

ПОВЕДЕНИЕ АТОМОВ ЛИТИЯ В ПЛОСКОЙ СИЛИЦЕНОВОЙ ПОРЕ, НАХОДЯЩЕЙСЯ НА МЕДНОЙ ПОДЛОЖКЕ. КОМПЬЮТЕРНЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТ

© 2020 г. А. Е. Галашев^{1,2*}, О. Р. Рахманова^{1,2}, А. В. Исаков¹

¹Институт высокотемпературной электрохимии Уральского отделения
Российской академии наук, Екатеринбург, Россия

²Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия

*E-mail: alexander-galashhev@yandex.ru

Поступила в редакцию 13.05.2019;

после доработки 11.07.2019;

принята в печать 22.07.2019

В молекулярно-динамическом эксперименте рассмотрены процессы литизации/делитизации в плоской шелевидной поре, образованной из дефектных листов силицена и находящейся на медной подложке. В зависимости от типа дефектов (моно-, би-, три-, гексавакансии) такая пора, не разрушаясь, может удерживать 67, 86, 60, 23 атома лития на протяжении всего молекулярно-динамического расчета продолжительностью до 1 нс. В результате прохождения цикла интеркаляции/деинтеркаляции структура дефектного силицена изменилась, особенно сильно в присутствии три- и гексавакансий. С ростом размера дефектов усиливается также подвижность атомов лития в силиценовой поре. После делиитизации форма листов силицена не восстанавливается, а объем заключенного между ними пространства изменяется незначительно. Результативное применение силицена в литий-ионных батареях предполагает наличие в его листах только моно- и бивакансий.

Ключевые слова: молекулярная динамика, силицен, медная подложка, литизация, делиитизация, коэффициент подвижности.

DOI: 10.31857/S0207401X20070055

ВВЕДЕНИЕ

Использование батарей с высокой плотностью энергии, длительным сроком службы и низкой стоимостью является ключевым фактором для бытовой электроники, электромобилей и хранения энергии в сетях [1–3]. Работа литий-ионных батарей основана на явлении интеркаляции лития в материал электрода. При зарядке батареи происходят экстракция лития из материала положительного электрода и его внедрение в материал отрицательного электрода, чаще всего изготавливаемого из графита. При разрядке эти процессы меняются на обратные. Одна из основных характеристик электрода — его интеркаляционная емкость, определяемая как количество электричества, сообщаемое электроду при полной зарядке, в расчете на единицу массы или объема. В частности, при полной зарядке углеродного электрода интеркаляционная емкость составляет 372 мА · ч/г. Эта характеристика для кремниевого электрода имеет значение 4200 мА · ч/г [4]. Скорость реакции интеркаляции/деинтеркаляции определяется скоростью диффузии лития в твердой фазе. Коэффициент

диффузии лития в процессе литизации/делитизации, например, в двухслойном графене при комнатной температуре составляет $7 \cdot 10^{-5}$ см²/с [5]. Чтобы избежать значительного изменения объема (почти четырехкратного в случае применения кристаллического кремния) при интеркаляции лития, предлагается использовать отрицательные электроды из тонкопленочных материалов [6–10]. Автономный двухслойный силицен не испытывает значительных структурных изменений во время циклов литизации/делитизации, а изменение объема составляет не более 25%, причем энергетический барьер для диффузии лития довольно низкий (<0.6 эВ) [11]. Силицен, находящийся на медной подложке, является полупроводником *n*-типа. В этом случае гибридизация между двумерной структурой и подложкой настолько сильная, что конус Дирака в зонной структуре силицена пропадает [12]. Однако при интеркаляции в систему атомов щелочного металла дираковские фермионы могут быть восстановлены. Существует достаточно много данных о свойствах силицена, находящегося на серебряной

подложке [7, 13, 14], однако другие материалы подложек все еще остаются неосвоенными. Медь является наиболее широко используемым металлом в электрохимических приборах. Она имеет относительно невысокую стоимость и большую распространенность в земной коре (по сравнению с серебром). Эксперимент [15] и молекулярно-динамические (МД) исследования [16] говорят о формировании аморфной структуры на границе Cu/Si(001) двух объемных фаз, причем в зависимости от температуры подложки взаимная диффузия может достигнуть глубины до 10 нм [17]. Свойства силицена, расположенного на Cu-подложке, пока еще малоизучены.

Цели данной работы – молекулярно-динамическое исследование поведения функционализированного двухслойного силицена, находящегося на медной подложке, в ходе процессов литизации/делитизации, определение кинетических и динамических свойств системы и оценка возможности его применения в качестве анода литий-ионной батареи.

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

В качестве многочастичного потенциала взаимодействия атомов кремния в силицине мы выбрали модельный потенциал Терсоффа [18] с параметрами из работы [19]. Для описания межатомных взаимодействий в медной подложке использован потенциал погруженного атома ЕАМ [20]. Между парами Cu–Si, Si–Si (принадлежащими разным листам), Cu–Li, Si–Li, Li–Li действовал потенциал Морзе с параметрами из работ [21–23], а также параметрами, рассчитанными через интерполяционные соотношения [4].

Рассматриваемая модель силицена представляет собой реконструкцию поверхности 4×4 . Единичная ячейка содержит 18 атомов Si, расположенных в форме ромба. Шесть из них смещены на расстояние 0.074 нм перпендикулярно поверхности вверх для верхнего силицевого листа и вниз – для нижнего. Моделировалась плоская шелевидная пора (ЩП), сформированная двумя листами силицена, находящимися на подложке Cu(111). Величина зазора поры h_g (расстояние между листами) составляла 0.75 нм. Проведенные ранее расчеты по изучению поведения иона лития в силиценовой поре [6] показали, что именно при таком зазоре входящий в пору Li^+ может находиться в ней не менее 100 пс, взаимодействуя со стенками поры.

