Письма в ЖЭТФ, том 121, вып. 9, с. 742 – 748

Зависимость частоты колебаний графенового листа от соотношения его сторон и количества дефектов вакансионного типа

З. А. Ахматов[+*×1)], *З. А. Ахматов*[+×]

[+]*Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение "Кабардино-Балкарский государственный университет им. Х. М. Бербекова", 360004 Нальчик, Россия*

[*]*Федеральное государственное бюджетное учреждение науки "Институт ядерных исследований РАН", 117312 Москва, Россия*

[×]*Федеральное государственное бюджетное научное учреждение "Федеральный научный центр "Кабардино-Балкарский научный центр РАН", 360000 Нальчик, Россия*

Поступила в редакцию 29 декабря 2024 г.
После переработки 28 марта 2025 г.
Принята к публикации 2 апреля 2025 г.

Методом молекулярной динамики исследовано колебательное поведение однослойного графенового листа. Получена зависимость частоты колебаний графенового листа от его размеров и концентрации дефектов вакансионного типа. Определено, что зависимость типа колебательной моды и их количества от соотношения сторон графенового листа сильно отличается для больших и малых образцов. Показано, что в узких графеновых листах (нанолентах) появляется рябь ("ripples"), приводящая к снижению частоты колебаний. В случае нанолент с соотношением сторон $x/y \approx 3.5$ и более, влияние ряби становится существенным и приводит не только к снижению частоты колебаний, но и к исчезновению основных колебательных мод.

DOI: 10.31857/S0370274X25050069, EDN: CIJAJY

Введение. До недавнего времени считалось, что однослойные графеновые листы не могут существовать в свободном состоянии. Возможность существования свободно стоящей двумерной углеродной структуры была продемонстрирована Геймом А.К. и Новоселовым К.С. в 2004 году [1]. С этого момента графен, благодаря своим исключительным физическим свойствам, привлек огромное внимание научного сообщества [2, 3]. Сейчас он является одним из перспективных материалов для применения в устройствах спинтроники [4–7], суперконденсаторах [8], быстродействующей и энергосберегающей электронике нового поколения [9, 10]. Значительный интерес вызывают колебательные свойства графенового листа. Высокая чувствительность и частота колебаний позволяют использовать графен в проектировании наномеханических резонаторов [11], тепловых осцилляторах [12, 13], датчиках массы [14] и наноэлектромеханических системах (NEMS), характеризующихся резонансными частотами, близкими к терагерцовому диапазону [15].

В синтезированном графеновом листе практически всегда существуют различные дефекты решетки, способствующие ухудшению механических и электронных свойств [16]. Поэтому понимание зависимости колебательных свойств свободно подвешенного графенового листа от его геометрических размеров и наличия дефектов является важной задачей при проектировании вышеупомянутых современных устройств.

Основной проблемой при анализе колебательного поведения графена является его малый размер [17, 18], так как проводить физические эксперименты в наномасштабе представляется достаточно сложной задачей. В связи с этим, аналитические и численные методы являются доступными альтернативами в исследовании механических (динамических) свойств наноразмерных структур, включая графен. Эти методы можно разделить на две категории: атомистические методы и теории механики сплошной среды. Атомистические методы включают моделирование молекулярной динамики (МД) [19–22], МД сильной связи [23] и теорию функционала плотности [24]. Некоторые зависящие от размера неклассические теории сплошной среды были изучены в области исследований графеновых листов, которые включают теорию градиента деформации [22], модифицированную теорию парных напряжений [25] и нелокальную теорию упругости [26]. Метод МД позволяет достаточно точно предсказать поведение на-

1)e-mail: ahmatov.z@bk.ru

ноструктур, но, к сожалению, требует больших вычислительных мощностей. Поэтому метод МД имеет недостатки, которые ограничивают его применение небольшими системами, обычно состоящими только из сотен атомов. Применение континуальных моделей, основанных на теориях пластин и оболочек смягчают трудности, связанные с вычислительными ресурсами. Континуальные модели относительно просты для понимания, хорошо известны, численные решения легко доступны в литературе и быстры. Однако, из-за того, что графен имеет малую толщину, он очень близок к атомному масштабу [27], поэтому теории континуума не всегда точно описывают колебательную динамику графена. Кроме того, в континуальных теориях дефекты в структуре графена трудно учитывать, что также приводит к неточным результатам [28].

