

## Формирование, структура и свойства “сварных” $h$ -BN/графен соединений

Л. А. Чернозатонский<sup>+,\*</sup>, В. А. Демин<sup>+</sup>, А. А. Артюх<sup>+</sup>

<sup>+</sup>Институт биохимической физики им. Эмануэля РАН, 119334 Москва, Россия

<sup>\*</sup>Научная школа: Химия и технология материалов, РЭУ им. Плеханова, 117997 Москва, Россия

Поступила в редакцию 5 мая 2016 г.

После переработки 30 мая 2016 г.

Рассмотрены структуры из бислоя  $h$ -BN/графен с отверстиями, в которых атомы на краях соединены между собой  $sp^2$ -гибридизованными связями C–B и C–N и образуют непрерывные переходы от слоя к слою с топологическими дефектами внутри отверстий. Изучены их формирование, стабильная атомная структура таких соединений муарового типа (с различными углами поворота графена относительно монослоя гексагонального нитрида бора) с замкнутыми гексагональными отверстиями, расположенными в центрах AA упаковки муаровой сверхрешетки. Методом теории функционала электронной плотности проведено исследование стабильности, электронных и механических свойств таких двуслойных BN/графен наносеток. Показано, что они проявляют полупроводниковые свойства. Их электронные зонные структуры и механические характеристики отличаются от свойств отдельно взятых однослойных наносеток с теми же геометрией и расположением отверстий.

DOI: 10.7868/S0370274X16130099

**Введение.** Структуры из двумерных (2D) атомных слоев, связанных молекулярными силами, привлекают внимание исследователей тем, что их свойства отличаются от свойств отдельно взятого 2D слоя [1]. Слои из двух графенов (бислоиный графен), а также монослои из гексагонального нитрида бора и графена (G/BN) изучаются достаточно интенсивно в последние годы [2–4] в связи с тем, что, создавая, например, наносетки на основе графена [5, 6] и BN [7, 8], можно получить материалы с полупроводниковыми свойствами.

Ранее было предсказано [9, 10], а затем обнаружено [11], что в биграфене границы nanoотверстий “свариваются” – они представляют собой замкнутую поверхность свернутого графена – графеновые складки из  $sp^2$ -гибридизованных C-атомов. Это явление “сваривания” краев попарно примыкающих слоев было достаточно давно известно в нанографите [12], а также для разрезанных электронным лучом молекулярно связанных двух слоев графена [13, 14].

В данной работе рассмотрим возможные устойчивые системы молекулярно связанных слоев гексагонального BN и графена с геометрически симметричными отверстиями. Отметим, что ковалентно связанные нанообласти графена и нитрида бора были созданы недавно на поверхности меди [15].

Покажем, что в BN/G бислоях с муаровой структурой [16] можно сформировать наносетки с такими

отверстиями в виде гексагональных BN/G сверхрешеток, и что они могут, в отличие от графена, проявлять полупроводниковые свойства в зависимости от поворота одного слоя относительно другого и строения отверстий в сверхячейке. Рассмотрим также их механические свойства, отличные от свойств графена и биграфена. Расчеты структуры и характеристик BN/G наносеток проводился *ab-initio* методом теории функционала (DFT) в приближении локальной электронной плотности (LDA) в программном пакете SIESTA [17].

**Структура муарового BN/G бислоя.** Из-за слабой несоизмерности атомных решеток монослоев графена и нитрида бора, бислои из них представляет собой всегда муаровую картину (см. пример на рис. 1). Известно, что наряду с поворотом одного слоя относительно другого на угол  $\theta$ , элементарная суперячейка Муара поворачивается на угол  $\varphi$ , который связан с углом  $\theta$  [16]. Поворот можно осуществить как около центра совпадения координат ( $X = 0, Y = 0$ ), стоящих друг над другом атомов углерода над бором (или азотом, рис. 1b), так и вокруг оси, содержащей центры C и BN атомных гексагонов (рис. 1c). Параметр  $L_\theta$  гексагональной сверхрешетки Муара выражается формулой также через отношение длин связи  $\delta$  ( $\delta = a_{B-N}/a_{C-C} \approx 1.021$  для  $a_{C-C}(B-N) = 1.42$  (1.45) Å и  $0^\circ \leq \theta \leq 30^\circ$ ) и угол  $\theta$ :  $L_\theta = a_{C-C}/\sqrt{(2\delta(1 - \cos \theta) + (\delta - 1)^2)}$  [16]. Причем в

