

Формирование фаз алмаза и/или лонсдейлита из мультиграфена под действием наноиндентора – моделирование методом машинного обучения

С. В. Ерохин⁺, А. А. Ращупкин⁺, Л. А. Чернозатонский*, П. Б. Сорокин^{+×1)}

⁺Лаборатория цифрового материаловедения, Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования “Национальный исследовательский технологический университет “МИСИС”, 119049 Москва, Россия

*Институт биохимической физики РАН, 119334 Москва, Россия

[×]Государственный научный центр Российской Федерации

“Технологический институт сверхтвердых и новых углеродных материалов”, 108840 Троицк, Москва, Россия

Поступила в редакцию 10 апреля 2024 г.

После переработки 19 апреля 2024 г.

Принята к публикации 22 апреля 2024 г.

Работа посвящена теоретическому исследованию алмазообразования в многослойном графене под воздействием локального механического напряжения, вызванного индентированием пленки. Для описания данного эффекта был параметризован потенциал машинного обучения, основанный на представлении окружения атомов в виде тензоров моментов инерции. Полученные результаты демонстрируют, что атомная геометрия зарождающегося алмаза определяется как упаковкой графена, так и размером индентора, при этом в сформированной структуре наблюдается соединение кубического и гексагонального алмаза. Исследование также выявило существенно более низкое давление фазового перехода для графена с упаковкой AA' по сравнению с упаковкой ABC в пленках с числом слоев менее 100.

DOI: 10.31857/S1234567824110090, EDN: BOZGRY

Введение. Алмазообразование многослойного графена – интереснейшая тема в современном материаловедении. Соединение графеновых слоев приводит к образованию двумерного алмаза, также известного как диамант [1], который обладает любопытными свойствами и имеет разнообразные применения. Он может служить сверхтвердым покрытием с широкой оптической прозрачностью, основой для однофотонных эмиттеров, биологически активной подложкой, биосенсором и многими другими оптоэлектронными элементами [2–4]. Однако получение этого материала весьма нетривиально. Действительно, термодинамическая неустойчивость алмаза в полной мере проявляется на наноуровне, когда поверхностные эффекты нивелируют барьер графитизации [5]. Алмазные пленки, состоящие из нескольких графеновых слоев нестабильны, а давление фазового перехода (ФП) значительно увеличивается с уменьшением числа слоев, что наблюдалось в экспериментах [6] и предсказывалось в предыдущих исследованиях [5]. Стабилизировать алмазные пленки такой малой толщины возможно с помощью химически индуцированного фазового

перехода путем присоединения сторонних атомов на поверхность структуры [5, 7], о чем свидетельствуют многочисленные успешные эксперименты [8–13]. Однако если необходимо контролируемое локализованное образование алмаза в графене, следует использовать другие методы. Хотя облучение электронами или ионами [14, 15] позволяет соединять графеновые слои, наиболее удобным методом является непосредственное индентирование пленки.

Индентирование графена – это стандартная процедура при изучении поведения сверхтонких пленок под действием локального механического напряжения. Успешные экспериментальные наблюдения алмазообразования графена при индентировании [16, 17] дополнительно подтверждают необходимость тщательного теоретического анализа поведения графена под нагрузкой. Например, в работе [6] предполагается возможность образования бислойной пленки с гексагональной алмазной структурой при высоком давлении. Действительно, именно пленка лонсдейлита с поверхностью (10 $\bar{1}$ 0) имеет высокую стабильность для случая небольшого числа слоев [18]. Такая структура может быть кандидатом в качестве возможной двумерной алмазной структуры, формируемой под давлением. Таким образом, при

¹⁾e-mail: PBSorokin@misis.ru

вдавливании возможно формирование не только алмаза с кубической, но и с гексагональной структурой или их комбинаций. Для ответа на этот вопрос необходимо прямое моделирование нагружения графеновой пленки с разным числом слоев индентором с разным размером. Однако до недавнего времени проведение такого рода моделирования было невозможно.

Благодаря последним достижениям в области потенциалов машинного обучения (MLP) стало возможным более глубокое изучение механизма ФП на атомном уровне, что способствует фундаментальному пониманию этого процесса. Основная идея таких потенциалов заключается в отказе от физического анализа в пользу предсказания потенциальной энергии системы путем численной интерполяции между известными данными, полученными из квантово-механических расчетов (энергия, сила и т. д.) [19].

Для решения такой задачи могут подойти потенциалы машинного обучения, основанные на представлении окружения через тензоры моментов инерции (МТР) [20–22]. Преимуществами данного типа потенциалов являются скорость вычислений и общая форма представления атомарного окружения. Кроме того, данный тип потенциалов более эффективен с вычислительной точки зрения по сравнению с аналогами [23].

В данной работе мы использовали потенциалы машинного обучения для моделирования поведения многослойного графена под давлением, вызванным воздействием индентора. Было проведено исследование соединения графеновых слоев, приводящее к образованию кубической и гексагональной алмазных фаз. Также мы рассмотрели зависимость фазового перехода от количества слоев и размера индентора.