Принимая во внимание преимущества и недостатки перечисленных методов, для исследования зависимости частоты колебаний графенового листа от соотношения его сторон и концентрации дефектов, мы применили метод МД с большим количеством частиц. Проведение МД моделирования с большим количеством частиц позволит с высокой точностью описать исследуемые системы.

Методика расчетов. МД расчеты были проведены с использованием программного пакета LAMMPS [29] на высокопроизводительном вычислительном кластере. Для описания взаимодействия между атомами углерода в решетке графена был применен потенциал LCBOP [30]. Максимальное количество атомов, используемых в моделировании достигало $N = 8000$ для малого образца и $N = 33600$ для образца большого размера. Температура системы контролировалась с помощью термостата Нозе–Хувера [31] (NVT-ансамбль) и имела значение $T = 300\,\text{K}$, временной шаг составлял $\tau = 0.1$ фс. В x и y направлении края графенового листа закреплены и применены периодические граничные условия. В направлении z графеновый лист не ограничивается никакими условиями, т.е. свободно подвешен.

Обсуждение результатов. Расчет зависимости частоты колебаний графенового листа от его размеров был начат с образца размером 10×11 нм, содержащим $N = 8000$ атомов углерода (рис. 1). Далее мы постепенно уменьшали размер листа в направлении y до тех пор, пока графеновый лист не достиг размера 10×4 нм.

МД-моделирование поведения закрепленного по краям графенового листа, приведенного на рис. 1, показало существование пяти основных колебательных мод (рис. 2).

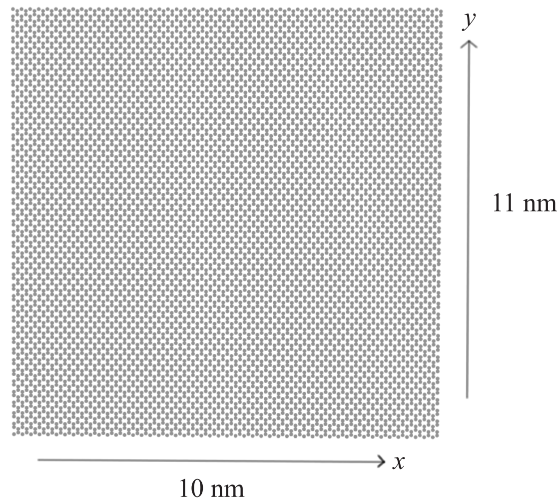

Рис. 1. Графеновый лист размерами 10×11 нм, содержащий $N = 8000$ атомов углерода

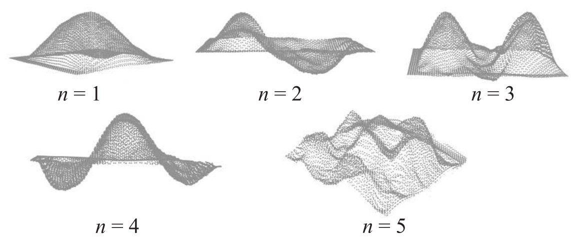

Рис. 2. Формы колебательных мод графенового листа размером 10×11 нм

Для построения частотных спектров графенового листа различных размеров был проведен спектральный анализ с применением преобразования Фурье к данным (спектры поперечных смещений атомов) МД-моделирования. Полученные спектры резонансных частот показаны на рис. 3.

Как можно увидеть из рис. 3, при уменьшении размера графенового листа частоты основных колебательных мод увеличиваются. Например, для листа размером 10×11 нм частота, соответствующая первой моде $n = 1$ принимает значение $\omega_1 = 0.184$ ТГц, тогда как для размера 10×6 нм частота составляет $\omega_1 = 0.37$ ТГц. Более подробная информация о зависимости частоты основных колебательных мод графенового листа от его размеров приводится в табл. 1.