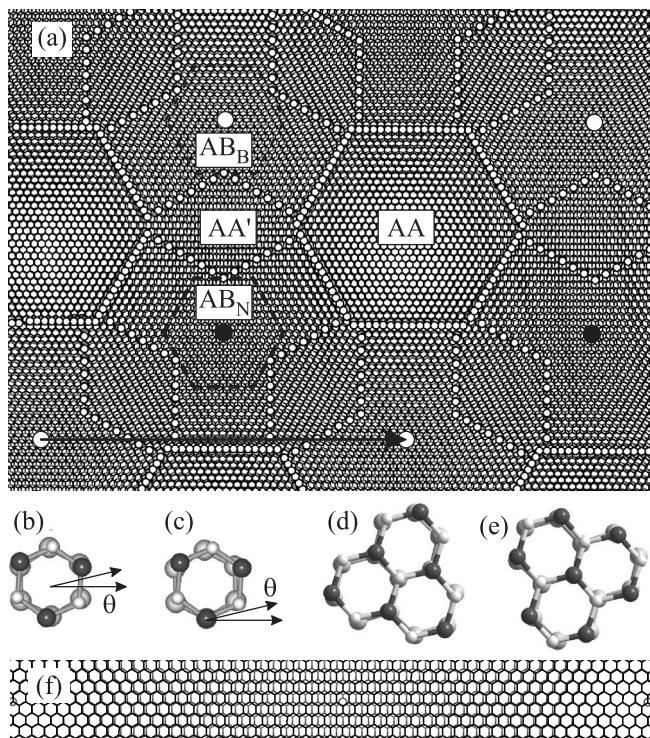


Рис. 1. Вид атомной структуры BN/G муара  $\theta = 4.1^\circ$  (a), где центр ее суперячейки находится в центре области AA по схеме (b) – гексагон из C-атомов расположен под BN-гексагоном. Вектор  $L_\theta$  ( $L_4 = 34 \text{ \AA}$ ) обозначен стрелкой вниз. Области AA и AB (штриховой гексагон) имеют гексагональную форму, AA' области между ними – ромбическую. Схема центра области AA в случае, когда N-атом находится прямо над C-атомом (c); схемы центра области AB<sub>B</sub>, где C-атом находится под B-атомом (d), и центра другой области AB<sub>N</sub>, когда C-атом находится под N-атомом (e); для структуры (a) эти центры отмечены белыми и темными кружками. Бислойная лента из графеновой ленты 8ZGNR, положенной на BN ленту 8ZBNR вдоль направления “зигзаг” (f). Расстояние между кружками по ее краям есть период сверхрешетки бислоя  $L_0 \approx 125.5 \text{ \AA}$ . Кружок в центре есть центр области AA' упаковки слоев

муаре BN/G можно условно выделить области в форме гексагона с упаковкой слоев типа AA, где каждый атом одного слоя находится почти над атомами другого слоя, и области типа AB – структуры Бернала, где решетки слоев сдвинуты на длину связи  $a_{C-C}$  вдоль направления “кресло” так, что только половина атомов в разных слоях находятся один над другим. Три области AB<sub>B</sub> имеют в центре атом бора над атомом углерода, а в области AB<sub>N</sub> – атом азота над C-атомом (рис. 1a, d, e). Между областями AA и AB расположены ромбические AA' области с зигзагообразными линиями атомов, сдвинутых в одном

слое относительно другого примерно на  $0.5a_{C-C}\sqrt{3}$  по направлению между центрами соседних областей AA (рис. 1). Вблизи границ областей упаковка атомов плавно переходит из одного типа в другой.

