранного усилия с небольшими его осцилляциями. В пределах данного участка в расчетной ячейке образуется домен с более высокой степенью деформации вдоль оси x , который с ростом средней деформации ϵ_{xx} растет за счет уменьшения домена с меньшей степенью деформации. Такое неоднородное упругое деформирование графена при его растяжении вдоль направления «кресло» наблюдалось ранее в работах [51–55] и получило объяснение в работе [55]. Оно связано с невыпуклостью кривой деформирования элементарной трансляционной ячейки графена вдоль направления кресло [55], как это следует из работы [56]. Четвертый участок деформирования $0.38 < \epsilon_{xx} < 0.47$ характеризуется быстрым ростом мембранного усилия и начинается он в тот момент, когда домен с меньшей степенью деформации полностью исчезает. Заканчивается четвертый участок резким падением усилия в момент, когда начинают рваться межатомные связи. На пятом участке происходит разрыв оставшихся межатомных связей. Важно отметить, что вплоть до деформации

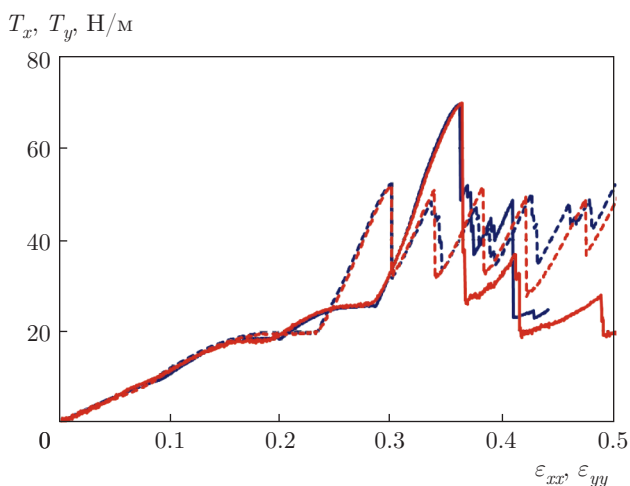


Рис. 4. Мембранные усилия T_x и T_y в структуре Gr1 как функции одноосной деформации соответственно ε_{xx} при $\varepsilon_{yy} = 0$ и ε_{yy} при $\varepsilon_{xx} = 0$. Растяжение вдоль оси x (y) показано сплошными (штриховыми) линиями. Синие (красные) кривые соответствуют деформированию при 10 К (300 К)

$\varepsilon_{xx} = 0.47$ разрыва связей не наблюдается и деформация происходит упруго. При разгрузке с любого значения деформации $\varepsilon_{xx} < 0.47$ исходная структура графена полностью восстанавливается, проходя через стадию двухфазного деформирования. Подобное двухфазное деформирование было описано ранее для некоторых интерметаллидных нановолокон и нанопленок [57–62], а также для ДНК и некоторых полимерных цепочек [56].

Что касается одноосного растяжения вдоль оси y (штриховые кривые на рис. 3), деформирование здесь происходит в три стадии подобно двухосному растяжению, описанному ранее. Влияние температуры в данном случае более заметно. Максимальные значения мембранного усилия и деформации до разрыва связей здесь ниже, чем при растяжении вдоль оси x .

Далее опишем кривые одноосного деформирования структуры Gr1, которые приведены на рис. 4. Как и на рис. 3, сплошные (штриховые) линии соответствуют растяжению вдоль оси x (y) и показывают мембранные усилия T_x (T_y). Синие (красные) кривые отвечают деформации при температуре 10 К (300 К). Влияние температуры в данном случае весьма незначительно. Кривые деформирования имеют три участка: рост напряжений с насыщением, последующий более быстрый рост и значительная осцилляция усилий после разрыва первых межатомных связей. При растяжении вдоль оси x материал демонстрирует более высокое максимальное

