Письма в ЖЭТФ, том 123, вып. 2, с. 120 – 126

Анизотропия электронной подвижности двумерных бифениленовых структур[1)]

В. Л. Катков[2)], *В. А. Осипов*

Лаборатория теоретической физики имени Н. Н. Боголюбова, Объединенный институт ядерных исследований, 141980 Дубна, Россия

Поступила в редакцию 30 октября 2025 г.
После переработки 20 ноября 2025 г.
Принята к публикации 21 ноября 2025 г.

Теоретически исследована электронная подвижность, ограниченная фононами, для недавно синтезированного аллотропа углерода — двумерного бифенилена. Проведен расчет квазиодномерных структур, соответствующих полученным в эксперименте. Обнаружено, что в них происходит линейный рост подвижности с увеличением ширины ленты. В двумерном бифенилене выявлена сильная анизотропия электронной проводимости и подвижности. А именно, в кристаллографическом направлении, соответствующем 1D структурам, величина подвижности составляет $102\,\text{см}^2/(\text{В с})$, в то время как в перпендикулярном направлении она на порядок выше. Вычисления были проведены с помощью метода неортогональной сильной связи.

DOI: 10.7868/S3034576626010165

Введение. Открытие графена и обнаружение в этом материале экстремально высокой (порядка $10^5\,\text{см}^2/(\text{В с})$) подвижности носителей заряда стимулировало поиск новых форм двумерного углерода. Однако, несмотря на большой набор предсказанных двумерных структур на основе углерода [1, 2], количество реально синтезированных материалов невелико. Это однослойный аморфный углерод [3], γ-графин (GY) [4–7], графидин (GDY) [8], графинилен [9] и бифенилен [10, 11]. Каждый из этих материалов обладает набором уникальных физических характеристик, что делает их привлекательными как с точки зрения фундаментальных исследований, так и перспективными для различных практических приложений, прежде всего в наноэлектронике (см., например, обзор [12]).

Одной из важнейших характеристик, определяющих пригодность материала в качестве основы для различных электронных и оптоэлектронных устройств, является подвижность носителей заряда. Среди множества факторов, влияющих на подвижность, рассеяние на фононах имеет фундаментальный и неустранимый характер, что является важной мотивацией к его исследованию [13]. Результаты вычисления подвижности носителей заряда, ограниченной фононами, для GY были опубликованы в работах [14, 15], где было использовано приближение, в котором время релаксации электрона вычисляется через мнимую часть собственно-энергетической функции Фана–Мигдала (self-energy relaxation time approximation, SERTA). Расчеты для GDY, были проделаны тем же методом [15]. Отметим, что ранее для нахождения подвижности в GDY был применен подход, основанный на оценке деформационного потенциала по смещению края зон при растягивании структуры [16]. Значения подвижности, вычисленные в этой работе, оказались на три порядка выше, чем подвижность, вычисленная с помощью SERTA, что указывает на ненадежность оценки времени свободного пробега в данном приближении.

Синтез квазиодномерных бифениленовых лент вызвал взрывной рост интереса к двумерному бифенилену, теоретическим исследованиям свойств которого уже посвящено около тысячи публикаций. Вместе с тем анализ подвижности носителей заряда до настоящего времени детально не проведен. Цель данной работы – рассчитать приводимость и подвижность электронов, обусловленную взаимодействием с фононами, в структурах на основе бифенилена и определить закономерности поведения этих величин с ростом ширины лент. Для оценки предела изменения этих величин был проведен расчет подвижности, ограниченной фононами, и проводимости в двумерной бифениленовой сетке.

Метод расчета. Ключевым моментом при вычислении проводимости и подвижности, обусловлен-

[1)]См. дополнительный материал к данной статье на сайте нашего журнала www.jetpletters.ru

[2)]e-mail: katkov@theor.jinr.ru

ных электрон-фононным взаимодействием, является корректный расчет времени свободного пробега электрона $\tau(T, E_F, \mathbf{k})$ (скорости рассеяния $1/\tau(T, E_F, \mathbf{k})$). Способ расчета данной величины всегда является компромиссным решением, при принятии которого необходимо разумно сопоставлять вычислительные затраты и точность получаемых результатов. Расчет времени свободного пробега через мнимую часть собственно-энергетической функции $\mathrm{Im}\Sigma = -\hbar/2\tau$, которая характеризует время жизни электрона на данном энергетическом уровне, т.е. использование подхода SERTA, считается достаточно надежным приближением [13].