Заметим, что с уменьшением ширины графенового листа в частотном спектре начинают преобладать высокочастотные моды (синяя кривая), тогда как вклад низкочастотных мод незначительный. Кроме того, уменьшение размера листа приводит к исчезновению некоторых колебательных мод, например, для листа размером 10×6 нм существуют лишь первая ($n = 1$) и вторая ($n = 2$) моды. Интересным полу-

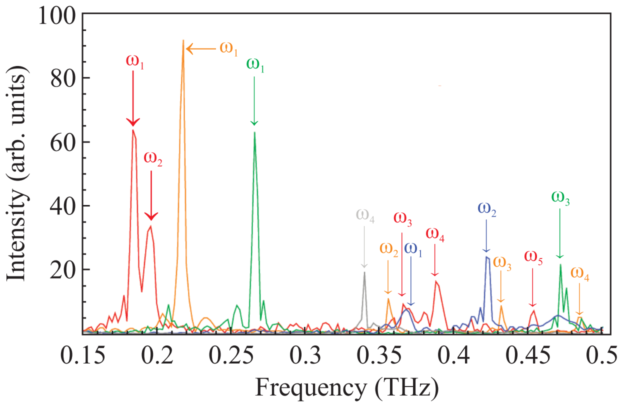

Рис. 3. (Цветной онлайн) Частотные спектры графеновых листов различных размеров. Индекс в ω_n определяет моду колебаний, цвет обозначения частоты соответствует образцу определенного размера: красный – 10×11 нм; оранжевый – 10×10 нм; зеленый – 10×8 нм; синий – 10×6 нм; серый – 10×4 нм

Таблица 1. Частоты колебаний графеновых листов (в ТГц) различной ширины y при фиксированной длине $=10$ нм

y, нм	ω_1	ω_2	ω_3	ω_4	ω_5
11	0.184	0.196	0.365	0.388	0.454
10	0.218	0.356	0.432	0.483	–
8	0.266	–	0.472	0.490	–
6	0.368	0.422	–	–	–
4	–	–	–	0.341	–

чился результат для листа размером 10×4 нм, для которого в спектре наблюдается лишь одна частота (серая кривая), соответствующая четвертой ($n=4$) колебательной моде. Причем значение частоты оказалось ниже, чем у образцов большего размера для этой же моды, тогда как нами ожидалась закономерность, наблюдаемая ранее для других образцов. Мы предположили, что, возможно, есть проблема в используемом потенциале взаимодействия, и повторили расчеты для данной конфигурации с применением других потенциалов, а именно REBO [32], Tersoff [33] и MEAM [34]. Однако полученные результаты не показали существенного различия от случая использования потенциала LCBOP. Детальная визуализация процесса колебаний графенового листа также подтвердила наличие лишь четвертой колебательной моды для данного размера. Мы считаем, что причиной такого поведения графена является его прямоугольная форма, т.е. соотношение сторон, так, например, для квадратного листа малого размера 4×4 нм расчеты показали существование только первой моды с частотой $\omega_1=0.39$ ТГц. Для подтверждения этого вывода и более глубокого понимания зависимости частоты колебаний от соотношения сторон, нами было проведено моделирование колебательной динамики большого графенового листа с размерами 28×28 нм, состоящего из $N=33600$ атомов. Как и в предыдущем случае, размер листа уменьшался в направлении y до 4 нм. Первое, что было замечено, это то, что в большом квадратном листе 28×28 нм после установления колебаний существует лишь одна мода $n=1$, тогда как для квадратного листа малого размера 10×10 нм имеют место четыре моды, как это было показано выше. По мере уменьшения листа в направлении y, когда образец принимает прямоугольную форму, в колебательном спектре присутствует только вторая мода $n=2$, что тоже не типично для листов малого размера прямоугольной формы. На рисунке 4 показаны частотные спектры,полученные для графеновых листов больших размеров.