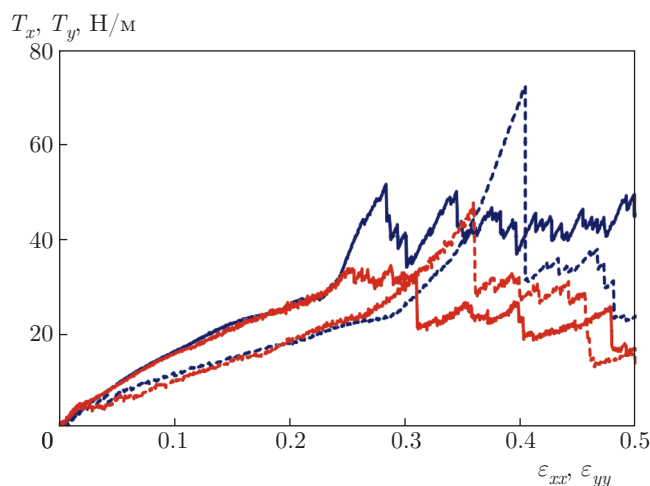


Рис. 5. Мембранные усилия T_x и T_y в структуре Gr2 как функции одноосной деформации соответственно ε_{xx} при $\varepsilon_{yy} = 0$ и ε_{yy} при $\varepsilon_{xx} = 0$. Растяжение вдоль оси x (y) показано сплошными (штриховыми) линиями. Синие (красные) кривые соответствуют деформированию при 10 К (300 К)

мембранное усилие (70 Н/м против 51 Н/м) и большую деформацию до разрыва первых связей (0.36 против 0.3), чем при растяжении вдоль оси y .

Наконец, на рис. 5 даны результаты одноосного деформирования структуры Gr2, при этом цвет и тип линий здесь выбраны так же, как и на рис. 3 и рис. 4. Для структуры Gr2 температура заметно влияет на кривые одноосной деформации, как это наблюдалось и для двухосного растяжения (см. пунктирные кривые на рис. 2). При температуре деформации 10 К на кривых деформирования, как и для структуры Gr1, можно выделить три участка: рост с насыщением, более быстрый рост и осцилляция усилий после разрыва первых межатомных связей. Для растяжения вдоль оси y при $T = 300$ К эти три участка сохраняются, но при растяжении вдоль x второй участок практически исчезает. В отличие от структуры Gr1, структура Gr2 показывает более высокую прочность при растяжении вдоль оси y . Например, при температуре 10 К максимальное усилие при растяжении вдоль y равно 71 Н/м, а при растяжении вдоль x — всего лишь 51 Н/м. Деформация до разрыва первых связей при растяжении вдоль оси y (x) равна 0.41 (0.28).

На рис. 6 в двух рядах показана эволюция структур Gr1 и Gr2 с увеличением деформации двухосного растяжения (соответствующие значения деформаций указаны сверху). Три первые панели в рядах показывают (при деформациях $\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = 0.05, 0.15, 0.21$) развитие упругой (обратимой) деформа-