Ожидается, что методы, связанные с использованием теории функционала плотности (DFT), наиболее точны, однако они становятся крайне затратными с увеличением числа атомов в элементарной ячейке. В случае квазиодномерных углеродных наноструктур (нанотрубки или наноленты), наблюдаемых в эксперименте размеров, элементарная ячейка содержит порядка 10^2 атомов. Поэтому для таких задач более целесообразно применять метод сильной связи, использованный, например, ранее для вычисления подвижности и электрон-фононного взаимодействия в различных углеродных нанотрубках [17, 18].

В настоящей работе мы использовали метод неортогональной сильной связи. Суть метода заключается в использовании неортогональных базисных волновых функций при решении уравнения Шредингера для кристалла, что позволяет явно учитывать перекрытие между атомными орбиталями. Это важно при анализе многих реальных систем, в том числе и структур с сильным электрон-фононным взаимодействием. В частности, именно этот метод лежит в основе подхода DFTB (density functional tight binding), который интегрирован в код DFTB+ [19]). Ранее с помощью данного подхода и метода замороженных фононов нами были получены температурные зависимости запрещенной зоны в обычных и допированных нанотрубках [20]. В качестве набора параметров сильной связи был выбран недавно предложенный PTBP [21] вместе с самосогласованным вычислением зарядов (SCC). Надо отметить, что тестовые расчеты с использованием набора pbc-0-3 и метода параметризации GFN1-xTB не привели к существенному изменению результатов. Фононные характеристики рассчитывались с помощью Phonopy [22–24], а время свободного пробега с помощью пакета DFTBephy [25], программной реализации подхода, изложенного ранее в [26], и включающего в себя приближение SERTA. При проведении транспортных расчетов мы всегда располагали уровень Ферми на дне зоны проводимости. Подробное описание DFTBephy дано в работах [15, 25]. Следует отметить, что ранее этот подход воспроизвел результаты DFT-расчетов для графена и GY. Нами была проведена адаптация данного метода к одномерным структурам [27]. В качестве тестовой задачи были воспроизведены некоторые результаты для нанотрубок из работы [18]. Детальное описание используемого метода и все параметры расчетов приведены в Дополнительных материалах.

Результаты и обсуждение. Модель лент, полученных в эксперименте [10], изображена на рис. 1. Наличие на краю атомов водорода и фтора важно,

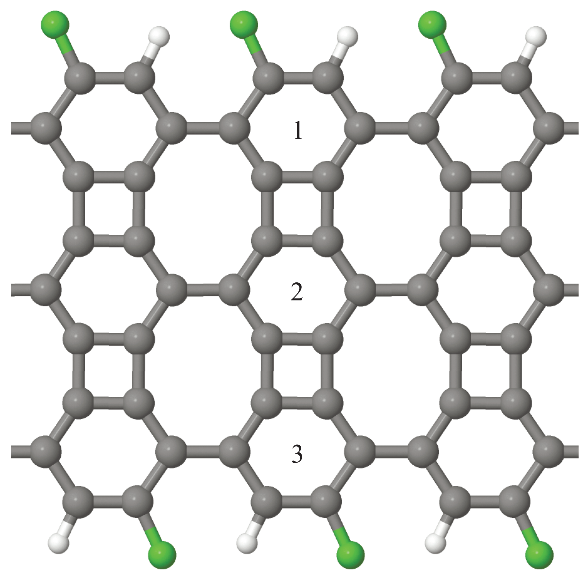

Рис. 1. (Цветной онлайн) Лента-3 – структура одной из лент, полученной в эксперименте [10]. Атомы фтора и водорода обозначены зеленым и белым цветом соответственно. Показаны три элементарные ячейки

так как является необходимым требованием синтеза снизу вверх и оказывает некоторое влияние на результаты расчетов запрещенной зоны. Мы будем характеризовать ленты количеством шестиугольников, расположенных в поперечном направлении. В частности, на рис. 1 изображена лента-3. В эксперименте [10] были синтезированы ленты 2-8. Запрещенная зона в таких структурах была измерена в эксперименте, а также посчитана методами DFT [10, 28]. Эти результаты, а также данные наших расчетов приведены на рис. 2. Как видно, расчеты методом DFT ожидаемо показывают более низкие значения запрещенных зон, и металлизация с ростом ширины лент также наступает быстрее. В DFTB-расчетах вплоть до ленты-15 металлизация не достигается,