В случае наложения слоев в одинаковом направлении ( $\theta = 0^\circ$ ,  $\delta \approx 1.02$ ) период сверхрешетки  $L_0 \approx 125.5 \text{ \AA}$  “вмещает” 51 углеродный гексагон и 50 гексагонов нитрида бора. Сверхрешетка биленты содержит 408 C-атомов и 200 пар BN-атомов. Из рис. 2f видно, что примерно половина гексагонов в сверхрешетке содержат атомы одного слоя над атомами другого в AA области, где эти ленты графена и нитрид бора могут быть частично “сварены” по краям.

Как можно сделать нанотверстия с замкнутыми краями в BN/G муаре, аналогичные отверстиям в биграфене [9]? Известно, что выжигание в графене нанотверстий фокусированным пучком электронов или действие наночастиц катализатора в высокотемпературном режиме [18] дает преимущественно гексагональную форму отверстия, а при малой интенсивности пучка могут быть удалены один или два атома, образуя вакансию. В слое нитрида бора электронным пучком “выедается” отверстие преимущественно треугольной формы [19]. Будем рассматривать отверстия подобных форм в BN/G бислое. Обычно в биграфене соединение краев отверстия идет по зигзагообразному краю [13]. Такая же связь осуществляется по границе присоединения графена к BN слою [15]. Подобные связи можно сформировать и при образовании тороидальной внутренней области отверстия из  $sp^2$ -гибридизованных B-, N- и C-атомов. Сначала будем рассматривать формирование “сварных” отверстий в AA области BN/G бислоя при трансформации небольших вакансий, а потом “треугольных” и “гексагональных” отверстий. Затем изучим структуру и свойства ряда BN/G сверхрешеток с подобными отверстиями.

**Формирование отверстий – общие положения.** Покажем схему формирования отверстий для муаровых структур с небольшим углом поворота  $0^\circ \leq \theta \leq 11^\circ$ . Для каждого выбранного угла муара  $\theta$  отверстие с замкнутыми зигзагообразными границами можно сформировать до некоторого предельного размера на ограниченной площади AA (или AB) области (рис. 1a), когда на краях отверстий перед ковалентным соединением атомы соответствующей пары близко расположены друг над другом (образуя края типа “зигзаг” в каждом слое).

Удалим пару C–N атомов, стоящих точно друг над другом в центре AA области в конфигурации (рис. 1b), что соответствует образованию в каждом монослое простой вакансии. Тогда три пары гранич-