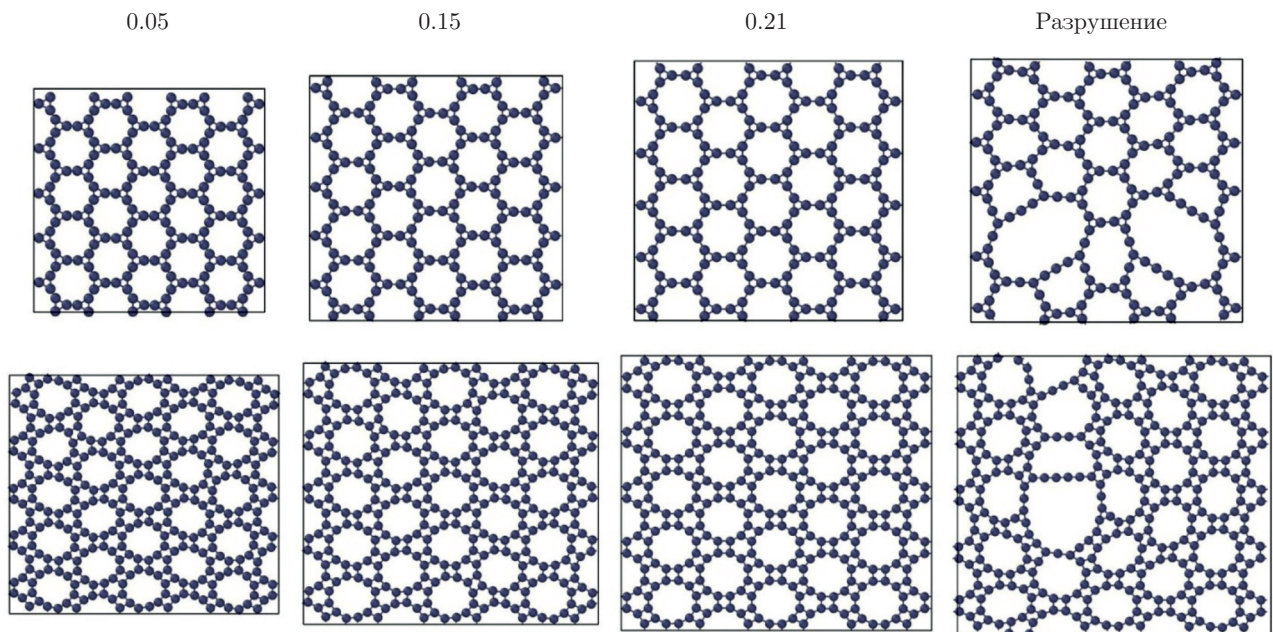


Рис. 6. Трансформация структуры при двухосном растяжении Gr1 (верхний ряд) и Gr2 (нижний ряд). Температура деформации 10 К

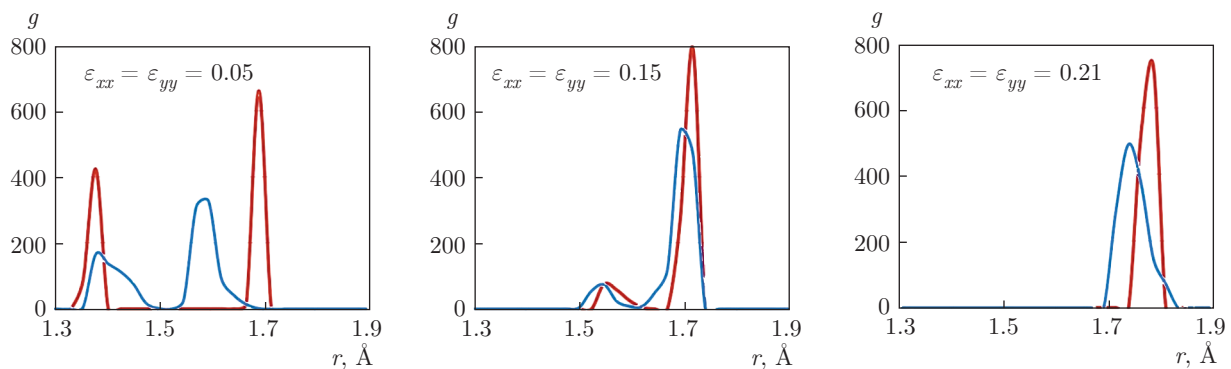


Рис. 7. Функции радиального распределения в структурах Gr1 (красные кривые) и Gr2 (синие кривые) при различных значениях двухосной деформации, проводимой при 10 К

ции, в то время как последние панели показывают разрушение структур при первом резком падении мембранных усилий. Температура деформации 10 К.

На рис. 7 показаны функции радиального распределения при разных значениях двухосной деформации растяжения (указаны для каждой кривой в легенде) для Gr1 (красные кривые) и Gr2 (синие кривые).

4. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ И ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Методом молекулярной динамики исследована прочность трех бездефектных sp^2 -структур углеро-

да (см. рис. 1) при одноосном и двухосном растяжении при температурах 10 К и 300 К. Структуры различаются плотностью, так что в структурах Gr0, Gr1 и Gr2 на один атом в среднем приходится площадь соответственно 2.54 \AA^2 , 4.82 \AA^2 и 3.52 \AA^2 . Можно было ожидать, что прочность структур будет возрастать с ростом их плотности, поскольку в более плотных структурах число валентных связей на единицу площади выше. Это естественное предположение оказывается справедливым для графена (Gr0), который, являясь наиболее плотным, также имеет и наибольшую прочность. Однако для структур Gr1 и Gr2, особенно в случае деформирования при комнатной температуре, данная корреляция отсутствует.

Например, при двухосном растяжении при температуре 300 К менее плотная структура Gr1 начинает рваться при мембранных усилиях $T_x = T_y = 51$ Н/м и деформации $\varepsilon_x = \varepsilon_y = 0.23$, в то время как более плотная структура Gr2 при меньших усилиях $T_x = T_y = 0.38$ Н/м и меньшей деформации $\varepsilon_x = \varepsilon_y = 0.204$. При низкой температуре (10 К) мембранные усилия при разрыве этих структур равны примерно $T_x = T_y = 52$ Н/м, но деформация до разрыва у менее плотной структуры оказывается равной 0.23, что превышает значение 0.21, найденное для более плотной структуры.

Еще более значительным оказывается превышение прочности менее плотной структуры Gr1 по сравнению с более плотной Gr2 в случае одноосного растяжения. Для Gr1 максимальное мембранное усилие при растяжении вдоль оси x при комнатной температуре равно $T_x = 70$ Н/м (см. рис. 4), в то время как для Gr2 оно равно лишь 30 Н/м (см. рис. 5).

Причиной более высокой прочности структуры Gr1 по сравнению с более плотной структурой Gr2 является то, что в Gr1 все валентные связи являются более равнонагруженными, чем в Gr2. Это следует, например, из анализа эволюции структуры и функций радиального распределения, представленных на рис. 6 и 7 для случая двухосного растяжения. При деформации $\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = 0.05$ структура Gr1 имеет два типа связей длиной 1.38 Å и 1.7 Å, а структура Gr2 — связи длиной 1.4 Å и 1.6 Å. С ростом деформации длины этих двух типов связей сближаются. При $\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = 0.15$ видно, что правый пик функции радиального распределения для Gr1 практически не сдвинулся, а левый приблизился к нему, оказавшись при 1.55 Å. Это означает, что деформация структуры Gr1 происходит таким образом, что более короткие связи удлиняются, а более длинные практически не изменяют своей длины. В структуре Gr2 в ходе деформации увеличивается длина обоих типов связей, достигая при $\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = 0.15$ значений 1.55 Å и 1.68 Å. Непосредственно перед разрывом ($\varepsilon_{xx} = \varepsilon_{yy} = 0.21$) оказывается, что в структуре Gr1 все связи имеют очень близкую длину, равную 1.78 Å, в то время как в структуре Gr2 пик функции радиального распределения более размытый и в структуре имеются связи более деформированные, чем в Gr1. Очевидно, что первыми рвутся эти более деформированные связи и более плотная структура оказывается менее прочной.

Ввиду того, что в структуре Gr2 при растяжении возникают сильно напряженные связи, именно она показывает наибольшую чувствительность механических свойств к повышению температуры,

как это следует из результатов, приведенных на рис. 2, 5. В присутствии тепловых флуктуаций вероятность преодоления потенциального барьера, связанного с разрывом валентных связей, растет, причем она максимальна для наиболее нагруженных связей. Интересно, что эффект нагрева проявляется уже при комнатной температуре, которая составляет лишь 0.07 от температуры плавления графена [63].

Полученные результаты показывают, что двумерные углеродные структуры с меньшей плотностью могут быть прочнее более плотных структур.

Финансирование. Работа Б. Р. И. поддержана Российским научным фондом (грант № 17-79-10410) (получение численных результатов); Д. С. В — Российским фондом фундаментальных исследований (грант № 17-02-00984) (обсуждение численных результатов, написание статьи). Работа К. Е. А. поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (грант № 18-32-20158) (обсуждение результатов моделирования). Работа частично выполнена в рамках государственного задания ИПСМ РАН.