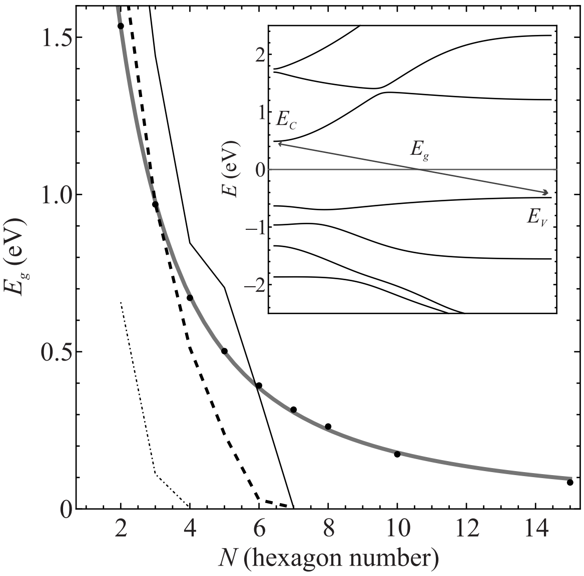

Рис. 2. Величина запрещенной зоны в зависимости от ширины ленты. Сплошная черная кривая – эксперимент [10]. Черные точки – наш расчет. Пунктирная – DFT-расчет из [10], штрих-пунктирная – DFT-расчет из [11]. Во вставке приведена зонная структура ленты-3

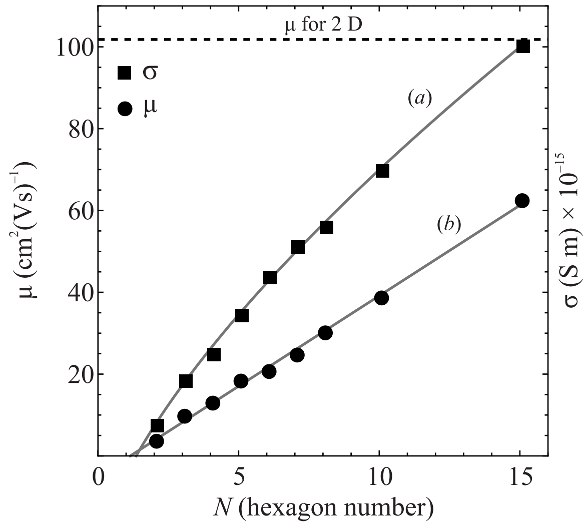

Рис. 3. Подвижность (a) и проводимость (b) нанолент в зависимости от их ширины при $T = 300$ К. Уровень Ферми смещен на дно зоны проводимости E_C. Пунктирной линией показана проводимость и подвижность для 2D бифенилена в кристаллографическом направлении, соответствующем лентам

а запрещенная зона уменьшается по закону $E_g = 7.48/(1.85 + N^{1.6})$ эВ, где N – число шестиугольников. Следует отметить, что в кресельных углеродных нанолентах и полупроводниковых нанотрубках запрещенная зона уменьшается обратно пропорционально диаметру и ширине соответственно.

Зонная структура ленты-3 показана на вставке рис. 2. Аналогичный непрямозонный вид имеют все структуры, кроме самой узкой ленты-2, где электронная структура становится прямозонной, что соответствует DFT-расчетам [29]. При увеличении ширины ленты минимум зоны проводимости, расположенный в точке Г, смещается вниз, а максимум валентной зоны, расположенный в точке Z, смещается вверх, что не приводит к пересечению зон. В результате при наступлении металлизации образуются электронный карман в Г-точке.

Результаты вычисления подвижности и проводимости показаны на рис. 3. Как видно, подвижность и одномерная проводимость растут с увеличением ширины ленты. В случае подвижности этот рост линеен (серая кривая на графике описывается функцией $\mu(N) = 4.4N - 5.1\,\text{см}^2\ (\text{В с})^{-1}$. Ранее было рассчитано, что для кресельных нанолент аналогичный рост происходит со степенью 2.65 [30]. В полупроводниковых углеродных нанотрубках подвижность растет примерно как диаметр в степени 2 (в [18] это значение найдено как 2.1, а в [31] как 2.26).

В нашем случае отклонение от линейного поведения подвижности ожидается, когда лента достигнет той ширины, при которой ветка, ближайшая к транспортной, приблизится на расстояние порядка энергетического окна $4k_BT \approx 0.1$ эВ, чтобы иметь возможность участвовать в транспорте по энергетическим соображениям. По оценкам, это соответствует лентам с $N \approx 23$ и шириной порядка 9 нм. Отметим, что при соответствующей величине периметра подвижность нанотрубок также начинает отличаться от простой зависимости $\propto d^{2.1}$ [18].