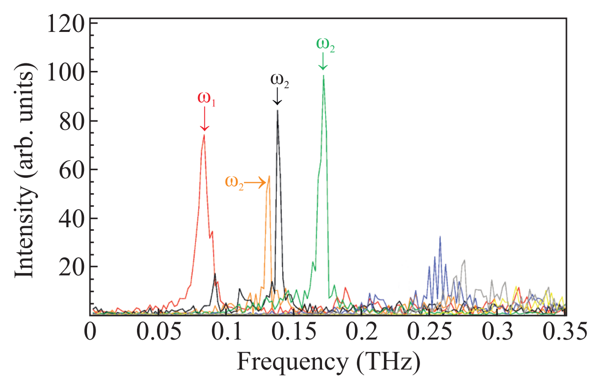

Рис. 4. (Цветной онлайн) Частотные спектры графеновых листов различных размеров. Индекс в ω_n определяет моду колебаний, цвет обозначения частоты соответствует образцу определенного размера: красный – 28×28 нм; оранжевый – 28×26 нм; черный – 28×23 нм; зеленый – 28×14 нм; синий – 28×8 нм; серый – 28×6 нм; желтый – 28×4 нм

В таблице 2 приведены значения частот колебаний графенового листа большого размера при уменьшении его ширины.

Таблица 2. Частоты колебаний графеновых листов (в ТГц) различной ширины y при фиксированной длине $x=28$ нм

y, нм	ω_1	ω_2	ω_3	ω_4	ω_5
28	0.085	–	–	–	–
26	–	0.132	–	–	–
23	–	0.138	–	–	–
14	–	0.172	–	–	–

При постепенном уменьшении ширины листа частота колебаний, соответствующая второй моде растет. Однако когда ширина листа становится равной $y = 8$ нм, интенсивность колебаний резко падает и пики, соответствующие определенной моде колебаний, размываются. Уменьшение ширины листа до $y = 6$ нм приводит к полному исчезновению колебательных мод. Визуализация процесса колебаний показала, что в узком графеновом листе наряду с основной модой колебаний появляется достаточно плотная рябь [35] (см. рис. 5). Здесь, наверное, следует пояснить, что подразумевается под плотной рябью. Для этого рассмотрим колебания графенового листа различных размеров, показанные на рис. 5. На рисунке 5d наряду с основной модой ($n = 2$) присутствует незначительная рябь в виде одной выпуклой вершины, тогда как на рис. 5c количество выпуклых вершин наряду со второй основной модой равно четырем. Таким образом, чем больше выпуклостей (вогнутостей) мы наблюдаем в графеновом листе наряду с основной колебательной модой, тем плотнее рябь. Может показаться, что колебательное поведение листа, соответствующее пятой моде на рис. 1 не отличается от результатов, приведенных на рис. 5. Однако рябь не является стационарным или строго периодическим явлением, и может как появляться, так и исчезать в различные моменты времени, тогда как колебания, соответствующие пятой моде на рис. 1 являются периодическими.

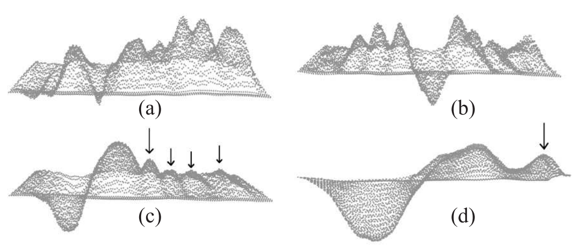

Рис. 5. Образование ряби в графеновом листе. Рисунки (a)–(c) соответствуют листу с соотношением сторон $x/y = 3.5$, (d) – соотношение сторон листа равно $x/y = 2.5$. Стрелки показывают на образование ряби

Появлению ряби способствует ассиметричное распределение длин связей, которое заставляет атомы углерода занимать пространство в третьем измерении, чтобы минимизировать свободную энергию [36]. Асимметрия длин связей в графене усиливается на краях образца и вблизи дефектов, тем самым увеличивая плотность ряби в этих областях. Принимая это во внимание, мы имеем, что асимметрия длин связей на краях графенового листа увеличивается по мере уменьшения его ширины.