Вычислительный метод. Тренировка потенциала машинного обучения проводилась в пакете MLIP-2 [22], в котором реализован функционал для параметризации потенциалов МТР. Основная идея данных MLP заключается в аппроксимации квантово-механического взаимодействия между атомами специфическими базисными функциями. Данные функции представляют собой полиномы, основанные на тензорах “инерции” различного ранга, форма которых подробно изложена в работе [21]. Существует механическая интерпретация данных тензоров: тензор нулевого ранга показывает число атомов на расстоянии радиуса обрезания или меньше (это также можно воспринимать, как “массу” группы атомов), тензор первого ранга определяет центр масс таких атомов, второго ранга – тензор инерции, и т.д. Для решаемой задачи использовались шаблоны по-

тенциалов с рангом тензора момента инерции от 4 до 6 (уровень потенциала от 16 до 24). Наиболее успешный подготовленный потенциал был 24 уровня, с радиусом обрезания 5 Å и размером базиса, равным 8. Для лучшей тренировки потенциала на периодических структурах с различным числом атомов в ячейке использовался флаг “-weighting = structures”. Значение весов для сил было задано как 0.05 (по умолчанию 0.01), что позволило различить графеновые упаковки. Другие параметры тренировки, кроме указанных выше, были взяты по умолчанию. Верификация потенциала выполнялась в два этапа. Сначала проверялось, что ошибка в определении сил и энергий на валидационном наборе сравнима с ошибкой на тренировочном наборе. Затем тренировочный и валидационный набор объединялись, и на общем наборе потенциал улучшался повторной параметризацией. Далее полученный потенциал проверялся путем расчета параметров решетки и упругих характеристик исследуемых структур. Параметризованный потенциал использовался с помощью пакета LAMMPS [24].

Расчеты структур для тренировочного набора выполнены с помощью DFT [25, 26] в обобщенном градиентном приближении с помощью параметризации Пердю–Бурка–Эрнзергофа (PBE) [27], реализованном в пакете VASP [28–30]. Для описания взаимодействия между слоями графита в расчет были включены поправки Гримма D2 [31]. Энергия отсечки плоских волн была выбрана 400 эВ, в то время как зона Бриллюэна разбивалась на k -точки с помощью сетки Монкхорста–Пака с плотностью, соответствующей эмпирическому соотношению $N \cdot a = 25$, где a – параметр суперячейки, а N – число k -точек вдоль соответствующего направления [32]. Релаксация атомной структуры проводилась до тех пор, пока максимальная межатомная сила не становилась меньше 0.02 эВ/Å. Также с помощью VASP проводилась стандартная молекулярная динамика (NVT ансамбль) при температуре 300 К с термостатом Носе–Гувера. Шаг по времени составлял 0.5 фс, тогда как суммарное число шагов для структур с наибольшим числом атомов задавалось равным 2000.

Моделирование поведения структуры под действием индентора проводилось на примере пленки с числом слоев от 3 до 16 в квадратной области размером 100×100 Å² с учетом периодических граничных условий. Размер ящика для моделирования был выбран так, чтобы на краях ящика слои графена при максимальном вдавливании индентора смещались не более, чем на 2 % по оси Z . Такая поправка не вносила видимых изменений в полученные тренды, и результаты не зависели от размера ящика. Инденти-

рование проводилось сферическим геометрическим телом радиусом от 15 до 50 Å. Сдвиг сферического тела в ходе процесса индентирования осуществлялся по оси z с шагом 0.3 Å. Под пленкой была добавлена потенциальная стенка для предотвращения ее движения при индентировании (моделирование жесткой подложки). И сферический индентор, и стенка моделировались как отталкивающее силовое поле, которое действует на все атомы, пересекающие заданные поверхности, по закону $F = -K \cdot (r - R)^2$, где K – заданная силовая постоянная, r – расстояние от атома до центра индентора (или его координата Z), а R – радиус индентора (или координата Z стенки). Постоянная K была выбрана равной 0.6 эВ/Å³ для индентора и 1000 эВ/Å³ для стенки. На каждом шаге индентирования атомная геометрия системы подвергалась релаксации с использованием метода минимизации сопряженного градиента до достижения разницы энергии между шагами минимизации меньшей или равной 10⁻⁶ эВ/Å. Это обеспечивало стабильное и равновесное состояние системы во время всего процесса индентирования.

Визуализация структур при индентировании и анализ атомного окружения для отображения алмазной решетки проводились в пакете OVITO [33]. Распределение функции локализации электронов отображено с помощью пакета VESTA [34].