Листы силицена имели прямоугольную форму размером 4.7×4.0 нм. При наличии совершенной

структуры они содержали по 300 атомов Si. В силицине создавались дефекты различного размера: в девяти местах, приблизительно равномерно размещенных по площади листов, удалялось по 1, 2, 3 и 6 атомов кремния, и таким образом формировались моно-, би-, три- и гексавакансии. Экспериментальные данные свидетельствуют о наличии дефектов в силицине вне зависимости от используемой для его получения подложки [24].

Двухслойный силицен располагался в соответствии с укладкой Бернала (ABAB...) на неподвижной, но взаимодействующей с силицином подложке Cu(111). Закрепление краев силиценовых листов позволяет избежать их нефизичных поворотов, связанных с присутствием нескомпенсированных локальных вращательных моментов [1, 2]. Рассчитанное согласно теории функционала плотности расстояние $r_{\text{Cu-Si}}$ между нижним листом силицена и металлической подложкой составляет 0.2481 нм [25]. Однако предварительные расчеты с использованием такого значения зазора между подложкой и силиценовыми листами показали непрерывное отдаление последних от медной подложки при интеркаляции лития. Поэтому значение $r_{\text{Cu-Si}}$ было увеличено до 0.27 нм, что соответствует данным работы [26]. Молекулярно-динамические расчеты всех систем проводились в NVT-ансамбле при температуре 300 К.

Для предотвращения сильного выгибания листов силицена в центре ЩП между ними на равном расстоянии вертикально были размещены два шестизвенных циклических образования (в виде “колонны”), в узлах которых находились атомы Si. Эта стабилизирующая структура была неподвижна, однако взаимодействовала с атомами Li и Si посредством потенциала Морзе [22, 23]. Моделирование заполнения изначально пустотелой силиценовой ЩП, находящейся на медной подложке, показало появление значительного прогиба листов силицена [7]. Введение вертикальной стабилизирующей поддержки между листами силицена позволяет этого избежать [27]. Введение “колонны” в ЩП выразилось в уменьшении деформации листов силицена, особенно содержащих крупные дефекты вакансионного типа. Это позволило сделать наполнение ЩП литием более значительным. В отсутствие “колонны” емкость поры снижалась на 20–30%.

Процесс литизации двухслойного силицена на подложке осуществлялся посредством периодического (через каждые 10 пс) попарного добавления в систему ионов лития. Первоначальное положение пары ионов Li^+ выбиралось случайным образом на линии, параллельной оси y и находящейся вблизи входа в пору на уровне $h_g/2$. Предвари-

тельно, до реализации процесса интеркаляции, была проведена процедура релаксации системы в течение 200 пс. Затем ионы лития запускались в ЩП через промежутки времени 10 пс, или $10^5 \Delta t$, где $\Delta t = 1 \cdot 10^{-16}$ с – величина временного шага. Экспериментально установлено, что при интеркаляции ион Li^+ , проникая в анод, быстро приобретает электрон и становится нейтральным атомом [28]. В ходе обратного процесса (деинтеркаляции) атомы Li захватывают электроны и в виде ионов устремляются к катоду. Такая перезарядка всегда происходит в кремнии, но не происходит в углеродных материалах (например, графите). Продолжительность расчета в 10 пс достаточна для вычисления равновесных свойств системы (полной энергии и тензора напряжений) и коэффициентов подвижности атомов. Кроме того, на таком интервале ионы могут с большой вероятностью найти энергетически выгодные места в ЩП и оставаться в них.

Электрическое поле величиной 10^3 В/м имело вектор напряженности, направленный вдоль оси x . Заряды (ионы) двигались по поре под действием этого электрического поля, испытывая кулоновское отталкивание по отношению друг к другу. По прошествии 10 пс эти пополнившие ЩП ионы становились атомами и в дальнейшем в ходе интеркаляции оставались электрически нейтральными. Такой временной интервал был достаточен для расчета тензора напряжений силицена и коэффициента подвижности атомов Li. Процесс интеркаляции прекращался, когда система начинала разрушаться (при наличии гексавакансий) или ионы и атомы лития начинали активно покидать ЩП. Например, процесс заполнения литием силиценовой поры, сконструированной из листов с моновакансиями, длился 0.75 нс. Кроме визуального наблюдения за системой, индикатором заполнения ЩП служил скачок полной энергии системы.

Процесс делитизации в обратном направлении происходил путем попарного выведения ионов лития из поры. После удаления из рассмотрения ионов Li^+ , уже покинувших пору на предыдущем этапе, новая пара ионов начинала двигаться под действием электрического поля величиной 10^5 В/м, направленного в обратном направлении вдоль оси x . Напряженность электрического поля, поддерживающего процесс деинтеркаляции, была увеличена для преодоления ионами энергетического барьера, связанного с их выходом из ЩП. Время наблюдения за выходом пары ионов из ЩП в этом случае было увеличено до 200000 временных шагов (20 пс). В расчетах использовались модифицированные нами коды программного

комплекса LAMMPS [29], который запускался на гибридном вычислителе кластерного типа “УРАН” при ИММ УрО РАН.