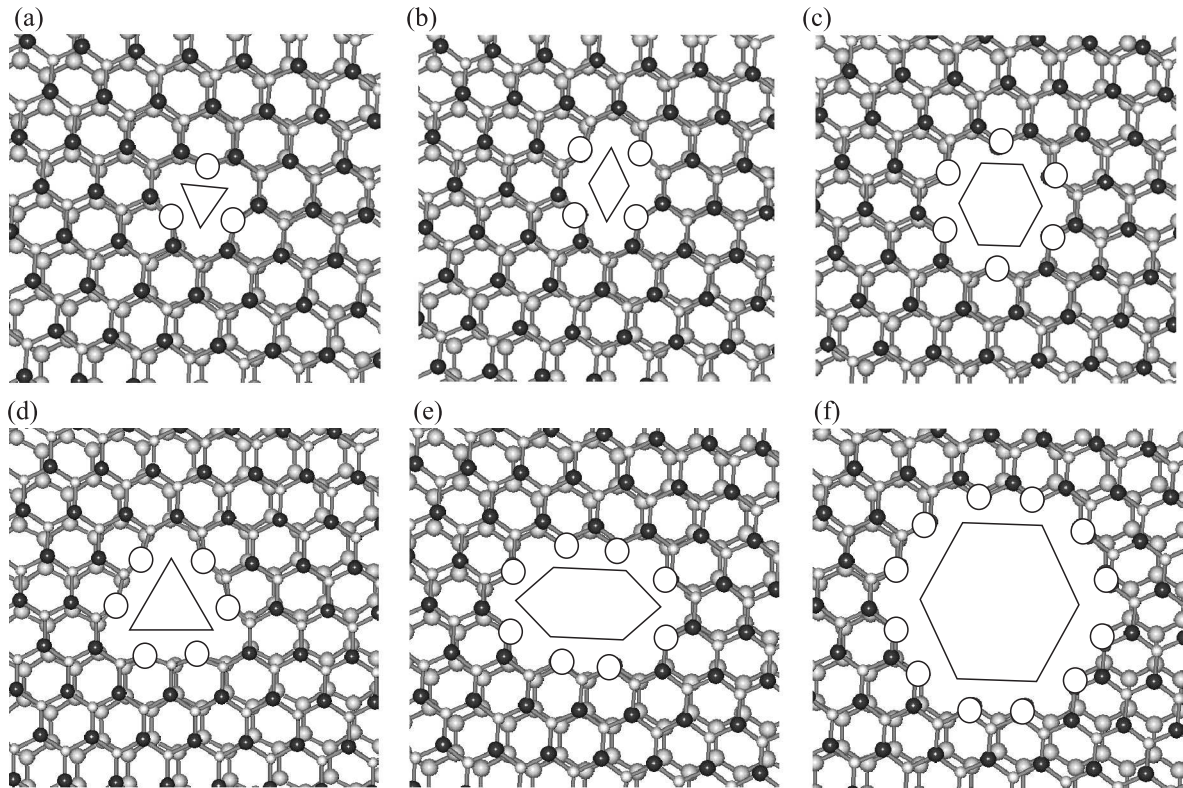


Рис. 2. Отверстия в АА области муара  $\theta = 4.1^\circ$ : “треугольник”  $AA_{t1}$  (а), “ромб”  $AA_{r1}$  (б), “гексагон”  $AA_{h1}$  (с), “треугольник”  $AA_{t2}$  (д), “вытянутый шестиугольник”  $AA_{r2,1}$  (е), “гексагон”  $AA_{h2}$  (ф), на основе которых при ковалентном соединении ближайших пар граничных атомов (отмечены кружками) образуются торообразные края дырок соответствующей формы

ных С–В атомов в образовавшейся вакансии при соединении образуют отверстие треугольной формы  $AA_{t1}$  со “стороной” R1 ( $Rq \approx qa_{C-C}\sqrt{3}$ ) и тремя топологическими дефектами в виде атомных декагонов – десятиугольных циклов (рис. 2а). Выбывание граничных пар в этом отверстии приведет к образованию следующего треугольного отверстия  $AA_{t2}$  со стороны R2. При каждом удалении  $(N(q+1) - N(q)) = 3q$  ( $q = 1, 2, \dots$ ) граничных атомных пар из предыдущего отверстия получаем следующее треугольное отверстие. Для муара  $\theta = 4.1^\circ$  предельно большое отверстие есть  $AA_{t4}$ -треугольник, вписанный в штриховой гексагон (рис. 1а) со стороны R4.

При первоначальном удалении двух пар стоящих один под другим атомов получим ромбическое отверстие  $AA_{r1}$  (сторона R1) с двумя декагонами и двумя октагонами в тороидальной ее части, в чем нетрудно убедиться, соединя соответствующие пары атомов на рис. 2б. При первоначальном удалении двух пар гексагональных циклов из шести С-, трех В- и трех N-атомов (рис. 2с) образуется гексагональное отверстие  $AA_{h1}$  со стороны R1. Если удаляем сразу 4 па-

ры соседних атомов, получаем “треугольник”  $AA_{t2}$  со стороны R2 (рис. 2д). “Вытянутый шестиугольник”  $AA_{r2,1}$  со сторонами R2 и R1 (рис. 2е) образуется при удалении 8-ми соседних пар атомов или 4-х пар из “ромба”  $AA_{r1}$ , а “гексагон”  $AA_{h2}$  – при удалении 12-ти пар (рис. 2ф). Отверстия симметричной формы больших размеров, которым соответствуют отверстия той же формы в каждом слое, можно образовать из перечисленных отверстий  $AA_i$ , удаляя из них граничные пары атомов. В “замкнутом” отверстии бислоя все химически активные С-, В- и N-атомы на его краях соединяются, образуя форму соединенных складок – форму внутренней части тора (ср. аналогичное образование отверстий в бислоином графене [9]). Из рис. 1ф видно, что можно “сваривать” и графеновые наноленты с BN нанолентами не только краями, но и создавая отверстия в области АА упаковки, где, например, на краях отверстия гексагональной формы (см. рис. 2с) химически активным атомам легко образовать замкнутый край.