Результаты и их обсуждение. Набор данных, использованных для обучения МТР потенциала, представлен в виде карты на рис. 1а, сгенерированной на основании геометрического сходства структур с использованием подхода [35]. Общий набор включал в себя 417 структур разного размера, которые были либо построены, либо получены в результате молекулярной динамики с использованием метода теории функционала электронной плотности. В обучающий набор были включены различные пленки, а также объемные структуры кубического, гексагонального алмаза и графита (при нулевом и конечном давлении). Каждая точка на карте представляет структуру в наборе данных. Положение каждой точки определяется с помощью анализа изученных дескрипторов локальных атомных окружений всех атомов в структуре. Различные области на карте соответствуют разным типам структур, на что указывают визуализированные атомные конфигурации. Каждая область содержит структуры, имеющие схожую атомную геометрию, при этом число различных областей и содержащиеся в них структуры говорит о том, что в набор данных включены ключевые особенности графена и алмаза, находящихся как в свободном состоянии, так и под

давлением. Так, вверху карты рис. 1а находится набор структур многослойного графена, полученный из молекулярно-динамического моделирования методом DFT при температуре 300 К в течение нескольких пикосекунд. Каждые 50 фс структура добавлялась в набор. Справа на карте сгруппированы деформированные графитовые структуры, которые добавлялись в набор для описания растяжения связей. Внизу слева находятся пленки кубического и гексагонального алмаза с небольшим числом слоев (меньше 6). Внизу справа сгруппированы объемные кристаллы алмаза и пленки с большим числом слоев. В центре карты расположены пленки с частичным образованием связей и пленки, сжатые до высокого давления (40 ГПа).

Часть набора данных была зарезервирована для тестирования и не использовалась в процессе обучения для оценки качества тренировки потенциала: тренировка останавливалась, когда точность определения сил и энергий на тестовом наборе была близка к точности на тренировочном наборе. Как показано на графике регрессии на рис. 1б, MLP может воспроизводить силы, действующие на атомы, полученные с помощью DFT расчета, со среднеквадратичной ошибкой (RMSE) 130 мЭВ/Å. При этом точность определения энергии структур получается 7 мЭВ на атом. Эти значения сопоставимы со значениями других опубликованных потенциалов машинного обучения, основанных на том же подходе.

Также качество ML-потенциала было проверено на физических свойствах исследуемых материалов. Например, объемный модуль упругости графита и алмаза воспроизводится с достаточно высокой точностью: 437 ГПа для алмаза (442 ГПа – DFT расчет) и 318 ГПа для графита с упаковкой ABC (285 ГПа – DFT расчет) и 288 ГПа для графита с упаковкой AA'. Стоит отметить, что полученный потенциал действительно различает ABC и AA' упаковки и корректно предсказывает энергетическую выгодность ABC графена на 0.003 эВ/атом и показывает более низкое межслоевое расстояние 3.17 Å (3.29 для AA' графена) в соответствии с методом DFT-D2.

После подтверждения точности MLP метод был использован для моделирования поведения графена под давлением с помощью пакета LAMMPS.

Поскольку упаковка графена АВ может привести только к образованию бислойной кубической алмаза, а при большем числе слоев соединение в единую структуру невозможно, то мы изучили две другие низкоэнергетические упаковки графена, которые могут привести к алмазообразованию: ABC и AA', предполагая их спонтанное формирование в резуль-