Наличие ряби в графеновом листе является основной причиной снижения частоты колебаний при уменьшении ширины листа. Появление ряби, влияющей на частоту колебаний начинается при соотношении сторон листа $x/y \approx 2.5$, что мы наблюдаем для листа размером 10×4 нм. При соотношении сторон $x/y \approx 3.5$ и выше рябь становится настолько плотной, что перекрывает основные периодические моды и колебания графенового листа переходят в спонтанные. Поэтому учет соотношения сторон графенового листа при проектировании наномеханических устройств и т.д. является ключевой задачей. Из результатов моделирования можно сказать, что лучше всего для этих целей подходят образцы больших размеров, соотношение сторон которых лежит в интервале $1 \leq x/y \leq 2$. Стоит также отметить, что рябь на поверхности графена может влиять не только на динамические свойства, но и изменять его электронную структуру, создавать поляризованные лужи носителей, индуцировать псевдомагнитное поле в бислоях и изменять свойства поверхности [35].

Интересным представляется проведение количественного сравнения модели пластины с результатами МД-моделирования. Для модели пластины, предполагая синусоидальный временной отклик, имеет место следующее уравнение [37]

$$D\nabla^4\zeta(x,y) - \omega^2\rho_s\zeta(x,y) = N_x\frac{\partial^2\zeta(x,y)}{\partial x^2} + N_y\frac{\partial^2\zeta(x,y)}{\partial y^2}, \tag{1}$$

где $\rho_s = 2.27 \cdot 10^{-6}$ кг/м^2 – поверхностная плотность графена, D – изгибная жесткость,определяемая как [37–39]

$$D = \frac{Eh_g^3}{12(1-\mu^2)}, \tag{2}$$

где E – модуль Юнга, μ - коэффициент Пуассона, h_g – квивалентная толщина для графена [37], N_x и N_y – начальные продольные напряжения $N_{x,y} = Eh_g\varepsilon_{x,y}$, ε_x и ε_y – деформации по осям x и y соответственно, получаемые из МД-моделирования. Для нахождения частот по формуле (1) использовались значения констант $Eh_g = 245H/m$ и $\mu = 0.41$ [37].

Для частот колебаний прямоугольной графеновой мембраны со сторонами a и b, закрепленными по краям, имеет место соотношение

$$\omega_{mn} = \frac{\pi}{2}\left(\frac{m^2}{a^2} + \frac{n^2}{b^2}\right)\sqrt{\frac{D}{\rho_s h_g}} \times$$
$$\times \sqrt{1 + \frac{1}{\pi^2 D}\frac{N_x\left(\frac{m}{a}\right)^2 + N_y\left(\frac{n}{b}\right)^2}{\left[\left(\frac{m}{a}\right)^2 + \left(\frac{n}{b}\right)^2\right]^2}}, \tag{3}$$

где m и n – гармоники, определяемые целыми числами.

Сравнение частот колебаний графенового листа размером 10×10 нм, полученных методом МД и формулой (3) представлено в табл. 3.

Таблица 3. Частоты колебаний прямоугольной графеновой мембраны размером 10×10 нм, полученные методом МД и формулой (3)

n	m	ω_{MD}, ТГц	ω_{theor}, ТГц
1	1	0.218	0.209
1	2	0.356	0.331
1	3	0.432	0.451
1	4	0.483	0.582

Как видно из табл. 3, значения частот, полученные методом МД и расчетной формулой (3) хорошо согласуются для низких мод и начинают расходиться с увеличением колебательной моды. Для графенового листа размером 10×4 нм, в котором из-за наличия плотной ряби наблюдалось нарушение закономерности увеличения частоты при уменьшении размера листа, расчетная формула дает значение частоты $\omega_{\text{theor}} = 0.74$ ТГц. Напомним, что для данного случая результаты моделирования показали частоту $\omega_4 = 0.341$ ТГц. Поэтому для адекватного описания колебательного поведения графенового листа с определенным соотношением сторон в теоретических расчетах необходимо учитывать наличие ряби.

Рассмотрим теперь влияние дефектов вакансионного типа на колебательную динамику графенового листа. В качестве образца мы взяли лист размера 10×11 нм, исследованный нами ранее. Распределение вакансий для исследуемых листов показано на рис. 6.

На рисунке 7 показаны частотные спектры графенового листа, содержащего различное количество вакансий.