Коэффициент подвижности (D) атомов лития в ЩП рассчитывался через средний квадрат смещения атомов – $\langle [\Delta \mathbf{r}(t)]^2 \rangle$:

$$D = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{1}{2\Gamma t} \langle [\Delta \mathbf{r}(t)]^2 \rangle_{t_0}. \quad (1)$$

Здесь $\Gamma = 3$ – размерность пространства. Через $\langle \dots \rangle_{t_0}$ обозначено усреднение по начальным моментам времени.

Для расчета напряжений, возникающих в силицене, листы разбивались на элементарные площадки. Напряжения $\sigma_{u\alpha}(l)$, возникающие в направлении действия сил $\alpha = x, y, z$, вычисляются на каждой площадке с номером l , имеющей ориентацию, определяемую направлением $u = x, y, x$. В этих расчетах используются произведения проекций скоростей атомов и значения проекции сил f_{ij}^α , действующих на l -площадку со стороны других атомов при соблюдении соответствующих условий [30]:

$$\sigma_{u\alpha}(l) = \left\langle \sum_i^k \frac{1}{\Omega} (m v_u^i v_\alpha^i) \right\rangle + \frac{1}{S_l} \left\langle \sum_i^k \sum_{j \neq i}^{(u_i \leq u, u_j \geq u)} (f_{ij}^\alpha) \right\rangle. \quad (2)$$

Здесь k – количество атомов на l -площадке; Ω – объем, приходящийся на атом; m – масса атома; v_α^i – α -проекция скорости i -го атома; S_l – площадь l -площадки. Условия суммирования по j в последней сумме выражения (2) отражены как в нижнем, так и верхнем индексе суммы; сила, возникающая при взаимодействии атомов i и j , проходит через l -площадку; u_i – текущая координата атома i , верхний индекс “ u ” суммы обозначает координату точки встречи прямой, проходящей через центры атомов i и j , с l -площадкой.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Силиценовая ЩП, находящаяся на подложке Cu(111), после полной интеркаляции литием изображена на рис. 1 в виде тонкой паутины, чтобы показать все осажденные на стенки поры атомы Li. Видно, что размещение атомов Li в поре неравномерное. Первая половина поры по направлению оси x заполнена атомами Li значительно плотнее, чем вторая половина: 33 атома Li имеют координату $x \leq 2.6$ нм и только 15 атомов Li размещаются в пространстве с координатой $x > 2.6$ нм. В средней части нижнего листа силицена наблюдается выпуклость по отношению к подложке, а в той же части верхнего листа – вогнутость. Значительное

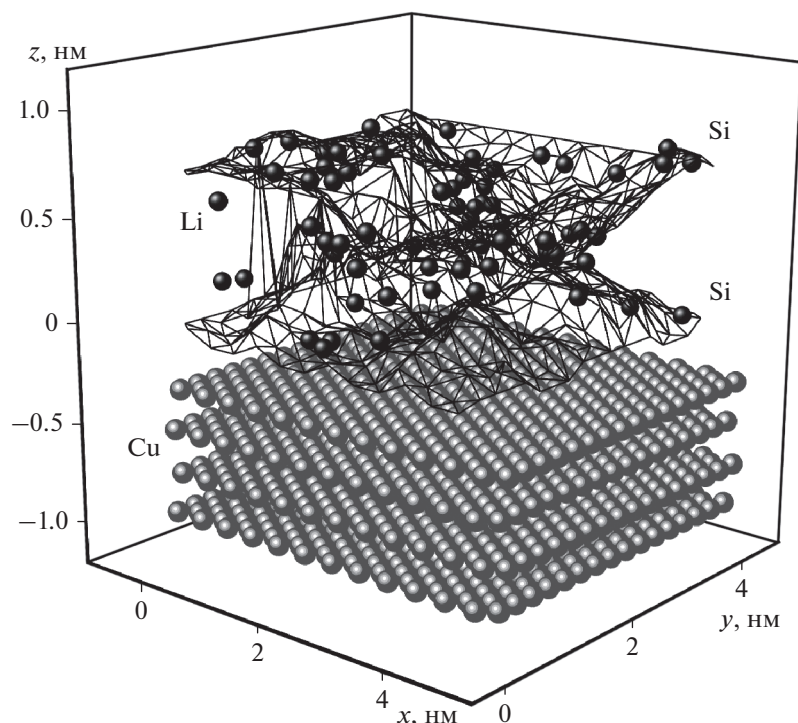


Рис. 1. Щелевидная пора, образованная силицевыми листами с моновакансиями и находящаяся на подложке Cu(111), после интеркаляции лития.

сужение поры в средней части затрудняет ее прохождение ионами Li^+ и ограничивает заполняемость поры литием.

Траектория движения иона лития в щелевидной поре (листы которой заполнены тривакансиями) в процессе литизации (штриховая линия) и делитизации (сплошная линия) показана на рис. 2. Цифрами 1, 2 и 3 обозначены следующие точки: входа иона в пору, закрепления иона в ЩП после литизации и выхода иона из поры после делитизации соответственно. За время литизации (10 пс)

ион успевает преодолеть барьер на вход в ЩП [6], продвинувшись внутрь поры на расстояние, примерно равное половине длины ЩП (~ 2.5 нм), и закрепиться в “седловой” точке, чаще всего над центром шестизвенного Si-кольца. При дальнейшей литизации теперь уже атом Li может совершать небольшие колебательные движения в окрестности точки закрепления в пору. Во время делитизации, вновь приобретая заряд, ион лития начинает двигаться по направлению поля к выходу из поры и успевает покинуть ЩП за 20 пс. Следует отметить, что наблюдается корреляция между размером вакансионных дефектов в листах силицена и скоростью делитизации ЩП: чем больше вакансии, тем быстрее ион лития покидает щелевидную пору.