Поскольку ранее уже изучались наносетки из многослоев графена [21] и нитрида бора [8] с формами



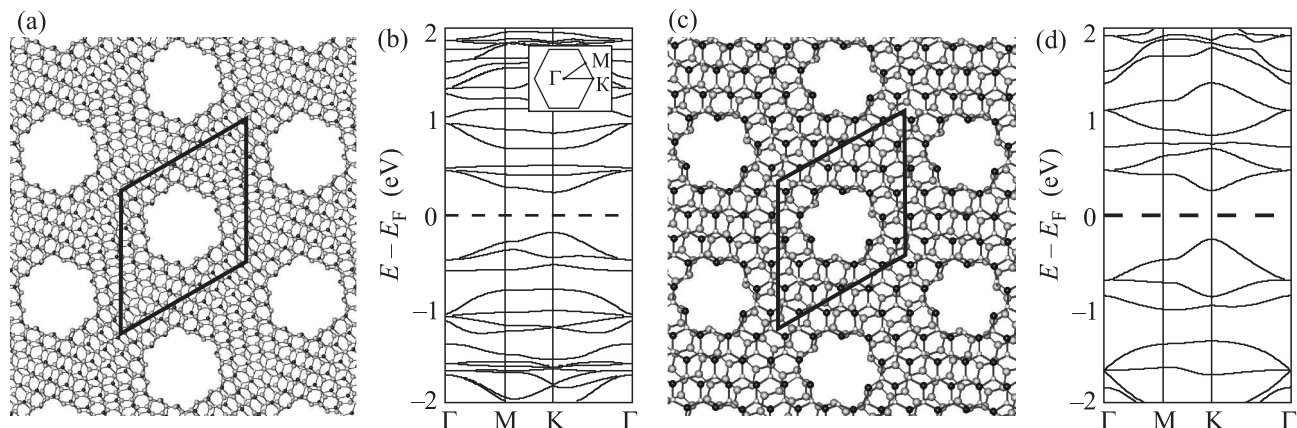


Рис. 3. Атомная и электронные структуры би-наносеток BN/G с гексагональными замкнутыми отверстиями: схема (a) и спектр (b) сетки  $NM_{G/BN}6R2$ , схема (a) и спектр (b) сетки  $NM_{G/BN}11R1$

отверстий, показанными на рис. 2, нам было важно сравнить их свойства со свойствами рассматриваемых BN/G наносеток с замкнутыми отверстиями. В монослоях на границе отверстий атомы химически активны. Их оборванные связи обычно нейтрализуются присоединением атомов водорода, которые при относительно небольших температурах десорбируются, разрушая край отверстия. Графеновая наносетка, ковалентно связанная с нитридной через замкнутые отверстия, более устойчива к внешним воздействиям. Перфорированные BN/G бислои с замкнутыми краями по границам отверстий могут обладать удивительными электронными свойствами, отличными от свойств монослойных. Приведем наиболее яркие примеры такого различия.

Так как в BN/G муаре с  $\theta = 0^\circ$  (для связей  $a_{C-C} = 1.42 \text{ \AA}$  и  $a_{B-N} = 1.45 \text{ \AA}$ ) количество атомов (8985) в суперячейке велико, то *ab-initio* расчет наносеток на его основе требует больших затрат времени. Поэтому мы рассмотрим свойства BN/G наносеток на основе муаров с  $\theta = 6.4^\circ$  и  $10.9^\circ$  с гексагональными отверстиями со стороной  $R1 \approx 2.5 \text{ \AA}$  (рис. 2c), которые довольно часто наблюдаются в графене [20].