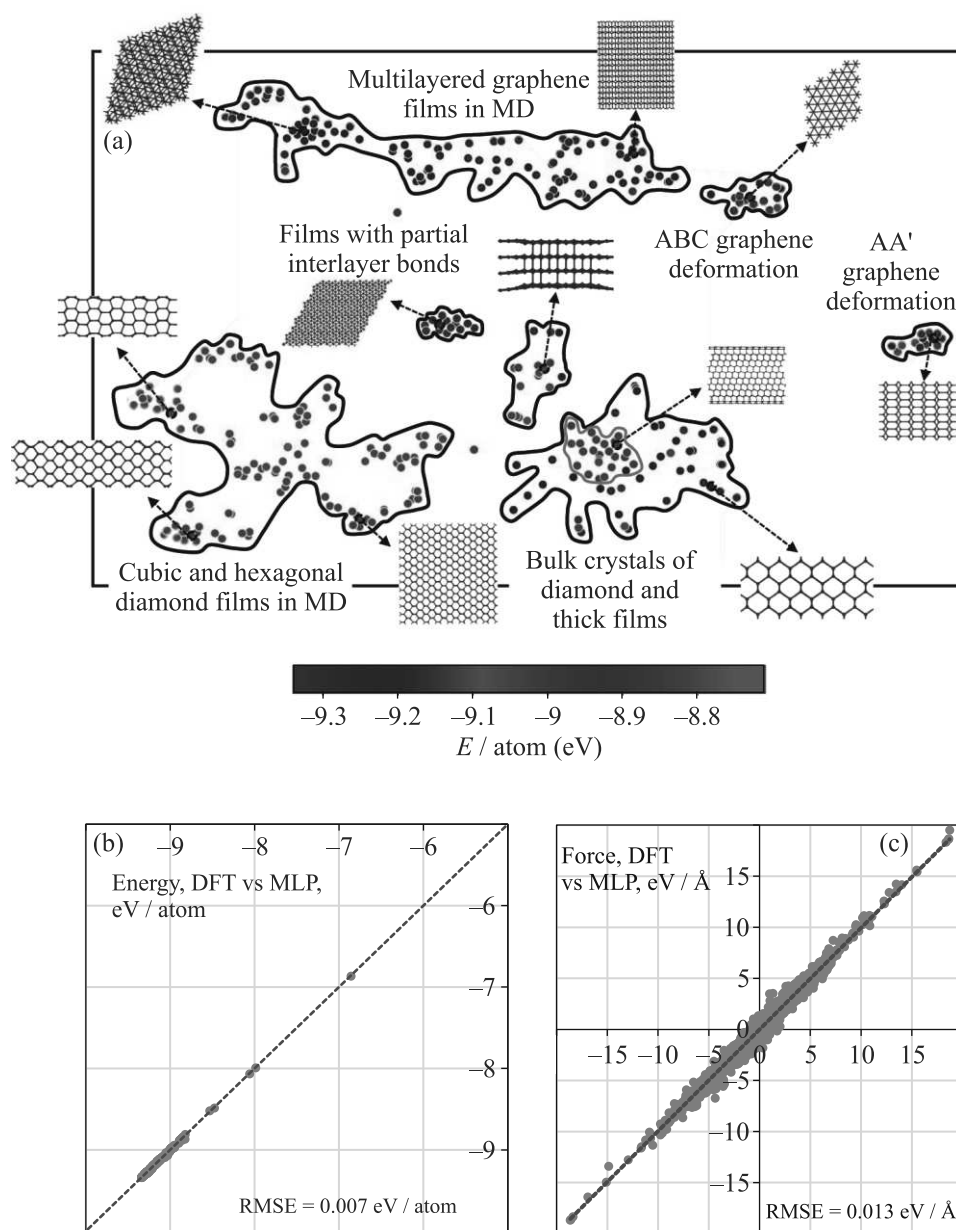


Рис. 1. (Цветной онлайн) (a) – Распределение данных для 417 структур, которые были использованы для обучения потенциала, полученное с помощью подхода [35]. Каждая цветная точка на распределении соответствует определенной атомной геометрии. Цвет отображает энергию структуры. Точки сгруппированы по математическим параметрам, которые вычисляются алгоритмом. Примеры структур представлены рядом с группами точек. (b), (c) – График сравнения энергий (b) и сил (c), полученных с помощью MLP и DFT расчетов, на тренировочном наборе

тате смещения слоев при индентировании. Мы обнаружили, что процесс соединения графена, начиная с четырех слоев, происходит похожим образом, а именно: их постепенное сближение, затем соединение в области непосредственно под индентором. При этом для более тонких пленок соединение слоев не наблюдалось в связи с высокой поверхностной энергией и

доминирующим эффектом графитизации, не допускающим алмазообразование [5]. Интересно, что если радиус индентора сопоставим или меньше толщины пленки, то алмазное ядро первоначально не проникает через всю ее толщину, см. рис. 2а. Дальнейшее перемещение индентора приводит к расширению алмазной области. Однако ее структура существен-