Таблица 1. Максимальное количество атомов лития, вмещаемых в силицевой канал, содержащий различные типы вакансий и находящийся на серебряной и медной подложках

| Тип вакансии в листах силицена | Тип подложки | |
|--------------------------------|--------------|------|
| | серебро | медь |
| Совершенный | 39 | 48 |
| Моновакансии | 51 | 67 |
| Бивакансии | 71 | 86 |
| Тривакансии | 79 | 60 |
| Гексавакансии | 42 | 23 |

Максимальное количество атомов Li, внедренных в силицевые ЩП с разным типом вакансионных дефектов, приведено в табл. 1. Для сравнения здесь приводятся результаты внедрения лития при нахождении ЩП на подложке Ag(111) в отсутствие “колонны” между листами силицена. Видно, что в пригодных для реального использования случаях, т.е. для совершенного силицена и силицена с моно- и бивакансиями, число внедренных в пору атомов Li заметно больше, когда листы силицена лежат на медной подложке. Расчеты для пор с три- и гексавакансиями

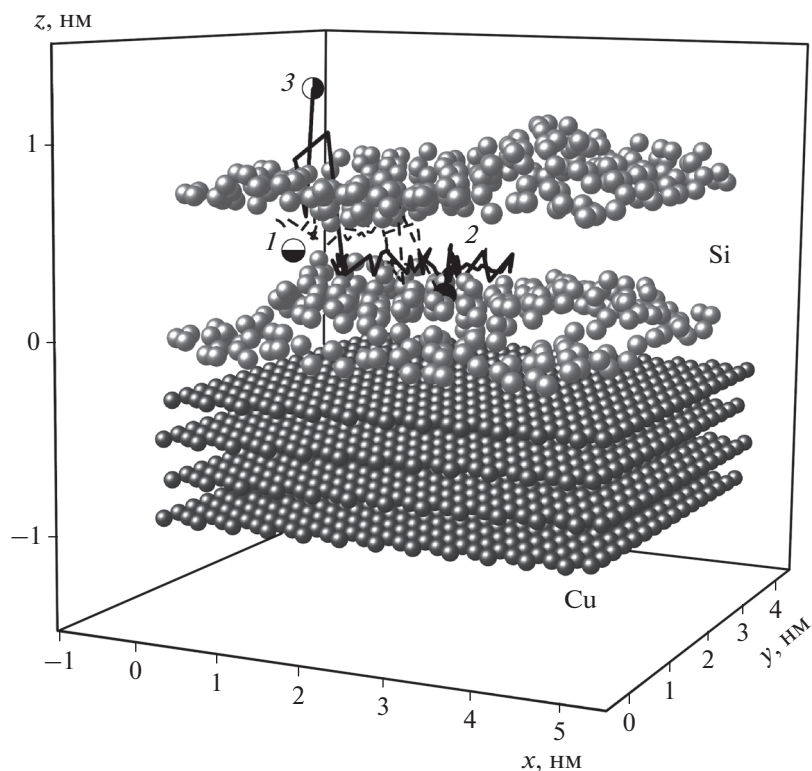


Рис. 2. Траектория движения иона лития в процессе литизации (штриховая линия) и делитизации (сплошная линия) в силициновой щелевидной поре, содержащей тривакансии, на подложке Cu(111): 1 – точка начала траектории иона (перед входом в канал) в момент времени $t = 0$ пс, 2 – конечная точка траектории иона после литизации, 3 – конечная точка траектории иона после делитизации.

показали нежизнеспособность этих конструкций из-за значительных структурных перестроек в силицине и начавшегося разрушения его листов.

Рассмотрим более подробно поведение дефектов и принадлежность атомов Li к листам силицина на примере полностью заполненной литием силициновой поры с моновакансиями. Исследуемые конфигурации относятся к моменту времени 0.75 нс (или $7.5 \cdot 10^6 \Delta t$). Xy -проекции верхнего (а) и нижнего (б) слоев разрезанной средней плоскостью ($z = h_g/2$) поры показаны на рис. 3 (вид со стороны плоскости $z = h_g/2$). Одна из моновакансий нижнего листа трансформировалась в большое полое образование, что, по-видимому, есть проявление разрушительного воздействия медной подложки на силицен. В верхнем листе наблюдается трансформация некоторых моновакансий в циклические образования овальной формы, содержащие от 7 до 9 атомов Si. Восемь моновакансий нижнего листа и семь моновакансий верхнего листа деформировались, но сохранили свою первоначальную форму. Верхняя и нижняя части поры имеют равновеликие объемы, однако число атомов Li в них различно: 37 атомов находятся в

верхней части и 30 атомов присутствуют в нижней части. Находящиеся в ЩП атомы лития располагаются преимущественно над центрами шестизвенных кремниевых колец.