В первом случае суперячейка BN/G муара  $\theta = 6.4^\circ$  с параметром  $L_6 = 20.72 \text{ \AA}$  состоит из 146-ти атомов углерода и 67-ми B-N атомных пар, а наносетки  $NM_{G/BN}6R1$  и  $NM_{G/BN}6R2$  (рис. 3a) с параметрами  $L'_6 = 20.67$  и  $L'_6 = 20.58 \text{ \AA}$  являются полупроводниками с запрещенной зоной 0.3 и 0.4 эВ, соответственно. Отделенные от сеток  $NM_{G/BN}6Rq$  плоские слои графена являются полуметаллическими графеновыми наносетками GNM с гексагональными дырками в сверхрешетке  $(8, -9; 9, -1)$  по классификации их суперячейки по параметрам единичных векторов  $e_1(m, n)$  и  $e_2(m', n')$  [21]. Полупроводниковый характер таких бислойных сеток связан с перестройкой

C-атомов и напряженностью их связей вокруг отверстия, что приводит к искривлению графенового слоя и локализации электронов вокруг отверстий (например, узкие минизоны вблизи  $E \approx \pm 0.6$  эВ в спектре – рис. 3b).

Во втором случае суперячейка BN/G муара с  $\theta = 10.9^\circ$  и параметром  $L_{11} = 12.97 \text{ \AA}$  состоит из 56-ти атомов углерода и 27-ми B-N атомных пар. Наносетка  $NM_{G/BN}11R1$  с параметром  $L'_{11} = 12.85 \text{ \AA}$  (50 C-атомов и 24 B-N пары в суперячейке) является полупроводником с запрещенной зоной 0.5 эВ (рис. 3c, d), поскольку графеновая составляющая имеет большее искажение, чем в случае  $NM_{G/BN}6R1$ . Таким образом, она по электронным свойствам отличается от соответствующей полуметаллической плоской сетки GNMR1 со сверхрешеткой  $(6, -2; 2, 4)$  [21]. Увеличение параметра Муара  $NM_{G/BN}$  с отверстиями одного типа и размера приводит к уменьшению щели в электронном спектре, т.к. искажение графитовой составляющей при этом уменьшается. Такой вывод коррелирует с тем же поведением щели в спектре AA би-графеновых наносеток с одинаковыми отверстиями при увеличении параметра их сверхрешетки. Вклад электронов BN составляющей би-сеток  $NM_{G/BN}$  проявляется в более разветвленной зонной структуре в спектрах выше и ниже 1 эВ уровня Ферми (например, рис. 3b, d). Видно, что искривление слоя BN и его взаимодействие с атомами углерода в области отверстия приводит к приближению BN ветвей к уровню Ферми на меньшее расстояние, чем величина запрещенной зоны плоского BN монослоя  $E_g = 4.6$  эВ. С энергетической точки зрения все рассмотренные BN/G наносетки являются стабильными.

**Механические свойства BN/G наносеток.** Выясним теперь роль “сваренных” отверстий в наносетках BN/G в изменении механических свойств

Таблица 1. Механические характеристики структур

Structure	Y, TPa		G, TPa	
	X	Y	X	Y
NM <sub>G</sub> /BN11AA <sub>t</sub> 1B	0.80	0.74	0.80	0.12
NM <sub>G</sub> /BN11AA <sub>t</sub> 1N	0.68	0.70	0.84	0.14
NM <sub>G</sub> /BN11AA <sub>h</sub> 1N	0.55	0.51	0.93	0.27
G layer	1.00	1.00	C <sub>66</sub> = 0.49 (graphite [23])	
BN layer	0.78 [22]	0.77 [22]	0.40 (BN nanotube) [24]	

относительно составляющих их монослоев на ранее рассмотренных примерах (рис. 2). Силы были приложены к выбранной для расчета прямоугольной ячейке BN/G сетки муара, содержащей отверстия R1 в AA областях, вдоль осей X и Y, направление которых показано на рис. 4а. Выбранные структуры под-

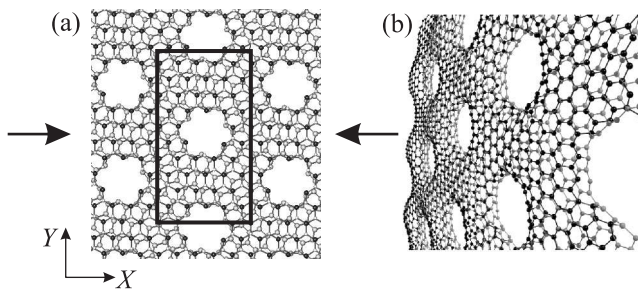


Рис. 4. (а) – Вид наносетки NM<sub>G</sub>/BN11R1 до приложения сдвигающих сил вдоль X-оси. (б) – Общий вид фрагмента деформированной структуры сетки NM<sub>G</sub>/BN6R2

вергалась механическому растяжению и сжатию по обеим осям.