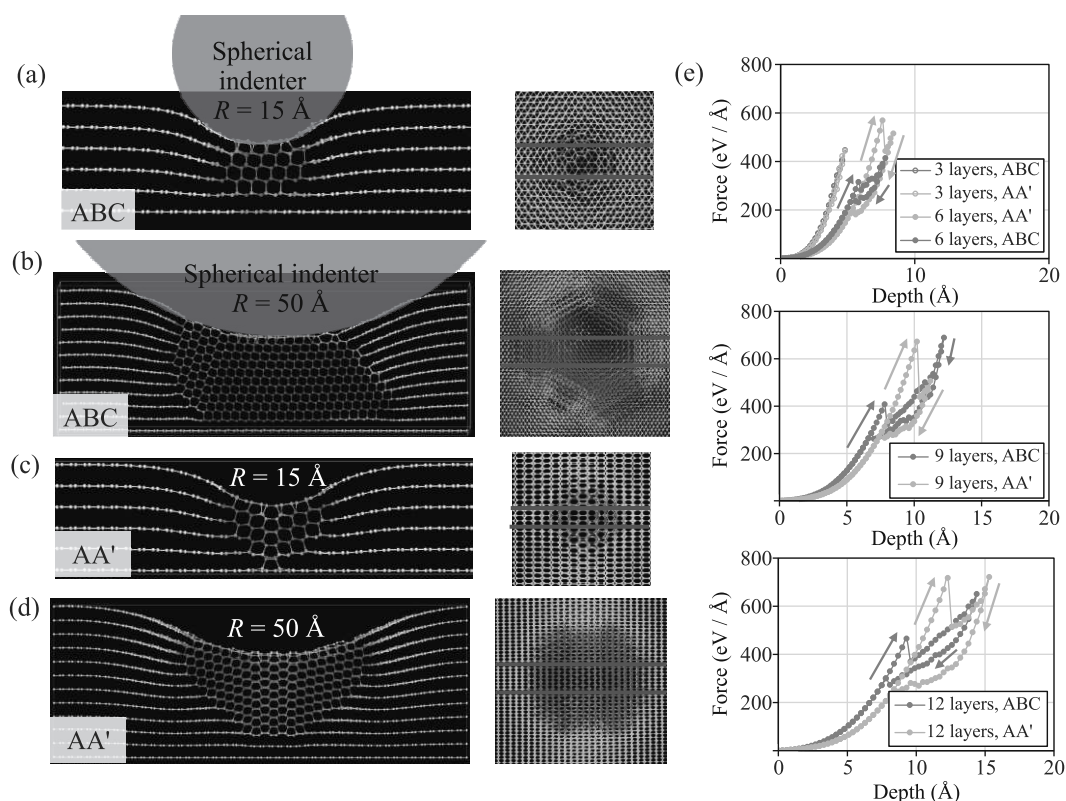


Рис. 2. (Цветной онлайн) (a)–(d) – Атомная структура многослойного графена при индентировании со сформированной алмазной областью. Сначала продемонстрирован срез структуры, вид сбоку. Затем вид пленки сверху, где красными линиями показана область среза. По атомному окружению проведен анализ структуры, и синим цветом выделены атомы, принадлежащие структуре кубического алмаза, а оранжевым – атомы гексагонального алмаза. (e) – Зависимость силы, действующей на индентор, от глубины индентирования и числа слоев для индентора с радиусом 50 Å. Зависимость построена как для нагружения графена индентором с появлением зародыша алмаза, так и для случая снятия нагрузки и трансформации зародыша обратно в слой графена (стрелочки указывают порядок построения зависимости)

но зависит от упаковки графена и размера индентора. Так, в случае графена с упаковкой ABC(AA') мы обнаружили, что первоначально ожидаемый кубический (гексагональный) алмаз (рис. 2a) окружен гексагональными (кубическими) областями алмаза (рис. 2b). Более того, алмазная/лонсдейлитовая область наследует симметрию упаковки графена. Так, в сформированной структуре кубического алмаза, окруженного тремя областями лонсдейлита прослеживается ось третьего порядка упаковки ABC. В случае упаковки AA' элемент ее зеркальной симметрии также прослеживается в образованном алмазе, который содержит две противоположно ориентированные области кубического алмаза, между которыми находится область лонсдейлита.

Также наблюдается заметная разница между поведением пленок с упаковкой ABC и AA' при воздействии индентора малого и большого радиуса. При

том что размер алмазного зародыша пропорционален радиусу индентора, в случае его образования из соединения графена с упаковкой AA' размер гексагонального алмаза при малом радиусе пренебрежимо мал и очень слабо зависит от глубины индентирования (рис. 2c). Таким образом, в случае упаковки AA' гексагональный алмаз служит лишь предшественником для формирования кубического алмаза с кристаллографической ориентацией [112] вдоль направления оси c. Наблюдение данного кристаллографического направления согласуется с результатами моделирования ФП графит-алмаз [36].

Зависимость силы, действующей на индентор, от глубины индентирования схожа для всех рассматриваемых структур (рис. 2e), а именно, ее монотонное увеличение до критического значения, после которого происходит соединение слоев, сопровождающееся резким падением силы. Дальнейшее проникновение