Поведение коэффициента подвижности D атомов Li в ЩП в процессах интеркаляции и деинтеркаляции непредсказуемо (рис. 4). Общей чертой поведения D во всех рассмотренных случаях является его высокие значения на начальном участке интеркаляции. Это естественно, так как при небольшом числе атомов Li в поре им передается от ионов Li^+ большее удельное значение импульса, которое и приводит к увеличению значения коэффициента D . Однако, когда число атомов Li в ЩП становится больше 20, рельеф стенок поры начинает оказывать сильное влияние на подвижность атомов Li. В связи с этим величина D может как уменьшаться при наличии моновакансий (рис. 4б), так и увеличиваться в случае бивакансий (рис. 4в). Также коэффициент D достаточно непредсказуемо ведет себя при деинтеркаляции. Эта величина подвержена резким (для совершенного силицина (рис. 4а)) и продолжительным (для силицина с моновакансиями) изменениям в ходе делитизации. Значения D также

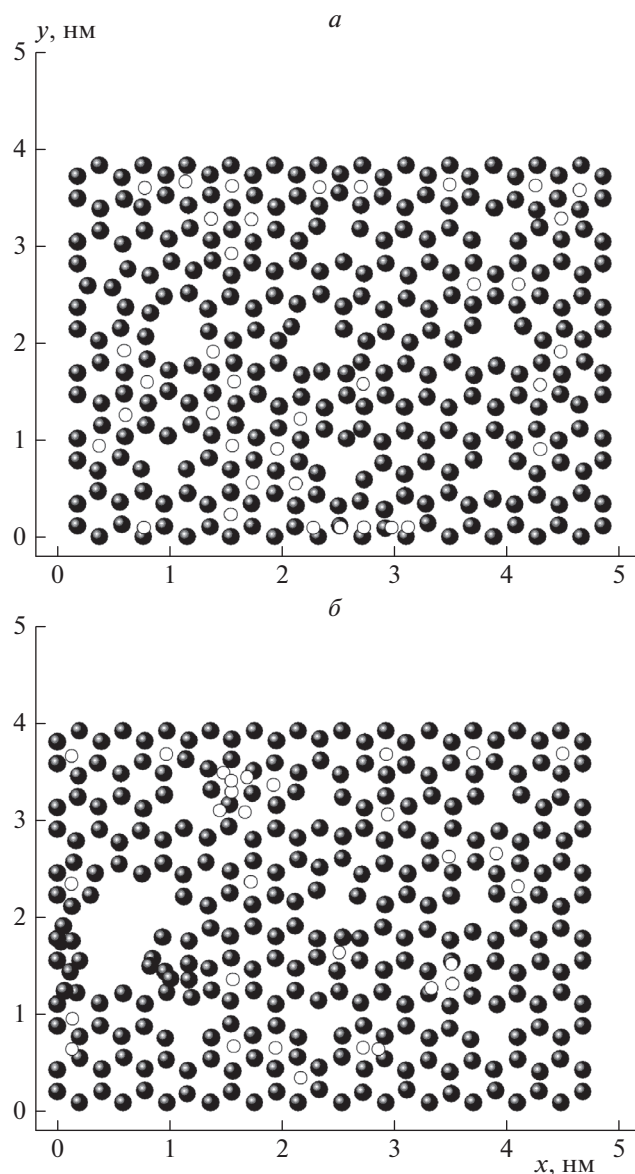


Рис. 3. Xy-проекции верхнего (а) и нижнего (б) листов силицена с моновакансиями на подложке Cu(111) в момент полного литирования (67 атомов лития находятся в поре): ● – атомы Si, ○ – атомы Li.

могут снижаться при деинтеркаляции посредством флуктуаций, как это имеет место в присутствии в силицене бивакансий, или почти непрерывно, когда в силицене присутствуют тривакансии (рис. 4г). В случае силицена с тривакансиями наблюдается достаточно сильная перестройка структуры в обоих листах силицена. Однако в верхнем листе часть дефектов сохраняет свой вид. Вертикальное искажение листов после процесса литизации/делитизации не столь значительное.

Как для совершенного, так и дефектного силицена напряжения σ_{xx} и σ_{yy} , связанные с введением в ЩП ионов (атомов) лития, заметно уступают

напряжениям σ_{zz} , появляющимся в стенках поры. На рис. 5 показаны средние для верхнего (1) и нижнего (2) листов силицена распределения напряжений σ_{xx} и σ_{zz} , полученные при полном заполнении ЩП литием. Эти распределения относятся к случаю, когда разбивка листов на элементарные площадки продвигалась вдоль направления x (“зиг-заг”), а сами элементарные площадки вытянуты вдоль направления y (“кресло”). При такой разбивке получены наиболее сильные напряжения σ_{zz} , обусловленные внедрением лития в ЩП. Эти напряжения вызваны силами вертикального направления. Как видно из рис. 5, при интер-