Пунктирной линией показано значение подвижности двумерного бифенилена для направления решетки, соответствующего структуре лент. К этой величине, очевидно, должна стремиться подвижность при N, стремящемся к бесконечности. Можно отметить, что значения подвижности невелики. Они примерно в 10 раз меньше подвижности, ограниченной фононами в подвешенных углеродных кресельных лентах, и соответствуют значениям в тех же лентах, размещенных на подложке из оксида гафния [30]. Проводимость ленты растет слегка нелинейно. Серая кривая на рис. 3 соответствует зависимости $\sigma(N) = (1.95N^{0.68} - 2.4) \times 10^{-14}$ См × м

Также мы исследовали проводимость и подвижность двумерной бифениленовой сетки. Кристаллическая решетка этой структуры представлена на рис. 4. Оптимизация решетки двумерного бифенилена с помощью DFTB и xTB при любых доступных

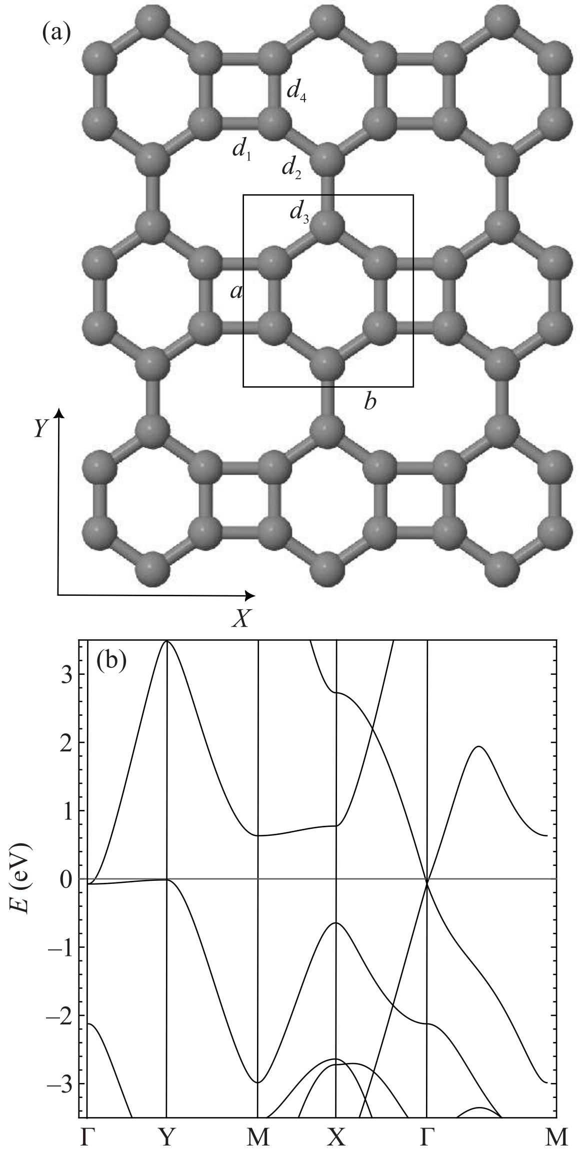

Рис. 4. (a) – Двумерная бифениленовая сетка. Элементарная ячейка выделена прямоугольником. Постоянные решетки a = 4.47 (4.52) Å, b = 3.82 (3.76) Å, межатомные расстояния $d_1 = 1.50$ (1.46) Å, $d_2 = 1.41$ (1.41) Å, $d_3 = 1.46$ (1.44) Å и $d_4 = 1.41$ Å. В скобках приведены аналогичные величины из работы [32]. (b) – Зонная структура бифенилена

наборах параметров приводит к элементарной ячейке, немного растянутой в направлении OX относительно ячеек, оптимизированных при помощи DFT расчетов [28, 32–36]. Зонная структура этого материала крайне чувствительна к механическому растяжению [32, 36]. Таким образом, результаты, полученные с помощью DFTB и DFT, имеют некоторые различия. Во-первых, согласно с DFT расчетами, в окрестности Γ-точки, выше уровня Ферми на 0.6 эВ находится так называемый конус Дирака второго типа [34], т.е. конус, имеющий наклон в k-пространстве. Во-вторых, присутствует электронный карман в районе M-точки. Однако указанные отличия исчезают, если с помощью DFT рассчитывать структуру, растянутую на 7.5 % (см. [32], дополнительные материалы, рис. 4).