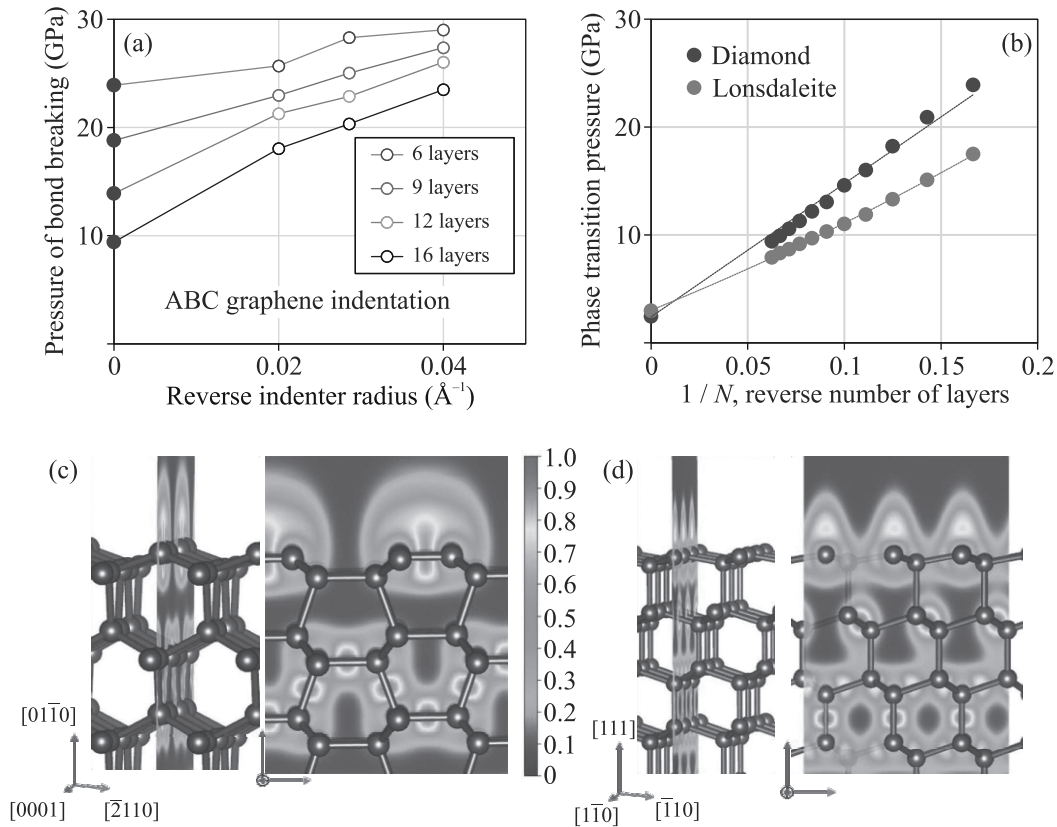


Рис. 3. (Цветной онлайн) (а) – Зависимость давления трансформации графен-алмаз для пленок с разным числом слоев в зависимости от обратного размера индентора для случая упаковки ABC. (б) – Зависимость давления фазового перехода для случая индентора бесконечного размера (плоскость) от числа слоев в графене. (с), (д) – На рисунке представлены структуры пленок гексагонального (с) и кубического (д) алмаза. Внизу слева от каждой структуры указана кристаллографическая ориентация тремя направлениями и индексами. Непериодическое направление направлено вверх. Через атомы с оборванными связями на поверхности пленки проведена плоскость, на которой цветом отображена функция локализации электронов, рассчитанная методом DFT

индентора увеличивает значение силы, а снятие нагрузки снижает давление до критического значения, после чего алмазные слои снова расщепляются на графен. При этом для случая 3-х слойной пленки скачок силы не происходит (рис. 2е) в связи с отсутствием соединения слоев графена. Заметим, что отсутствие алмазообразования нескольких слоев графена также подтверждалось экспериментально [6].

Было также оценено давление фазового перехода для образования зародыша алмазной фазы. Для этого необходимо было получить значение критической силы и контактную площадь при ФП. Контактная площадь оценивалась по формуле $\pi \cdot (2 \cdot h \cdot R - h^2)$, т.е. как сечение сферы на расстоянии $(R-h)$ от центра сферы, где R – радиус индентора, а h – глубина погружения в пленку. Также, поскольку при вдавлении индентора образование зародыша происходило с преодолением значительного потенциального барьера, то определение фазового перехода в этом

случае получалось с большой погрешностью. С другой стороны, разрыв зародыша при снятии нагрузки происходил практически безбарьерно, см. рис. 2е. Поэтому в качестве значения силы для расчета давления фазового перехода бралась точка, соответствующая разрыву зародыша алмаза. В связи с указанными приближениями определения критической силы и контактной площади значение давления фазового перехода можно трактовать только как оценочное.

На рисунке 3а показана зависимость величины критического давления от размера индентора (рис. 3а) для различного числа слоев в графене с упаковкой ABC. Как видно, зависимость монотонна и постепенно стремится к значению для индентора бесконечного размера, т.е. плоскости, действующей на графен (аналог алмазной наковальни). Для случая AA' упаковки монотонной зависимости давления разрыва не наблюдалось, что, вероятно, связано с существенными отличиями структуры

зародышей при малых и больших диаметрах индентора. Например, при малых радиусах индентора доля гексагонального алмаза по сравнению с кубическим была пренебрежимо мала (рис. 2с). Расчет давления фазового перехода при сжатии пленок ABC и AA' плоским индентором показан на рис. 3б. В этом случае давление ФП определяется точно по пересечению графиков зависимостей от давления энтальпии фазы пленки графена с упаковкой ABC или AA' и энтальпии фазы кубического или гексагонального алмаза, соответственно. Энтальпия в случае одноосного сжатия рассчитывалась как $H = E_p + PV = E_p + F \cdot h$, где E_p – потенциальная энергия структуры, полученная с помощью MLP, P – давление, V – объем элементарной ячейки структуры, F – сила, действующая на плоскость, которая давит на структуру, h – толщина пленки. Единственная неоднозначно определяемая величина в формуле – толщина h . Толщина рассчитывалась как разница средней координаты атомов верхнего и нижнего слоя структуры ($Z_{\max} - Z_{\min}$) плюс среднее расстояние между слоями в пленке, т.е. $h = (Z_{\max} - Z_{\min}) \frac{N}{(N-1)}$, где N – число слоев в пленке.

Отметим, что давление фазового перехода лонсдейлита с упаковкой AA' во всех рассмотренных пленках заметно меньше, чем в случае упаковки ABC. Для объяснения причины более низкого давления перехода в пленки с лонсдейлитовой структурой была построена функция электронной локализации с помощью метода DFT (рис. 3с, d).