ЛИТЕРАТУРА

1. P. Borlido, C. Steigemann, N. N. Lathiotakis et al., *2D Materials* **4**, 045009 (2017).
2. E. A. Belenkov and V. A. Greshnyakov, *Phys. Sol. St.* **55**, 1754 (2013).
3. E. A. Belenkov, M. M. Brzhezinskaya, and V. A. Greshnyakov, *Diam. Relat. Mater.* **50**, 9 (2014).
4. Е. А. Беленков, В. А. Грешняков, *ЖЭТФ* **146**, 116 (2014).
5. E. A. Belenkov and V. A. Greshnyakov, *Phys. Sol. St.* **57**, 2331 (2015).
6. E. A. Belenkov and A. E. Kochengin, *Phys. Sol. St.* **57**, 2126 (2015).
7. Е. А. Беленков, В. В. Мавринский, Т. Е. Беленкова, В. М. Чернов, *ЖЭТФ* **147**, 949 (2015).
8. E. A. Belenkov and V. A. Greshnyakov, *Phys. Sol. St.* **58**, 2145 (2016).
9. V. A. Greshnyakov and E. A. Belenkov, *Tech. Phys.* **61**, 1462 (2016).
10. В. А. Грешняков, Е. А. Беленков, *ЖЭТФ* **151**, 310 (2017).
11. M. Li, Y. Zhang, Y. Jiang et al., *RSC Advances* **8**, 15659 (2018).