DFTB расчеты показывают, что за проводимость отвечает анизотропный (см. рис. 4) конус Дирака, смещенный вниз относительно уровня Ферми на 0.11 эВ, т.е. роль носителей заряда играют электроны. Анизотропию можно оценить по величине эффективной массы электрона, которая в "быстром" направлении OX равна $m_{xx} = 0.022m_0$, и в "медленном" направлении OY – $m_{yy} = 0.18m_0$, где m_0 – масса свободного электрона. В работе [32] для растянутого на 10 % двумерного бифенилена аналогичные массы были оценены как $0.03m_0$ и $0.194m_0$ соответственно. Схожая по порядку величины анизотропия эффективных масс ранее была обнаружена в фосфорене (2D-черном фосфоре) [37].

Темп рассеяния вблизи Γ-точки изображен на рис. 5. Черная линия определяет поверхность Ферми и задается функцией $E(\mathbf{k}) = 0$. Видно, что для

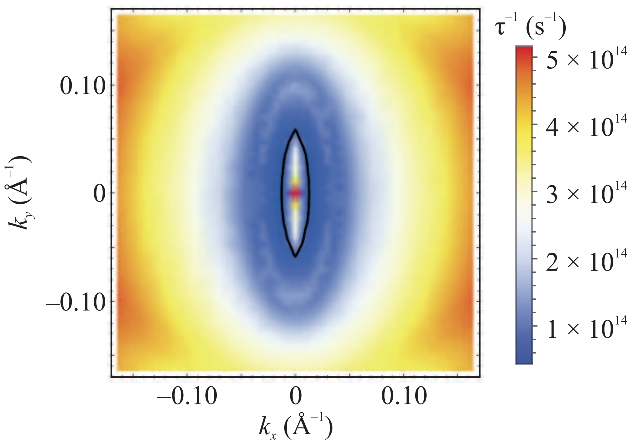

Рис. 5. (Цветной онлайн) Цветовая диаграмма скорости рассеяния $(1/\tau(\mathbf{k}))$. T = 300 K. Черная кривая – поверхность Ферми

электронов в окрестности линии Ферми темп рассеяния имеет минимальное значение ($\tau = 0.018$ пс для быстрого направления и $\tau = 0.013$ пс – для медленного) и соответствует рассеянию на акустических фононных ветвях. Удаление от этой линии приводит к заметному росту темпа рассеяния за счет включения оптических фононов. Такой механизм поведения данной величины детально описан в работе [38]. Следует отметить, что в отличие от ситуации со скоростями, анизотропия темпа электрон-фононного рассеяния практически отсутствует. На рисунке 6a по-