Поскольку на поверхности алмаза имеются обрыванные связи, то энергия поверхности оказывается невыгодной по сравнению с поверхностью многослойного графена. Однако, как видно из рис. 3с, на поверхности лонсдейлита (01 $\bar{1}$ 0) электроны перераспределяются, тем самым понижая энергию поверхности, тогда как на поверхности кубического алмаза (111) такое перераспределение затруднено из-за окружения. В результате расчеты DFT показывают значения поверхностной энергии для кубического алмаза 0.39 эВ/Å² и гексагонального алмаза 0.19 эВ/Å², что и приводит к давлению ФП в случае лонсдейлита ниже, чем в случае алмаза. При этом для объемных кристаллов давление ФП кубического алмаза оказывается меньше (2.4 ГПа для кубического алмаза и 2.9 для лонсдейлита). Таким образом, существует предельное число слоев (~100 слоев из рис. 3б) после которого при меньшем давлении формируется кубический алмаз.

Заключение. Представленная работа является первым опытом моделирования процесса алмазооб-

разования многослойного графена, индуцированное локальным механическим напряжением, вызванным процессом индентирования. Для решения данной задачи взаимодействие между атомами описывалось с помощью потенциалов машинного обучения, основанных на представлении атомного окружения через тензоры моментов инерции.

Непосредственное моделирование индентирования позволило изучить процессы, происходящие в многослойном графене под высоким давлением. Так, показано, что независимо от типа упаковки графена первоначальное алмазное ядро формируется у индентора и не проникает на всю глубину пленки. При этом структура алмазного зародыша демонстрирует высокую чувствительность к типу упаковки и размеру индентора. В работе были изучены две низкоэнергетические упаковки графена, которые могут привести к образованию алмаза: ABC и AA', предполагая их спонтанное образование в результате смещения слоев при индентировании. В случае упаковки ABC изначально образуется зародыш кубического алмаза с осью вращения третьего порядка, окруженный областями гексагонального алмаза (лонсдейлита). При дальнейшем погружении индентора плавно увеличиваются размеры и кубического алмаза, и лонсдейлита. Для упаковки AA' характерно другое поведение. Сначала появляется прослойка гексагонального алмаза с зеркальной симметрией, вокруг которой образуются области кубического алмаза. С погружением индентора толщина прослойки лонсдейлита не меняется, тогда как доля кубического алмаза существенно возрастает. При малых размерах индентора гексагональный алмаз появляется в виде дефекта дублирования между областями кубического алмаза, т.е. является предшественником для роста фазы кубического алмаза. Еще одним важным результатом является существенно более низкое давление фазового перехода многослойного графена с упаковкой AA' в лонсдейлит по сравнению с ABC многослойным графеном в кубический алмаз для тонких пленок в случае индентора бесконечного размера (плоскости). *Ab initio* анализ электронной плотности поверхности лонсдейлита показал, что это связано с перераспределением электронов, приводящим к понижению поверхностной энергии гексагонального алмаза по сравнению с кубическим.

Отметим, что в эксперименте многослойный графен неоднократно подвергался локальному продавливаю путем индентирования [16, 17]. Успешные результаты таких экспериментов позволили наблюдать алмазообразование в бислойном графене (что, вероятно, связано с химической связью графена с

индентором, т.е. в результате химически индуцированного фазового перехода). Кроме того, сейчас существуют методы, позволяющие измерять спектры комбинационного рассеяния в процессе индентирования поверхности с помощью оптически прозрачного индентора-объектива [37]. Спектры кубического и гексагонального алмаза различимы [38], так образцы смешанных фаз лонсдейлита и алмаза демонстрируют сдвиг общего широкого пика с 1332 см^{-1} до более низких значений (до 1320 см^{-1}). Таким образом, можно предположить возможность экспериментальной проверки наших предсказаний, на которую мы надеемся в ближайшем будущем.

Финансирование работы. Работа финансировалась Российским научным фондом в рамках проекта # 22-72-00138. Тренировка потенциала машинного обучения проводилась на Вычислительном центре Дальневосточного отделения Российской академии наук. Расчеты теорией функционала плотности проводились на суперкомпьютерном кластере, предоставленном лабораторией “Моделирования и разработки новых материалов” Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования “Национальный исследовательский технологический университет “МИСИС”, и межведомственном суперкомпьютерном центре Российской академии наук.