12. E. P. Degabriele, J. N. Grima-Cornish, D. Attard et al., Phys. Stat. Sol. B **254**, 1700380 (2017).
13. J. Qu, H. Zhang, J. Li et al., Carbon **120**, 350 (2017).
14. R. Majidi, Physica E **90**, 189 (2017).
15. S. Rouhi, Physica B **513**, 29 (2017).
16. S. Wang, Z. Fan, Y. Cui et al., Carbon **111**, 486 (2017).
17. J. H. Kim, J. H. Jeong, N. Kim et al., J. Phys. D: Appl. Phys. **52**, 083001 (2019).
18. Q. Guo, K. Kondoh, and S. M. Han, MRS Bull. **44**, 40 (2019).
19. I. A. Kinloch, J. Suhr, J. Lou et al., Science **362**, 547 (2018).
20. A. Idowu, B. Boesl, and A. Agarwal, Carbon **135**, 52 (2018).
21. Y. Zhang, Y.-J. Heo, Y.-R. Son et al., Carbon **142**, 445 (2019).
22. B. Liu, A. W.-K. Law, and K. Zhou, J. Membrane Sci. **550**, 554 (2018).
23. A. Jilani, M. H. D. Othman, M. O. Ansari et al., Environ. Chem. Lett. **16**, 1301 (2018).
24. R. I. Babicheva, S. V. Dmitriev, A. A. Kistanov et al., IOP Conf. Ser. Mat. Sci. **447**, 012053 (2018).
25. M. Xue, H. Qiu, and W. Guo, Nanotechnology **24**, 505720 (2013).
26. Z. H. Ni, T. Yu, Y. H. Lu et al., ACS Nano **2**, 2301 (2008).
27. G. Gui, J. Li, and J. Zhong, Phys. Rev. B **78**, 075435 (2008).
28. M. Chhikara, I. Gaponenko, P. Paruch et al., 2D Materials **4**, 025081 (2017).
29. Л. З. Хадеева, С. В. Дмитриев, Ю. С. Кившарь, Письма в ЖЭТФ **94**, 580 (2011).
30. Е. А. Корзникова, А. В. Савин, Ю. А. Баимова, С. В. Дмитриев, Р. Р. Мулюков, Письма в ЖЭТФ **96**, 238 (2012).
31. K. Tada, T. Funatani, S. Konabe et al., Jpn. J. Appl. Phys. **56**, 025102 (2017).
32. I. Evazzade, I. P. Lobzenko, E. A. Korznikova et al., Phys. Rev. B **95**, 035423 (2017).
33. N. Wei, L. Xu, H.-Q. Wang et al., Nanotechnology **22**, 105705 (2011).
34. R. Chellattoan and S. P. Sathian, Sol. St. Comm. **173**, 1 (2013).
35. H. Shen, Mol. Phys. **112**, 2614 (2014).
36. X. Wei, G. Guo, T. Ouyang et al., J. Appl. Phys. **115**, 154313 (2014).
37. Y. A. Baimova, S. V. Dmitriev, A. V. Savin et al., Phys. Solid State **54**, 866 (2012).
38. C. Si, Z. Sun, and F. Liu, Nanoscale **8**, 3207 (2016).
39. J. A. Baimova, S. V. Dmitriev, K. Zhou et al., Phys. Rev. B **86**, 035427 (2012).
40. Q. Lu and R. Huang, Int. J. Appl. Mech. **1**, 443 (2009).
41. T. Zhang, X. Li, and H. Gao, Int. J. Fracture **196**, 1 (2015).
42. S. Suresh and J. Li, Nature **456**, 716 (2008).
43. P. Hess, Phys. Chem. Chem. Phys. **20**, 7604 (2018).
44. K. S. Grishakov, K. P. Katin, V. S. Prudkovskiy et al., Appl. Surf. Sci. **463**, 1051 (2019).
45. S. Plimpton, J. Comput. Phys. **117**, 1 (1995).
46. S. J. Stuart, A. B. Tutein, and J. A. Harrison, J. Chem. Phys. **112**, 6472 (2000).
47. J. Zhao, N. Wei, Z. Fan et al., Nanotechnology **24**, 095702 (2013).
48. S. Wang, Z. Fan, Y. Cui et al., Carbon **111**, 486 (2017).
49. S. Wang, Y. Si, J. Yuan et al., Phys. Chem. Chem. Phys. **18**, 24210 (2016).
50. Y.-Y. Zhang, Q.-X. Pei, Y.-W. Mai et al., J. Phys. D: Appl. Phys. **47**, 425301 (2014).
51. F. Ma, Y. J. Sun, D. Y. Ma et al., Acta Mater. **59**, 6783 (2011).
52. Y. J. Sun, Y. H. Huang, F. Ma et al., Mater. Sci. Eng. B **180**, 1 (2014).
53. Y. J. Sun, F. Ma, Y. H. Huang et al., Appl. Phys. Lett. **103**, 191906 (2013).
54. Z. Yang, Y. Huang, F. Ma et al., RSC Adv. **5**, 105194 (2015).
55. I. Evazzade, I. P. Lobzenko, D. Saadatmand et al., Nanotechnology **29**, 215704 (2018).
56. A. V. Savin, I. P. Kikot, M. A. Mazo et al., Proc. Natl Acad. Sci. USA **110**, 2816 (2013).
57. R. I. Babicheva, K. A. Bukreeva, S. V. Dmitriev et al., Intermetallics **43**, 171 (2013).

- 58.** K. A. Bukreeva, R. I. Babicheva, S. V. Dmitriev et al., *Phys. Sol. St.* **55**, 1963 (2013).
- 59.** K. A. Bukreeva, R. I. Babicheva, A. B. Sultanguzhina et al., *Phys. Sol. St.* **56**, 1157 (2014).
- 60.** К. А. Букреева, Р. И. Бабичева, С. В. Дмитриев, К. Зоу, Р. Р. Мулюков, *Письма в ЖЭТФ* **98**, 100 (2013).
- 61.** V. K. Sutrakar and D. R. Mahapatra, *Intermetallics* **18**, 679 (2010).
- 62.** V. K. Sutrakar and D. R. Mahapatra, *Intermetallics* **18**, 1565 (2010).
- 63.** E. Ganz, A. B. Ganz, L.-M. Yang, and M. Dornfeld, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **19**, 3756 (2017).