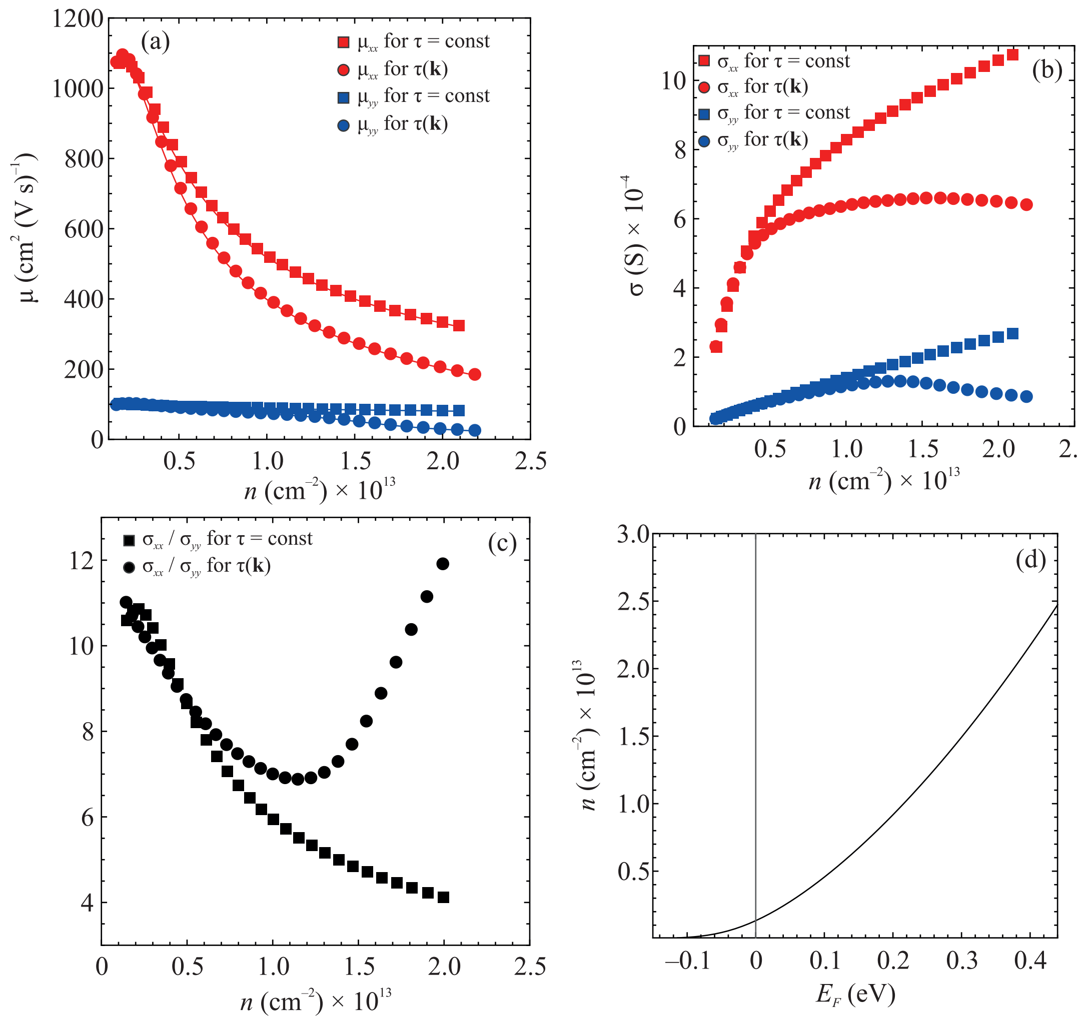

Рис. 6. (a) – (Цветной онлайн) Подвижность в зависимости от концентрации; (b) – проводимость в зависимости от концентрации; (c) – анизотропия проводимости; (d) – зависимость концентрации от положения уровня Ферми

казана подвижность как функция от концентрации допированных электронов (зависимость концентрации от смещения уровня Ферми относительно уровня электронейтральности приведена на рис. 6d). С целью оценить вклад зависимости времени свободного пробега от импульса приведены кривые, посчитанные при постоянном τ (0.018 и 0.013 пс для быстрого и медленного направлений соответственно) и при учете актуальных $\tau(\mathbf{k})$. Как видно, учет зависимости $\tau(\mathbf{k})$ приводит к более быстрому падению подвижности с ростом концентрации.

Подвижность при отсутствии электронного допирования для направления OX и направления OY отличается на порядок. Аналогичное поведение имеет проводимость, показанная на рис. 6b. Степень анизотропии в поведении проводимости и подвижности можно оценить по рис. 6c. Данная анизотропия целиком определяется отличием групповой скорости электрона в разных направлениях, поскольку темпы рассеяния при смене направления практически одинаковы. Рекордной анизотропией, связанной с кристаллической решеткой, как известно, обладает кристалл графита, где отношение сопротивлений вдоль и поперек графеновых слоев достигает 10^4. По всей видимости, максимальное полученное отношение ограниченных фононами подвижностей носителей заряда для двумерных структур, ранее было предсказано для черного фосфора [37, 39].

Заключение. Методом неортогональной сильной связи в приближении SERTA для бифениленовых лент и двумерного бифенилена рассчитаны подвижности и проводимости, обусловленные электрон-фононным рассеянием. Показано, что подвижность в бифениленовых лентах растет линейно с шириной ленты. Предел этого роста найден как подвижность в двумерном бифенилене и составляет

$\mu_{yy} = 102\,\text{см}^2(\text{В}\,\text{с})^{-1}$. Обнаружено, что в двумерном бифенилене имеет место сильная анизотропия поведения подвижности и проводимости, $\mu_{xx}/\mu_{yy} \sim 10$, сопоставимая с найденной ранее анизотропией этой величины в фосфорене. Учитывая высокую механическую прочность и гибкость бифенилена наряду с внутренней пористостью, обнаруженные нами транспортные характеристики делают данный материал весьма перспективным для различных практических приложений, включая сенсоры и КМОП структуры.

Финансирование работы. Данная работа финансировалась за счет средств бюджета Объединенного института ядерных исследований. Никаких дополнительных грантов на проведение или руководство данным конкретным исследованием получено не было.

