

# Радиационное формирование межслоевых перемычек в двухслойном графене

А. И. Подливаев<sup>1)</sup>

Национальный исследовательский ядерный университет “МИФИ”, 115409 Москва, Россия

Поступила в редакцию 2 февраля 2023 г.

После переработки 21 февраля 2023 г.

Принята к публикации 21 февраля 2023 г.

В рамках неортогональной модели сильной связи исследован процесс радиационного формирования межслоевых перемычек в двухслойном графене. Показано, что большинство (~85%) образовавшихся перемычек обладают низкой термической устойчивостью, не допускающей возможности их применения в элементах графеновой электроники, работающих при комнатной температуре. Обнаружены три типа устойчивых перемычек, энергии активации их отжига составили 1.50, 1.52 и 2.44 эВ. Оценки по формуле Аррениуса показали, что эти типы перемычек имеют макроскопические времена жизни при комнатной температуре. Установлено, что процесс радиационного образования перемычек в двухслойном графене имеет существенные отличия от аналогичного процесса в графите.

DOI: 10.31857/S1234567823060101, EDN: qtizwu

**Введение.** Создание монослоя графита – графена [1] с высокой прочностью [2] и проводимостью [3] стимулировало активный поиск других углеродных планарных структур, состоящих из одного или нескольких атомных слоев. Так, в 2019 году была синтезирована двухслойная структура “графенборофен” [4]. Дальнейшие исследования доказали высокую устойчивость и упругость этой гетероструктуры, полезной для приложений опто- и акустоэлектроники [5, 6]. В 2009 году был предсказан [7], а в 2019 г. синтезирован [8] при нормальном давлении диаман – двухслойная углеродная наноструктура с межслоевыми ковалентными связями. Теоретические исследования показали, что диаман является перспективным материалом для создания резонансных оптических и оптоэлектронных устройств [9]. Исходным материалом при синтезе диамана является двухслойный графен (Bilayer Graphene, BG), который может широко применяться при создании элементов графеновой электроники.

Синтез BG с управляемой шириной запрещенной зоны [10] вызвал дополнительный интерес к этому материалу. Две графеновые плоскости BG, повернутые друг относительно друга на угол, равный  $1.1^{\circ}$ , образуют квазидвумерное вещество, отнесенное авторами работы [11] к категории “странных металлов”. Оно обладает линейной температурной зависимостью проводимости и при низких температурах является сверхпроводником [12, 13]. Возмож-

ность управления межзонной щелью вертикальным электрическим полем делает BG перспективным материалом при создании нового типа транзисторов [14, 15]. Возможно использование BG в качестве датчика влажности [16] и поглотителя некоторых ядовитых газов [17].

Контролируемое формирование ковалентных межслоевых связей существенно расширяет спектр возможных применений BG. Формирование предельно возможного числа связей переводит структуру BG в диаман. В работе [18] в рамках теории функционала плотности (*density functional theory*, DFT) проводилось компьютерное моделирование перфорированного различным образом BG. Граничные атомы отверстий различных слоев BG были ковалентно связаны. Результаты этой работы указывают на возможность манипулирования электронными свойствами графеновых материалов на наноуровне для придания им желаемых свойств. В последующей работе [19] методами *ab initio* были рассчитаны упругие модули биграфеновых наносеток из двухслойного графена со сращенными по краям отверстиями. Показано, что предел прочности на разрыв рассмотренных наносеток выше, чем у графеновых наноструктур, и сравним с прочностью биграфена. Рассмотрено также возможное использование таких наносеток в качестве аккумуляторов для хранения водорода. В работе [20] методом DFT определялась проводимость перфорированных BG лент с межслоевыми перемычками. В настоящей работе посредством статического и динамического