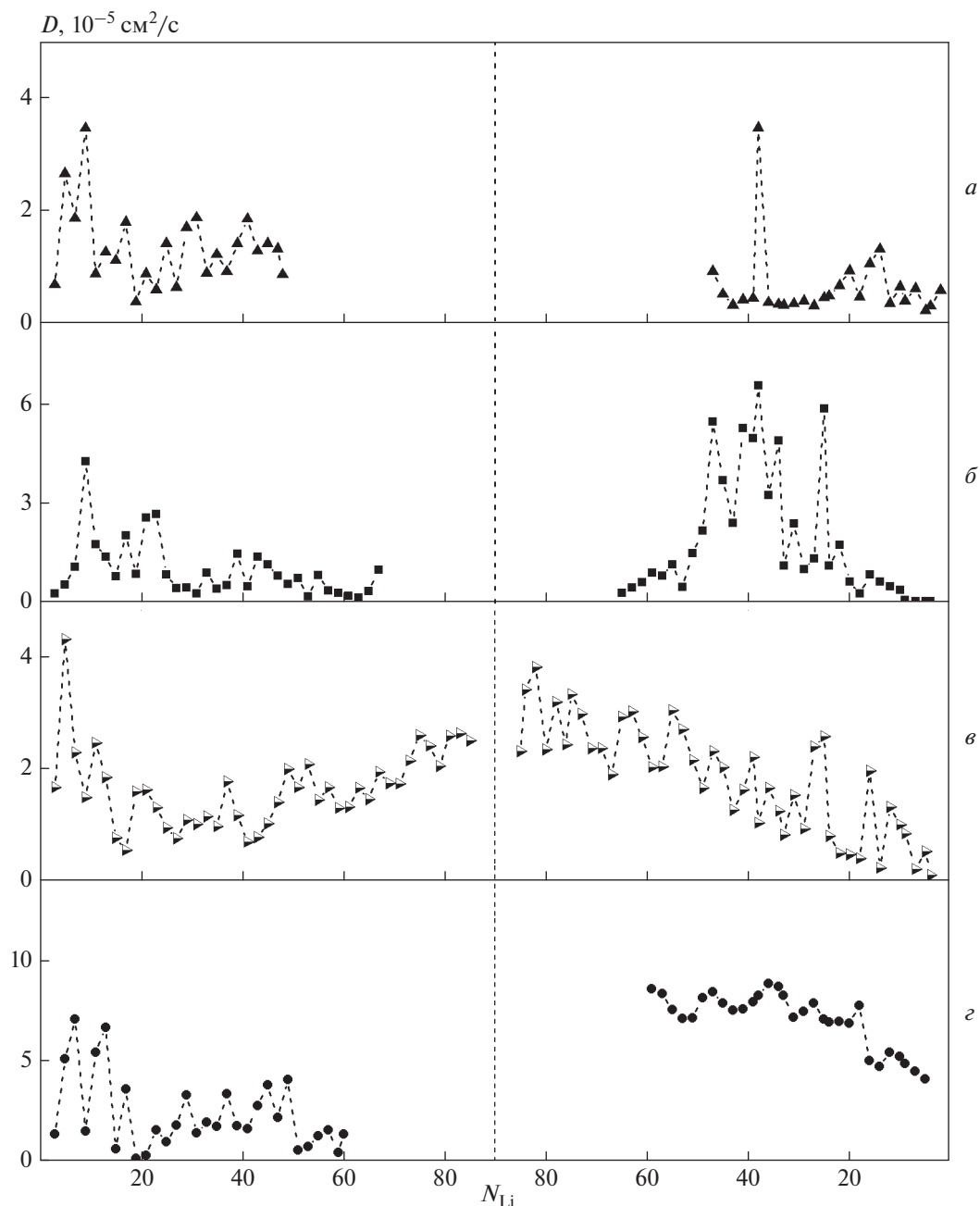


Рис. 4. Зависимость коэффициента подвижности атомов лития (D) в процессе интеркаляции (слева) и деинтеркаляции (справа) в силициновых щелевидных порах с совершенным силицином (a) и силицином, имеющим моно- (b), би- (c) и тривакансии (d), от числа атомов лития (N_{Li}).

каляции лития сильные локальные напряжения σ_{zz} появляются в листах совершенного силицена (a), а также силицена, имеющего бивакансии (c) и тривакансии (d). Распределения напряжений в листах силицена с гексавакансиями (d) в целом похожи на соответствующие распределения в листах с тривакансиями (на рис. 5 не показаны). При деинтеркаляции напряжения σ_{zz} остаются более значительными в листах силицена с бивакансиями.

Достигнутые максимальные значение σ_{zz} при интеркаляции составляют приблизительно 17–19% от предельного напряжения силицена при растяжении (20.45 ГПа) [31] и не являются критичными.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Согласно проведенным расчетам, используемый в литий-ионных батареях силицен должен