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

---

1. N. Abramenko, M. Rozhkov, A. Kolesnikova, and A. Romanov, "Structure and properties of pseudographenes. Review", Reviews on advanced materials and technologies **2**, 9 (2020).
2. P. B. Sorokin and B. I. Yakobson, "Two-dimensional diamond—diamane: Current state and further prospects," Nano Lett. **21**, 5475 (2021).
3. C.-T. Toh, H. Zhang, J. Lin, A. S. Mayorov, Y.-P. Wang, C. M. Orofeo, D. B. Ferry, H. Andersen, N. Kakenov, Z. Guo, I. H. Abidi, H. Sims, K. Suenaga, S. T. Pantelides, and B. Özyilmaz, "Synthesis and properties of free-standing monolayer amorphous carbon", Nature **577**, 199 (2020).
4. Q. Li, Y. Li, Y. Chen, L. Wu, C. Yang, and X. Cui, "Synthesis of γ-graphyne by mechanochemistry and its electronic structure", Carbon **136**, 248 (2018).
5. M. Barua, A. Saraswat, and C. Rao, "A novel method for synthesis of γ-graphyne and their charge transfer properties", Carbon **200**, 247 (2022).
6. V. G. Desyatkin, W. B. Martin, A. E. Aliev, N. E. Chapman, A. F. Fonseca, D. S. Galv ao, E. R. Miller, K. H. Stone, Z. Wang, D. Zakhidov, F. T. Limpoco, S. R. Almahdali, S. M. Parker, R. H. Baughman, and V. O. Rodionov, "Scalable synthesis and characterization of multilayer γ-graphyne, new carbon crystals with a small direct band gap," J. Am. Chem. Soc. **144**, 17999 (2022).
7. T. Song, H. Liu, H. Zou, C. Wang, S. Shu, H. Dai, and L. Duan, "Metal-free wet chemistry for the fast gram-scale synthesis of γ-graphyne and its derivatives", Angewandte Chemie International Edition **63**(50), e202411228 (2024).
8. X. Gao, H. Liu, D. Wang, and J. Zhang, "Graphdiyne: synthesis, properties, and applications", Chem. Soc. Rev. **48**, 908 (2019).
9. Q.-S. Du, P.-D. Tang, H.-L. Huang, F.-L. Du, K. Huang, N.-Z. Xie, S.-Y. Long, Y.-M. Li, J.-S. Qiu, and R.-B. Huang, "A new type of two-dimensional carbon crystal prepared from 1,3,5-trihydroxybenzene", Sci. Rep. **7**, 40796 (2017).
10. Q. Fan, L. Yan, M. W. Tripp, O. Krejčí, S. Dimosthenous, S. R. Kachel, M. Chen, A. S. Foster, U. Koert, P. Liljeroth, and J. M. Gottfried, "Biphenylene network: A nonbenzenoid carbon allotrope", Science **372**(6544), 852 (2021).
11. Z. Zhao, G. Che, F. Li, Y. Fei, H. Luo, P. Lang, Q. Zeng, H. Bai, Y. Wang, H.-k. Mao, H. Zheng, and K. Li, "Synthesis of a biphenylene nanoribbon by compressing biphenylene under extreme conditions", Phys. Chem. Chem. Phys. **27**, 6072 (2025).
12. R. Paupitz, A. F. Fonseca, M. Bessa, G. S. Fabris, W. F. da Cunha, L. D. Machado, M. L. P. Junior, and L. A. Galv ao, "A concise review of recently synthesized 2d carbon allotropes: Amorphous carbon, graphynes, biphenylene and fullerene networks", arXiv preprint arXiv:2509.01877 (2025).
13. R. Claes, S. Poncé, G.-M. Rignanese, and G. Hautier, "Phonon-limited electronic transport through first principles", Nat. Rev. Phys. **7**(2), 73(2025).
14. J. Xi, D. Wang, Y. Yi, and Z. Shuai, "Electron-phonon couplings and carrier mobility in graphynes sheet calculated using the wannier-interpolation approach", J. Chem. Phys. **141**, 034704 (2014).
15. E. Unsal, A. Pecchia, A. Croy, and G. Cuniberti, "Charge carrier mobilities in γ-graphynes: a computational approach", Nanoscale **17**, 24591 (2025).
16. M. Long, L. Tang, D. Wang, Y. Li, and Z. Shuai, "Electronic structure and carrier mobility in graphdiyne sheet and nanoribbons: Theoretical predictions", ACS Nano **5**, 2593 (2011).
17. V. N. Popov and P. Lambin, "Intraband electron-phonon scattering in single-walled carbon nanotubes", Phys. Rev. B **74**, 075415 (2006).
18. J. Li, H. P. C. Miranda, Y.-M. Niquet, L. Genovese, I. Duchemin, L. Wirtz, and C. Delerue, "Phonon-limited carrier mobility and resistivity from carbon nanotubes to graphene", Phys. Rev. B **92**, 075414 (2015).
19. B. Hourahine, B. Aradi, V. Blum et al. (Collaboration), "Dftb+, a software package for efficient approximate density functional theory based atomistic simulations", J. Chem. Phys. **152**, 124101 (2020).
20. V. L. Katkov and V. A. Osipov, "Temperature dependence of the band gap of completely fluorinated/hydrogenated carbon nanotubes: The role of one-dimensional chains", JETP Lett. **118**, 754 (2023).
21. M. Cui, K. Reuter, and J. T. Margraf, "Obtaining robust density functional tight-binding parameters for solids across the periodic table", J. Chem. Theory Comput. **20**, 5276 (2024).