Как можно видеть из рис. 7, с увеличением числа вакансионных дефектов основные резонансные частоты сдвигаются в сторону меньших значений. Так, для листа с большим количеством дефектов $N_V = 648$ основная частота, соответствующая первой моде принимает значение $\omega_{1V} = 0.14$ ТГц, тогда как для бездефектной структуры данная частота равна $\omega_1 = 0.18$ ТГц. Значения частот колебаний графенового листа, содержащего различное количество вакансионных дефектов приведены в табл. 4.

Для более подробного описания влияния вакансионных дефектов на частоты колебаний графенового листа были проведены расчеты для образцов с различным соотношением сторон. Соотношение общего количества атомов N к числу вакансий N_V в образцах равнялось $N/N_V \approx 11.34$, что соответствовало

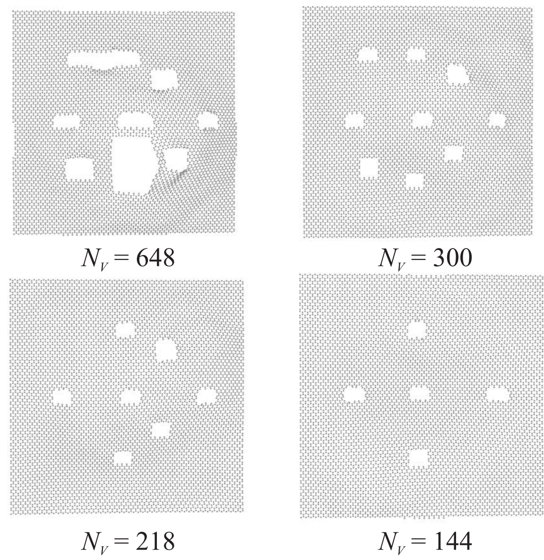

Рис. 6. Образцы графенового листа, содержащего различное количество дефектов вакансионного типа

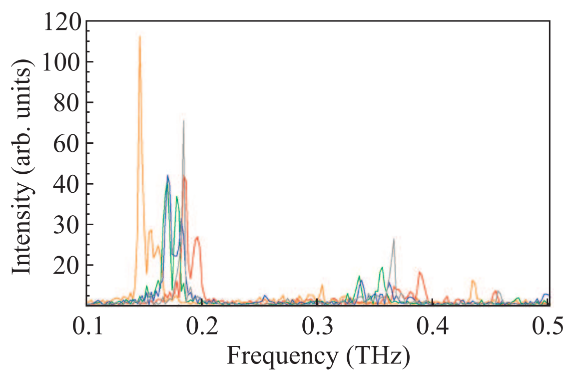

Рис. 7. (Цветной онлайн) Частотные спектры графеновых листов, содержащих различное количество дефектов вакансионного типа. Резонансные частоты, соответствующие бездефектному образцу изображены красной кривой. Цвет кривой соответствует образцу, содержащему определенное количество вакансий N_V: красная кривая – $N_V = 0$; оранжевая – $N_V = 648$; зеленая – $N_V = 300$; синяя – $N_V = 218$; серая – $N_V = 144$

случаю моделирования листа размером 10×11 нм с $N_V = 648$. Полученные значения частот представлены в табл. 5.

Таблица 4. Частоты колебаний графенового листа размером 10×11 нм (в ТГц), содержащего дефекты вакансионного типа

N_V	ω_{1V}	ω_{2V}	ω_{3V}	ω_{4V}	ω_{5V}
0	0.184	0.196	0.370	0.388	0.454
144	0.180	0.190	0.364	0.374	0.457
218	0.170	0.182	0.338	0.362	–
300	0.167	0.178	0.335	0.356	–
648	0.146	0.156	0.298	0.30	0.432

Таблица 5. Частоты колебаний дефектных графеновых листов (в ТГц) различной ширины y при фиксированной длине $x = 10$ нм и $N/N_V \approx 11.34$

y, нм	ω_{1V}	ω_{2V}	ω_{3V}	ω_{4V}	ω_{5V}
11	0.146	0.156	0.298	0.30	0.432
10	0.174	0.344	–	0.38	–
8	0.2	–	0.39	0.41	–
6	0.24	0.29	–	0.46	–
4	–	–	–	–	–