Модуль Юнга рассчитывался по стандартной формуле:

$$Y = \frac{F \cdot L}{S \cdot \Delta L}, \quad F = 2 \frac{\partial E}{\partial L}.$$

Здесь  $\Delta L$  есть изменение длины ячейки  $L$ , вдоль которой прикладывается сила  $F$ ,  $E$  – энергия деформации,  $S = a \cdot b$  – площадь поперечного сечения, где  $a$  – ширина ячейки, а  $b$  – толщина структуры, которая есть сумма расстояний между слоями  $d \approx 3.4 \text{ \AA}$  и ван дер Ваальсова взаимодействия  $d_{vdW} \approx 3.3 \text{ \AA}$ . Расчет эффективного модуля сдвига  $G$  проводился по формуле, аналогичной для модуля  $Y$ , но силы прилагались к разным слоям в противоположных направлениях.

Значения модулей Юнга и эффективного сдвига наносеток на основе муара  $\theta = 10.9^\circ$  с различного типа отверстиями, но одинаковыми ячейками, приведены в табл. 1 для направлений X и Y. Просматривается их зависимость от размера отверстия при

его увеличении (уменьшении числа атомов в ячейке): значение  $Y$  модуля уменьшается, тогда как модуль сдвига растет (увеличивается жесткость структуры за счет большего числа “замыкающихся” пар C–B, C–N атомов на краях отверстий). Данные структуры, как и отдельный слой BN [22], обладают анизотропией: различие их модулей сдвига для направлений X, Y находятся примерно в том же интервале значений для BN слоя.

Для муаров с углами  $\theta = 11^\circ, 9^\circ$  и  $6^\circ$  с одинаковыми гексагональными отверстиями AA<sub>h1</sub> диаметром в 1 нм (рис. 2f) с ростом числа атомов в элементарной сверхячейке модуль Юнга растет от 0.5 до 1.0 ТПа, а модуль сдвига  $G_X$  ( $G_Y$ ) падает от 0.9 (0.3) до 0.7 (0.13) ТПа.

Полученные значения модулей дают основание полагать, что рассмотренные структуры будут обладать высокой прочностью, что делает данные структуры привлекательными в приложениях таких квази-2D полупроводниковых материалов.

**Выводы.** В работе рассмотрены сверхрешетки, построенные на основе двухслойной системы: лист графена – лист гексагонального нитрида бора, связанных между собой в местах формирования дырок за счет замыкания краев отверстий при ковалентном соединении C–B, C–N атомов на этих краях. Подобные соединения могут быть получены из молекулярно связанной BN/G системы путем вырезания отверстий, методами аналогичными описанным в работах [11, 13, 19]. Показано, что в наносетки с определенной конфигурацией муара, размерами и гексагональной формой отверстий обладают электронными и механическими свойствами, отличными от подобных характеристик составляющих их слоев. Наличие  $h$ -BN пьезоэлектрической составляющей говорит о том, что в рассмотренных BN/G сетках можно будет внешним электрическим полем управлять электронными свойствами графеновой составляющей за счет деформации BN составляющей. При этом эффект изменения формы отверстий может быть использован для управляемой сепарации молекул в таких наносетках. Кроме того, в АВ областях наносеток также

можно сформировать отверстия, например, симметричной “круглой” формы, аналогичные отверстиям в бислойном графене [25]. Можно ожидать, что присутствие таких отверстий в АВ областях также будет влиять на свойства наносеток BN/G. Более подробно данные эффекты будут рассмотрены авторами в последующих публикациях.

Таким образом, муаровые бислои *h*-BN-графен могут быть основой проектирования наноструктур со сложными замкнутыми краями отверстий для применения их в нанoeлектронных и иных наноразмерных устройствах.

Работа выполнена в рамках проекта РФФИ # 14-12-01217. Расчеты были проведены с использованием ресурсов суперкомпьютерного комплекса МГУ им. Ломоносова [26] и межведомственного суперкомпьютерного центра РАН.