22. A. Togo and I. Tanaka, "First principles phonon calculations in materials science", Scr. Mater. **108**, 1 (2015).
23. A. Togo, L. Chaput, T. Tadano, and I. Tanaka, "Implementation strategies in phonopy and phono3py", J. Phys. Condens. Matter **35**(35), 353001 (2023).
24. A. Togo, "First-principles phonon calculations with phonopy and phono3py", J. Phys. Soc. Jpn. **92**(1), 012001 (2023).
25. A. Croy, E. Unsal, R. Biele, and A. Pecchia, "DftBephy: A DFTB-based approach for electron–phonon coupling calculations", J. Comput. Electron. **22**(5), 1231 (2023).
26. C. M. Varma, E. I. Blount, P. Vashishta, and W. Weber, "Electron-phonon interactions in transition metals", Phys. Rev. B **19**, 6130 (1979).
27. V. L. Katkov and V. A. Osipov, "Phonon-limited mobility in H/F-functionalized nanotubes with 1D π-chains", J. Appl. Phys. **138**, 214301 (2025).
28. W. Zhou, C. Luo, Y. Chao, S. Xiong, M. Long, and T. Chen, "First-principles study on the electronic properties of biphenylene, net-graphene, graphene+, and T-graphene based nanoribbons," RSC Adv. **14**, 8067 (2024).
29. H. Ge, G. Wang, and Y. Liao, "A theoretical investigation on the transport properties of armchair biphenylene nanoribbons", Chem. Phys. Lett. **648**, 97 (2016).
30. A. Betti, G. Fiori, and G. Iannaccone, "Strong mobility degradation in ideal graphene nanoribbons due to phonon scattering", Appl. Phys. Lett. **98**, 212111 (2011).
31. V. Perebeinos, J. Tersoff, and P. Avouris, "Electron-phonon interaction and transport in semiconducting carbon nanotubes", Phys. Rev. Lett. **94**, 086802 (2005).
32. G. O. Sargin, S. Demirci, K. Gong, and V. O. Özçelik, "Ultrathin carbon biphenylene network as an anisotropic thermoelectric material with high temperature stability under mechanical strain", Phys. Rev. Mater. **9**, 024003 (2025).
33. Y. Luo, C. Ren, Y. Xu, J. Yu, S. Wang, and M. Sun, "A first principles investigation on the structural, mechanical, electronic, and catalytic properties of biphenylene", Sci. Rep. **11**, 19008 (2021).
34. P.-F. Liu, J. Li, C. Zhang, X.-H. Tu, J. Zhang, P. Zhang, B.-T. Wang, and D. J. Singh, "Type-II dirac cones and electron-phonon interaction in monolayer biphenylene from first-principles calculations", Phys. Rev. B **104**, 235422 (2021).
35. A. Bafekry, M. Faraji, M. M. Fadlallah, H. R. Jappor, S. Karbasizadeh, M. Ghergherehchi, and D. Gogova, "Biphenylene monolayer as a two-dimensional nonbenzenoid carbon allotrope: a first-principles study", J. Phys. Condens. Matter **34**, 015001 (2021).
36. Y. Hou, K. Ren, Y. Wei, D. Yang, Z. Cui, and K. Wang, "Opening a band gap in biphenylene monolayer via strain: A first-principles study", Molecules **28**(10), 4178 (2023).
37. J. Qiao, X. Kong, Z.-X. Hu, F. Yang, and W. Ji, "High-mobility transport anisotropy and linear dichroism in few-layer black phosphorus", Nat. Commun. **5**, 4475 (2014).
38. C.-H. Park, F. Giustino, M. L. Cohen, and S. G. Louie, "Velocity renormalization and carrier lifetime in graphene from the electron-phonon interaction", Phys. Rev. Lett. **99**, 086804 (2007).
39. A. N. Rudenko and M. I. Katsnelson, "Anisotropic effects in two-dimensional materials", 2D Materials **11**, 042002 (2024).