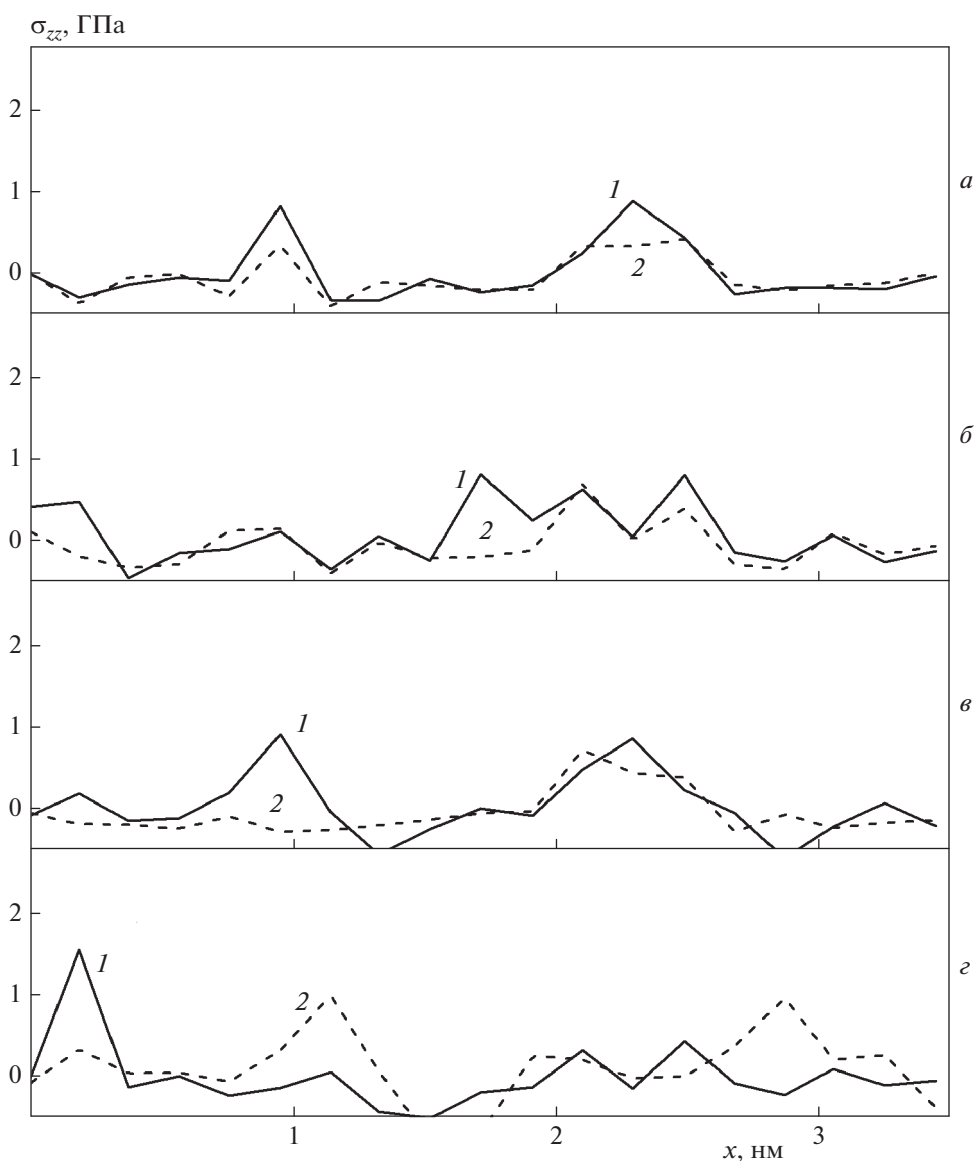


Рис. 5. Распределение σ_{zz} -напряжений в силициновых листах, образующих плоскую шелевидную пору, находящуюся на подложке Cu(111), когда пора заполняется литием до предела, в зависимости от типа дефектов: *a* – совершенный силицен, *b* – моно-, *v* – би-, *z* – тривакансии; 1 – верхний и 2 – нижний листы силициновой ЩП; $N_{Li} = 48, 67, 86, 60$ (сверху вниз).

иметь дефекты только в виде моно- и бивакансий. Применение совершенного силицена и силициновой структуры с такими дефектами в среднем на 20% увеличивает число адсорбированных атомов Li по сравнению со случаем использования для поддержки силицена серебряной подложки. Применение силицена с дефектами в виде три- и гексавакансий, расположенного на медной подложке, в качестве анодного материала приводит не только к сокращению (по отношению к мало-размерным вакансионным дефектам) числа адсорбированных атомов Li, но также к разрушению материала анода.

В ходе реального физического эксперимента получить дефектную двумерную структуру гораздо проще, чем совершенную. Неконтролируемые дефекты могут образовываться самопроизвольно. Контроль за формированием вакансий определенного размера можно осуществлять с помощью сканирующей зондовой литографии [32] или ионной бомбардировки [33, 34]. В первом случае двумерную структуру можно модифицировать с довольно высокой точностью. А во втором – диаметр сканирующей области, как правило, составляет всего несколько нанометров, что позволяет выполнить быстрое сканирование

поверхности и корректировку размера вакансий. Моно- и бивакансии являются энергетически выгодными дефектами и могут быть устойчивыми при достаточно высоких температурах [35].

Ионы и атомы лития, интеркалированные в совершенную силициновую ЩП и пору с моноили бивакансиями, расположенную на медной подложке, имеют приблизительно одинаковую скорость диффузии. Скорость диффузии увеличивается более чем на порядок при использовании силицена с три- и гексавакансиями. Однако неустойчивость такой силициновой структуры не позволяет воспользоваться этим преимуществом. Предпочтительным размещением атома Li в силициновой поре является местоположение, находящееся над центром гексагонального Si-кольца. На краях силициновых листов атомы Li расположены преимущественно над (или под) атомами Si. Напряжения σ_{zz} , действующие в плоскости листов силицена и вызванные силами межатомного взаимодействия, направленными перпендикулярно этим плоскостям, являются доминирующими при интеркаляции лития в пору. Напряженное состояние стенок силициновой ЩП не является однородным, но в результате движения атомов и ионов лития в поре появляются всплески напряжений, величина которых не превосходит 19% от предельного растягивающего напряжения силицена.