<sup>1)</sup>e-mail: AIPodlivayev@mephi.ru

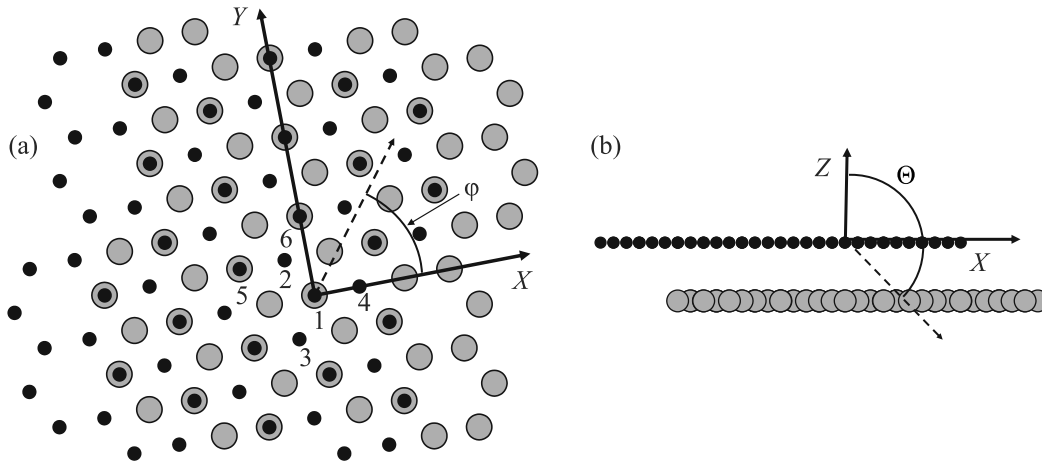


Рис. 1. Расчетная ячейка ВГ из 128 атомов. Серыми шариками обозначена нижняя графеновая плоскость, черными – верхняя. Вид сверху (а) и боковой вид (б)

моделирования изучается процесс образования межслоевых перемычек в ВГ под воздействием радиационного облучения, а также термическая устойчивость этих перемычек.

**Методы расчета.** Для описания межатомного взаимодействия выбрана неортогональная модель сильной связи (*Nonorthogonal Tight-Binding Model* – NTBM, [21]), менее точная, но более быстродействующая, чем первопринципные методы. Программная реализация потенциала NTBM опубликована в работе [22]. Результаты данного подхода хорошо согласуются с результатами DFT для структур, содержащих атомы углерода в состояниях с различными типами гибридизации [23]. Данная модель успешно применялась для исследования множества систем, состоящих из атомов углерода, водорода, азота и кислорода (см., например, работы [24–30] и ссылки в них). Адекватность данного подхода обосновывается также в работе [31]. Введение дисперсионных поправок к этому потенциалу, проведенное в работе [25], позволило адекватно учитывать межслоевое взаимодействие в графите и двухслойном графене. Данная модификация применяется и в настоящей работе.

Для исследования ВГ использовалась  $2 \times 2$  сверхъячейка  $C_{128}$ , состоящая из двух слоев  $C_{64}$  (см. работу [32]). Система декартовых координат выбрана так, что графеновые слои ВГ перпендикулярны оси  $Z$ . На рисунке 1 представлен фронтальный и боковой вид расчетной ячейки с декартовыми и сферическими координатами. Большими серыми шариками обозначены атомы нижней графеновой плоскости, а малыми черными – атомы верхней.

При расчетах использовались периодические граничные условия. Вектора трансляции имеют следу-

ющий вид:  $(13.241, 0, 0)$ ,  $(1.918, 13.101, 0)$ ,  $(0, 0, P_Z)$  (Å). Величины периода  $P_Z$  в вертикальном направлении при моделировании структуры ВГ и кристалла графита равны  $\infty$  и  $6.7$  Å, соответственно.

Ближайшим аналогом ВГ при изучении радиационных дефектов является графит – элемент атомных реакторов. Радиационные дефекты в графите детально изучались на протяжении нескольких десятков лет. Ключевыми характеристиками процесса образования дефектов являются:  $E_d$  – пороговая энергия смещения первично выбитого атома (ПВА) углерода, то есть минимальная кинетическая энергия, получаемая атомом углерода ВГ от быстрой частицы, при которой образуется устойчивый радиационный дефект;  $E_{rel}$  – энергия этого дефекта при нулевой температуре (энергия Вигнера) и  $E_a$  – энергия активации отжига данного дефекта. Несмотря на многолетние исследования, данные о характеристиках радиационных дефектов существенно различаются у разных авторов. Наиболее раннее приближение величины  $E_d \sim 2E_s$  дано Зейтцем (F. Seitz, 1956 [33]), где  $E_s$  – энергия сублимации атома. Для графита величина  $E_s$  равна  $717$  кДж/моль или  $7.4$  эВ/атом (см., например, [34]). Эта оценка справедлива для адиабатически медленной деформации кристалла в дефектное состояние, а при резком ударе быстрой частицей большая часть кинетической энергии ПВА уходит на нагрев кристалла, поэтому пороговая энергия смещения должна быть больше  $(4 \div 5) E_s$  [35]. В обзоре [36] по данным различных источников приведены полный ( $10$ – $60$  эВ) и наиболее правдоподобный ( $15$ – $30$  эВ) интервалы значения величины  $E_d$ . В монографии [35] энергия смещения графита представлена как функция полярного и азимуталь-