1. A. Ferrari, F. Bonaccorso, V. Fal’ko et al. (Collaboration), *Nanoscale* **7**, 4598 (2015).
2. A. H. C. Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, and A. K. Geim, *Rev. Mod. Phys.* **81**, 109 (2009).
3. Q. Tang and Z. Zhou, *Progress in Materials Science* **58**, 1244 (2013).
4. Q. Li, M. Liu, Y. Zhang, and Z. Liu, *Small* **12**, 32 (2016).
5. T. G. Pedersen, C. Flindt, J. Pedersen, N. A. Mortensen, A.-P. Jauho, and K. Pedersen, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 136804 (2008).
6. M. Kim, N. S. Safron, E. Han, M. S. Arnold, and P. Gopalan, *Nano Lett.* **10**, 1125 (2010).
7. M. Corso, W. Auwarter, M. Muntwiler, A. Tamai, T. Greber, and J. Osterwalder, *Science* **303**, 217 (2004).
8. A. Zhang, H. F. Teoh, Z. Dai, Y. P. Feng, and C. Zhang, *App. Phys. Lett.* **98**, 023105 (2011).
9. L. A. Chernozatonskii, V. A. Demin, and A. A. Artyukh, *JETP Lett.* **99**, 309 (2014).
10. D. G. Kvashnin, P. Vancsó, L. Yu. Antipina, G. I. Mark, L. P. Biro, P. B. Sorokin, and L. A. Chernozatonskii, *Nano Research* **8**, 1250 (2014).
11. K. He, A. W. Robertson, C. Gong, C. S. Allen, Q. Xu, H. Zandbergen, J. C. Grossman, A. I. Kirkland, and J. H. Warner, *Nanoscale* **7**, 11602, (2015).
12. F. L. Shyu and M. F. Lin, *Physica E* **16**, 214 (2003).
13. Z. Liu, K. Suenaga, P. Harris, and S. Iijima, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 015501(4) (2009).
14. J. Y. Huang, F. Ding, B. I. Yakobson, P. Lu, L. Qi, and J. Li, *PNAS* **106**, 10103 (2009).
15. Z. Liu, L. Ma, G. Shi et al. (Collaboration), *Nature Nanotech.* **8**, 119 (2012).
16. M. Yankowitz, J. Xue, D. Cormode, J. D. Sanchez-Yamagishi, K. Watanabe, T. Taniguchi, P. Jarillo-Herrero, P. Jacquod, and B. J. LeRoy, *Nat. Phys.* **8**, 382 (2012).
17. J. M. Soler, E. Artacho, J. Gale, A. Garcia, J. Junquera, P. Ordejon, and D. Sanchez-Portal, *J. Physics: Cond. Matt.* **14**, 2745 (2002).
18. L. Biro, P. Nemes-Incze, and P. Lambin, *Nanoscale* **4**, 1824 (2012).
19. H. J. Park, G. H. Ryu, and Z. Lee, *Applied Microscopy* **45**, 107 (2015).
20. A. W. Robertson, G.-D. Lee, K. He, C. Gong, Q. Chen, E. Yoon, A. Kirkland, and J. H. Warner, *ACS Nano* **9**, 11599 (2015).
21. M. Dvorak, W. Oswald, and Z. Wu, *Sci. Rep.* **3**, 2289 (2013).
22. J. Wu, B. Wang, Y. Wie, R. Yang, and M. Dresselhaus, *Mater. Res. Lett.* **1**, 200 (2013).
23. A. Bosak, M. Krisch, M. Mohr, and J. Maultzsch, *Phys. Rev. B* **75**, 153408 (2007).
24. R. Chowdhury, C. Y. Wang, S. Adhikari, and F. Scarpa, *Nanotechnology* **21**, 365702 (2010).
25. L. A. Chernozatonskii, V. A. Demin, and Ph. Lambin, *Phys. Chem. Chem. Phys.* (submitted).
26. V. I. Voevodin, S. A. Zhumatiy, S. I. Sobolev, A. S. Antonov, P. A. Bryzgalov, D. A. Nikitenko, K. S. Stefanov, and V. V. Voevodin, *Open Systems J.* **7**, 36 (2012).