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

1. Л. А. Чернозатонский, П. Б. Сорокин, А. Г. Квашнин, Д. Г. Квашнин, Письма в ЖЭТФ **90**, 144 (2009).
2. L. A. Chernozatonskii, V. A. Demin, and D. G. Kvashnin, Journal of Carbon Research **C 7**, 17 (2021).
3. P. B. Sorokin and B. I. Yakobson, Nano Lett. **21**, 5475 (2021).
4. F. Lavini, M. Rejhon, and E. Riedo, Nat. Rev. Mater. **7**, 10 (2022).
5. A. G. Kvashnin, L. A. Chernozatonskii, B. I. Yakobson, and P. B. Sorokin, Nano Lett. **14**, 676 (2014).
6. F. Ke, L. Zhang, Y. Chen, K. Yin, C. Wang, Y. K. Tzeng, Y. Lin, H. Dong, Z. Liu, J. S. Tse, W. L. Mao, J. Wu, and B. Chen, Nano Lett. **20**, 5916 (2020).
7. S. V. Erohin, Q. Ruan, P. B. Sorokin, and B. I. Yakobson, Small **16**, 2004782 (2020).
8. P. V. Bakharev, M. Huang, M. Saxena, S. W. Lee, S. H. Joo, S. O. Park, J. Dong, D. C. Camacho-Mojica, S. Jin, Y. Kwon, M. Biswal, F. Ding, S. K. Kwak, Z. Lee, and R. S. Ruoff, Nat. Nanotechnol. **15**, 59 (2019).
9. J. Son, H. Ryu, J. Kwon, S. Huang, J. Yu, J. Xu, K. Watanabe, T. Taniguchi, E. Ji, S. Lee, Y. Shin, J. H. Kim, K. Kim, A. M. Zande, and G.-H. Lee, Nano Lett. **21**, 891 (2021).
10. X. Chen, M. Dubois, S. Radescu, A. Rawal, and Ch. Zhao, Carbon **175**, 124 (2021).
11. F. Piazza, K. Cruz, M. Monthieux, P. Puech, and I. Gerber, Carbon **169**, 129 (2020).
12. F. Piazza, M. Monthieux, P. Puech, and I. C. Gerber, Carbon **156**, 234 (2020).
13. F. Piazza, K. Gough, M. Monthieux, P. Puech, I. Gerber, R. Wiens, G. Paredes, and C. Ozoria, Carbon **145**, 10 (2019).
14. L. F. Tomilin, S. V. Erohin, N. A. Nebogatikova, I. V. Antonova, A. K. Gutakovskii, V. A. Volodin, E. A. Korneeva, and P. B. Sorokin, Carbon **220**, 118832 (2024).
15. N. A. Nebogatikova, I. V. Antonova, A. K. Gutakovskii, D. V. Smovzh, V. A. Volodin, and P. B. Sorokin, Materials **16**, 4 (2023).
16. Y. Gao, T. Cao, F. Cellini, C. Berger, W. A. de Heer, E. Tosatti, E. Riedo, and A. Bongiorno, Nat. Nanotechnol. **13**, 133 (2018).
17. F. Cellini, F. Lavini, T. Cao, W. de Heer, C. Berger, A. Bongiorno, and E. Riedo, FlatChem **10**, 8 (2018).
18. A. G. Kvashnin and P. B. Sorokin, J. Phys. Chem. Lett. **5**, 541 (2014).
19. Y. Mishin, Acta Materialia **214**, 116980 (2021).
20. E. V. Podryabinkin and A. V. Shapeev, Comput. Mater. Sci. **140**, 171 (2017).
21. A. V. Shapeev, Multiscale Model. Simul. **14**, 1153 (2016).
22. I. S. Novikov, K. Gubaev, E. V. Podryabinkin, and A. V. Shapeev, Mach. Learn.: Sci. Technol. **2**, 025002 (2020).
23. Y. Zuo, C. Chen, X. Li, Z. Deng, Y. Chen, J. Behler, G. Csanyi, A. V. Shapeev, A. P. Thompson, M. A. Wood, and S. P. Ong, J. Phys. Chem. A **124**, 731 (2020).
24. A. P. Thompson, H. M. Aktulga, R. Berger, D. S. Bolintineanu, W. M. Brown, P. S. Crozier, P. J. Veld, A. Kohlmeyer, S. G. Moore, T. D. Nguyen, R. Shan, M. J. Stevens, J. Tranchida, C. Trott, and S. J. Plimpton, Comput. Phys. Commun. **271**, 108171 (2022).
25. P. Hohenberg and W. Kohn, Phys. Rev **136**, B864 (1964).
26. W. Kohn and L. J. Sham, Phys. Rev. **140**, A1133 (1965).
27. J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, Phys. Rev. Lett. **77**, 3865 (1996).
28. G. Kresse and J. Hafner, Phys. Rev. B **47**, 558 (1993).
29. G. Kresse and J. Hafner, Phys. Rev. B **49**, 14251 (1994).
30. G. Kresse and J. Furthmüller, Phys. Rev. B **54**, 11169 (1996).
31. S. Grimme, J. Comput. Chem. **27**, 1787 (2006).
32. H. J. Monkhorst and J. D. Pack, Phys. Rev. B **13**, 5188 (1976).
33. A. Stukowski, Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. **18**, 015012 (2009).

34. K. Momma and F. Izumi, J. Appl. Cryst. **44**, 1272 (2011).
35. M. Ceriotti, G.A. Tribello, and M. Parrinello, Proceedings of the National Academy of Sciences **108**, 13023 (2011).
36. S. Zhu, X. Yan, J. Liu, A.R. Oganov, and Q. Zhu, Matter **3**, 864 (2020).
37. В.Н. Решетов, А.С. Усеинов, Г.Х. Султанова, И.А. Кудряшов, К. Будич, Химия и химическая технология **64**, 34 (2021).
38. Y.E. Mendili, B. Orberger, D. Chateigner, J.-F. Bardeau, S. Gascoin, and S. Petit, Chemical Physics **559**, 111541 (2022).