Исследование проведено в рамках бюджетной тематики Института высокотемпературной электрохимии УрО РАН, номер государственной регистрации темы АААА-А19-119020190046-5.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Галашев А.Е., Зайков Ю.П.* // ЖФХ. 2015. Т. 89. № 12. С. 1899; <https://doi.org/10.7868/S0044453715120122>
2. *Галашев А.Е., Зайков Ю.П.* // Электрохимия. 2015. Т. 51. № 9. С. 983; <https://doi.org/10.7868/S0424857015090054>
3. *Галашев А.Е., Рахманова О.Р.* // Теплофизика высоких температур. 2016. Т. 54. № 1. С. 13; <https://doi.org/10.7868/S0040364415050129>
4. *Галашев А.Е., Зайков Ю.П., Владыкин П.Г.* // Электрохимия. 2016. Т. 52. № 10. С. 1085; <https://doi.org/10.7868/S0424857016100042>
5. *Kuhne M., Paolucci F., Popovic J., Ostrovsky P.M., Maier J., Smet J.H.* // Nature Nanotech. 2017. V. 12. P. 895; <https://doi.org/10.1038/nnano.2017.108>
6. *Rakhmanova O.R., Galashev A.E.* // Rus. J. Phys. Chem. A. 2017. V. 91. № 5. P. 921; <https://doi.org/10.1134/S003602441705020X>
7. *Галашев А.Е., Иваничкина К.А., Воробьев А.С., Рахманова О.Р.* // ФТТ. 2017. Т. 59. № 6. С. 1218; <https://doi.org/10.21883/FTT.2017.06.44496.300>
8. *Galashev A.Y., Ivanichkina K.A.* // Phys. Lett. A. 2017. V. 381. P. 3079; <https://doi.org/10.1016/j.physleta.2017.07.040>
9. *Галашев А.Е., Иваничкина К.А.* // ЖФХ. 2017. V. 91. № 12. С. 125; <https://doi.org/10.1134/S003602441712007X>
10. *Sitinamaluwa H., Nerkar J., Wang M., Zhang S., Yan C.* // RSC Adv. 2017. V. 7. № 22. P. 13487; <https://doi.org/10.1039/C7RA01399J>
11. *Tritsaris G.A., Kaxiras E., Meng S., Wang E.* // Nano Lett. 2013. V. 13. № 5. P. 2258; <https://doi.org/10.1021/nl400830u>
12. *Quhe R., Yuan Y., Zheng J. et al.* // Sci. Rep. 2014. V. 4. P. 5476; <https://doi.org/10.1038/srep05476>
13. *Cahangirov S., Ozcelik V.O., Xian L. et al.* // Phys. Rev. B. 2014. V. 90. № 3. P. 035448; <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.90.035448>
14. *Chen L., Li H., Feng B. et al.* // Phys. Rev. Lett. 2013. V. 110. № 8. P. 085504; <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.110.085504>
15. *Echigoya J., Enoki H., Satoh T. et al.* // Appl. Surf. Sci. 1992. V. 56. № 8. P. 463; [https://doi.org/10.1016/0169-4332\(92\)90272-Y](https://doi.org/10.1016/0169-4332(92)90272-Y)
16. *Zhang J., Liu C., Shu Y., Fan J.* // Appl. Surf. Sci. 2012. V. 261. P. 690; <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2012.08.082>
17. *Vaz C.A.F., Steinmuller S.J., Moutafis C., Bland J.A.C., Babkevich A.Y.* // Surf. Sci. 2007. V. 601. P. 1377; <https://doi.org/10.1016/j.susc.2007.01.001>
18. *Tersoff J.* // Phys. Rev. B. 1988. V. 38. № 14. P. 9902; <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.38.9902>
19. *Tersoff J.* // Ibid. 1994. V. 49. № 23. P. 16349; <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.49.16349>
20. *Foiles S.M., Baskes M.I., Daw M.S.* // Ibid. 1986. V. 33. № 12. P. 7983; <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.33.7983>
21. *Yu R., Zhai P., Li G., Liu L.* // J. Electron. Mater. 2012. V. 41. № 6. P. 1465; <https://doi.org/10.1007/s11664-012-1916-x>
22. *Das S.K., Roy D., Sengupta S.* // J. Phys. F: Metal. Phys. 1977. V. 7. № 1. P. 5; <https://doi.org/10.1088/0305-4608/7/1/011>
23. *Fang T.-E., Wu J.-H.* // Comp. Mater. Sci. 2008. V. 43. № 4. P. 785; <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2008.01.066>
24. *Pan Y., Zhang L., Huang L. et al.* // Small. 2014. V. 10. № 11. P. 2215; <https://doi.org/10.1002/smll.201303698>
25. *Berdiyev G.R., Bahloul H., Peeters F.M.* // J. Appl. Phys. 2015. V. 117. № 22. P. 225101; <https://doi.org/10.1063/1.4921877>

26. Kawahara K., Shirasawa T., Arafune R. et al. // Surf. Sci. 2014. V. 623. P. 25;
<https://doi.org/10.1016/j.susc.2013.12.013>
27. Berdiyborov G.R., Neek-Amal M., Peeters F.M., van Duin A.C.T. // Phys. Rev. B. 2014. V. 89. № 2. P. 024107;
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.89.024107>
28. Galashev A.Y., Ivanichkina K.A. // J. Electrochem. Soc. 2018. V. 165. № 9. P. A1788;
<https://doi.org/10.1149/2.0751809jes>
29. Plimpton S. // J. Comp. Phys. 1995. V. 117. № 1. P. 1;
<https://doi.org/10.1006/jcph.1995.1039>
30. Галашев А.Е. // Физика металлов и металловедение. 2016. Т. 117. № 3. С. 258;
<https://doi.org/10.7868/S0015323016030050>
31. Roman R.E., Cranford S.W. // Comp. Mater. Sci. 2014. V. 82. P. 50;
<https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2013.09.030>
32. Neubeck S., Freitag F., Yang R., Novoselov K.S. // Phys. Stat. Sol. B. 2010. V. 247. P. 2904;
<https://doi.org/10.1002/pssb.201000186>
33. Tapasztó L., Dobrik G., Nemes-Incze P., Vertesy G., Lambin Ph., Biró L.P. // Phys. Rev. B. 2008. V. 78. P. 233407;
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.78.233407>
34. Kowaki Y., Harada A., Shimojo F., Hoshino K. // J. Phys. Condens. Matter. 2009. V. 21. P. 064202;
<https://doi.org/10.1088/0953-8984/21/6/064202>
35. Галашев А.Е., Рахманова О.Р. // УФН. 2014. Т. 184. С. 1045;
<https://doi.org/10.3367/UFNr.0184.201410c.1045>