ного углов направления движения ПВА. В зависимости от направления, энергия смещения изменяется от 8 до 28 эВ. Усреднение по углам дает значение  $E_d = 17$  эВ. В настоящей работе динамическое моделирование образования радиационных дефектов проводилось в рамках микроканонического ансамбля [37]. Применялся алгоритм Верле с временным шагом 0.3 фс.

Начальные координаты атомов соответствовали равновесной структуре ВГ (см. рис. 1). Начальные значения скоростей равнялись нулю, за исключением скорости единственного ПВА. Рассматривались два неэквивалентных варианта – в качестве ПВА выбирался атом с индексом  $N_r = 1$  или с индексом  $N_r = 2$  (см. рис. 1). Зенитный угол  $\Theta$  направления начальной скорости ПВА принимал значения  $(4/6, 5/6, 6/6) \times \pi$ . Азимутальный угол  $\varphi$  принимал значения  $(0/4, 1/4, 2/4, 3/4, 4/4) \times \pi$ . Начальная кинетическая энергия  $E_0$  ПВА принимала значения 21, 24, 27, 30, 33, 36 и 39 эВ. Если при некотором значении углов  $\Theta$  и  $\varphi$  дефект не образовывался вплоть до энергии 39 эВ, то исследовались дополнительные варианты с энергиями ПВА  $E_0 = 42, 45$  и 48 эВ.

Динамическое моделирование проводилось для 3000 временных шагов, что соответствует реальному времени  $\sim 1$  пс. За это время свободно движущийся атом углерода с энергией  $E_0 = 21$  эВ преодолевает расстояние, равное  $\sim 180 \text{ \AA}$ , которое более чем на порядок величины превышает поперечные размеры расчетной сверхъячейки. Этого времени достаточно для передачи начальной кинетической энергии ПВА остальным атомам и частичной термализации слоев ВГ. После завершения динамического моделирования система охлаждалась до нулевой температуры методом градиентного спуска, после чего определялись параметры образовавшихся дефектов.

Предполагалось, что температурная зависимость времени отжига радиационного дефекта  $\tau$  подчиняется закону Аррениуса

$$\tau^{-1}(T) = A \cdot \exp(-E_a/k_B T), \quad (1)$$

где  $T$  – температура,  $k_B$  – константа Больцмана. Посредством пакета программ [22] исследуются наиболее вероятные траектории движения системы при отжиге дефекта, определяются седловые конфигурации в пространстве обобщенных координат, что позволяет найти энергию активации отжига  $E_a$ . Частотный фактор  $A$  в формуле (1) определялся по формуле Виньярда (Vineyard [38]) из фоновых спектров системы в метастабильном дефектном состоянии и в седловой точке. Определение фоновых спектров в длинноволновом приближении представлено, напри-

мер, в монографии [39]. Особенностью применения формулы Виньярда к атомным системам с периодическими граничными условиями является необходимость исключения из фононного спектра трех минимальных по модулю частот, которые соответствуют сдвигу кристалла как единого целого по трем осям декартовых координат.