Из таблицы 5 видно, что влияние вакансионных дефектов на частоту колебаний листа становится значительнее по мере уменьшения его ширины. Значения частот для дефектного листа снижаются по сравнению с бездефектной структурой. Причем поведение, наблюдаемое для бездефектного листа размером 10×4 нм, при наличии вакансий обнаруживается уже при размерах 10×6 нм (т.е. $x/y \approx 1.66$), о чем говорит снижение значения частоты колебаний с 0.344 до 0.29 ТГц при уменьшении ширины листа с 10 до 6 нм. Достаточно высокая концентрация вакансий в узком графеновом листе ведет к исчезновению периодических мод и переходу колебаний в спонтанные. Полученные результаты подкрепляют утверждение о том, что асимметрия длин связей в графене, приводящая к появлению ряби и уменьшению значений частот колебаний, усиливается вблизи дефектов. Соответственно, чем выше концентрация дефектов, тем сильнее будет влияние ряби на колебательную динамику графенового листа.

Выводы. Используя программный пакет LAMMPS исследована зависимость частоты колебаний графенового листа от его размеров и концентрации дефектов вакансионного типа. Было изучено поведение как большого графенового листа размером 28×26 нм, состоящего из $N = 33600$ атомов углерода, так и малого листа размером 10×11 нм, где $N = 8000$ атомов. Для обоих листов была получена зависимость частоты колебаний от соотношения сторон листа. Выявлено, что в отличие от листа малого размера, где в колебательном спектре присутствуют пять мод, для листа большого размера имеет место наличие лишь одной моды – первой для случая квадратного листа ($x/y \approx 1$) и второй для прямоугольного образца ($x/y > 1$). Найдено соотношение сторон графенового листа при котором появляется рябь, влияющая на частоту колебаний образца. Так, при соотношении сторон листа $x/y \approx 2.5$ наблюдается снижение частоты колебаний, а для $x/y \approx 3.5$ и выше рябь становится настолько плотной, что перекрывает основные периодические моды и колебания переходят в спонтанные. Таким образом, учет соотношения сторон графенового листа при проектировании на его основе наномеханических устройств и т.д. является ключевой задачей. Как показали результаты исследования, для этих целей больше подходят образцы больших размеров, где имеет место одна колебательная мода и соотношение сторон которых лежит в интервале $1 \leq x/y \leq 2$. В работе также получена зависимость частоты колебаний графенового листа от количества дефектов вакансионного типа. Показано, что увеличение числа вакансий в решетке графена ведет к снижению значений частот основных мод колебаний. Наличие $N_V = 648$ вакансий в графеновом листе большого размера приводит к уменьшению значения частоты от $\omega_1 = 0.184$ ТГц до $\omega_{1V} = 0.146$ ТГц, по сравнению с бездефектной структурой.

Финансирование работы. Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект # 24-22-20102).

Конфликт интересов. Авторы данной работы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

1. K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva, and A. A. Firsov, Science **306**, 666 (2004).
2. R. Wang, X. Ren, Z. Yan, L. J. Jiang, W. E. I. Sha, and G. C. Shan, Front. Phys. **14**, 13603 (2019).
3. A. V. Rozhkov, A. O. Sboychakov, A. L. Rakhmanov, and F. Nori, Phys. Rep. **648**, 1 (2016).
4. J. Hu, Y. Han, X. Chi, G. Ji. Omar, M. Ezzi, J. Gou, X. Yu, R. Andrivo, K. Watanable, T. Taniguchi, A. Wee, Z. Qiao, and A. Ariando, Adv. Mater. **36**, 2305763 (2024).
5. M. Jugovac, I. Cojocariu, V. Feyer, S. Blugel, G. Bihlmayer, and P. Perna, Carbon **230**, 119666 (2024).
6. H. Yang, S. O. Valenzuela, M. Chshiev and et al. (Collaboration), Nature **606**, 663 (2022).
7. Z. A. Akhmatov, Carbon **230**, 119571 (2024).
8. S. Chen, W. Wang, X. Zhang, and X. Wang, Batteries **10**, 1 (2024).
9. A. K. Geim, Science **324**, 1530 (2009).
10. A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, and A. K. Geim, Rev. Mod. Phys. **81**, 109 (2009).
11. B. Arash, J. W. Jiang, and T. Rabczuk, Appl. Phys. Rev. **2**, 1 (2015).
12. F. Ebrahami, R. Selvamani, and M. Mahaveer Sree Jayan, Eur. Phys. J. Plus **136**, 1 (2021).
13. X. Pu, A. Palermo, and A. Marzani, Int. J. Eng. Sci. **168**, 103547 (2021).
14. R. W. Jiang, Z. B. Shen, and G. J. Tang, Acta Mech. **227**, 2899 (2016).

15. J.S. Bunch, A.M.V.D. Zande, S.S. Verbridge, I.W. Frank, D.N. Tanenbaum, J.M. Parpia, H.G. Craighead, and P.L. McEuen, Science **315**, 490 (2007).
16. G. Naumis, S. Barraza-Lopez, M. Oliva-Leyva, and H. Terrones, Rep. Prog. Phys. **80**, 1 (2017).
17. S. Stankovich, D.A. Dikin, G.H.B. Dommett, K.M. Kohlhaas, E.A. Stach, R.D. Piner, S.T. Nguyen, and R.S. Ruoff, Nature **442**, 282 (2006).
18. Z. Zhang, L. Lan, Y. Wang, and C. Wang, Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures **114**, 113580 (2019).
19. R. Nazemnezhad, M. Zare, S. Hosseini-Hashemi, H. Shokrollahi, Superlattices and Microstructures **98**, 228 (2016).
20. G. van Lier, C. van Alsenoy, V. van Doren, and P. Geerlings, Chem. Phys. Lett. **326**, 181 (2000).
21. F. Scarpa, S. Adhikari, and A. Srikantha Phani, Nanotechnology **20**, 065709 (2009).
22. M. Sadeghi and R. Naghdabadi, Nanotechnology **21**, 105705 (2010).
23. S.S. Gupta and R.C. Batra, J. Comput. Theor. Nanosci. **7**, 2151 (2010).
24. M. Neek-Amal and F.M. Peeters, Phys. Rev. B **81**, 235437 (2010).
25. A. Hemmasizadeh, M. Mahzoon, E. Hadi, and R. Khandan, Thin Solid Films **516**, 7636 (2008).
26. X.Q. He, S. Kitipornchai, and K.M. Liew, Nanotechnology **16**, 2086 (2005).
27. B. Sajadi, S. Wahls, Sv. Hemert, P. Belardinelli, P.G. Steeneken, and F. Alijani, J. Mech. Phys. Solids **122**, 161 (2019).
28. L. Chu, J. Shi, and E. Cursi, Nanomaterials **8**, 1 (2018).
29. A.P. Thompson, H.M. Aktulga, R. Berger, D.S. Bolintineanu, and W.M. Brown, Comput. Phys. Commun. **271**, 108171 (2022).
30. X.W. Zhou, D.K. Ward, and M.E. Foster, J. Comput. Chem. **36**, 1719 (2015).
31. W.G. Hoover, Phys. Rev. A **31**, 1695 (1985).
32. D.W. Brenner, O.A. Shenderova, J.A. Harrison, S.J. Stuart, B. Ni, and S.B. Sinnott, J. Phys.: Condens. Matter. **14**, 783 (2002).
33. J. Tersoff, Phys. Rev. B **37**, 6991 (1988).
34. S.A. Etesami and E. Asadi, J. Phys. Chem. Solids **112**, 61 (2018).
35. S. Deng and V. Berry, Mater. Today **19**, 4 (2016).
36. P. Xu, M. Neek-Amal, S.D. Barber, J.K. Schoelz, M.L. Ackerman, and P.M. Thibado, Nat. Commun. **5**, 3720 (2014).
37. L. Rumeng, W. Lifeng, and J. Jingnong, Mater. Res. Express **3**, 095601 (2016).
38. M. Shariati, S. Souq, and B. Azizi, Int. J. Mech. Sci. **228**, 107471 (2022).
39. J. Awrejcewicz, G. Kudra, and O. Mazur, Nonlinear Dyn. **105**, 2173 (2021).