**Результаты и обсуждение.** При энергии ПВА  $E_0 = 21$  эВ образование дефектов не наблюдалось. Результаты моделирования для начальной кинетической энергии ПВА  $24 \leq E_0 \leq 39$  эВ представлены в табл. 1. Ячейки с темным фоном, не содержащие каких-либо данных, соответствуют вариантам, при которых дефекты не наблюдались. Серым полукругом отмечены варианты, при которых межслоевые перемычки отсутствуют. Единственный символ в этих ячейках характеризует только форму дефекта. Детальное изучение этих дефектов выходит за рамки данной работы. Символом “decay” отмечены варианты, при которых в верхней графеновой плоскости образуется вакансия на месте, где исходно располагался ПВА. При этом выбитый атом либо проходит сквозь нижнюю графеновую плоскость и удаляется от нее на значительное расстояние, либо передает большую часть своего импульса одному атому нижней плоскости (который, в свою очередь, отделяется от структуры на расстояние, превышающее радиус взаимодействия с атомами ВГ). Индексами Int1 обозначены конфигурации радиационных дефектов, в которых отсутствует межслоевая перемычка и образуются вакансии и междоузлия различной формы в верхней плоскости ВГ. Нижняя плоскость в таких дефектах практически не деформируется. Индексом Int2 обозначены такие конфигурации радиационных дефектов, при которых в верхней плоскости образуется единственный дефект – вакансия. При этом ПВА в данных конфигурациях образуют междоузлия или области локального разупорядочения в нижней плоскости ВГ. В верхних строчках незаштрихованных ячеек табл. 1 приведены две величины – слева  $\text{Dist}$  ( $\text{\AA}$ ) и справа  $E_{\text{tel}}$  (эВ). Величина  $\text{Dist}$  – это расстояние от ПВА в конечном дефектном состоянии до центра вакансии в верхней плоскости ВГ. Обозначим радиус-вектор центра вакансии  $\mathbf{R}_{\text{vac}}$ . Если индекс первично выбитого атома  $N_r = 1$  (см. рис. 1), то  $\mathbf{R}_{\text{vac}} = (\mathbf{R}_2 + \mathbf{R}_3 + \mathbf{R}_4)/3$ , где  $\mathbf{R}_i$  – радиус-вектор соответствующего граничного атома вакансии. Для ПВА с индексом  $N_r = 2$ ,  $\mathbf{R}_{\text{vac}} = (\mathbf{R}_1 + \mathbf{R}_5 + \mathbf{R}_6)/3$ . В нижних строчках ячеек табл. 1 представлена величина энергии активации отжига  $E_a$  (эВ) соответствующего дефекта. При удалении ПВА от центра вакансии на расстояние  $\text{Dist} > 4 \text{ \AA}$  энергия активации от-

Таблица 1. Характеристики радиационных дефектов

$\Theta/\pi,$ $\varphi/\pi$	$N_r \backslash E_0$	24 эВ	27 эВ	30 эВ	33 эВ	36 эВ	39 эВ
4/6, 0/4	1			1.93; 9.53 0.54; C3	Int2	Int2	decay
	2		3.41; 12.91 0.71; C2	Int1	5.0; 12.74 C4	8.02; 12.7 C4	7.59; 12.69 C3
4/6, 1/4	1		3.96; 12.4 0.47; C3	3.51; 12.24 0.39; C3	Int2	3.52; 12.24 0.44; C3	Int2
	2	1.79; 9.45 0.08; C3	1.79; 9.45 0.08; C3		Int2	Int2	Int2
4/6, 2/4	1			3.23; 12.12 1.1; C3	Int2	Int2	Int2
	2			3.23; 11.92 1.52; V1	Int2	Int2	Int2
4/6, 3/4	1	1.78; 9.22 0.07; C3		1.91; 9.47 0.06; C3	1.79; 9.40 0.12; C3		3.33; 12.20 0.64; C3
	2		3.23; 11.92 1.52; V1	3.45; 12.00 0.84; C3	5.66; 12.66 C3	Int2	8.22; 12.81 C4
4/6, 4/4	1		3.52; 12.16 1.00; C3	Int1	Int2	Int2	decay
	2			Int2	Int2	Int2	Int2
5/6, 0/4	1		1.78; 9.22 0.07; C3		decay	decay	decay
	2				decay	decay	decay
5/6, 1/4	1				1.92; 9.32 0.26; C3	2.55; 13.80 0.50; **	2.62; 13.23 2.44; V2
	2 *						
5/6, 2/4	1			1.79; 9.45 0.06; C3		Int2	Int2
	2		1.79; 9.22 0.06; C3				Int2
5/6, 3/4	1				Int2	Int2	decay
	2						1.78; 9.22 0.07; C3
5/6, 4/4	1					decay	decay
	2	1.79; 9.40 0.123; C3		2.15; 12.32 1.50; V3		2.15; 12.32 1.50; V3	decay
6/6, 0/4	1				decay	decay	decay
	2		decay	decay	decay	decay	decay

**Таблица 2.** Характеристики термической устойчивости межслоевых перемычек ВГ

	$E_{\text{rel}}$ (эВ)	$E_a$ (эВ)	$A$ ( $\text{с}^{-1}$ )	$\tau$ ( $T = 300 \text{ K}$ ) (с)	$\tau$ ( $T = 500 \text{ K}$ ) (с)
V1	11.92	1.52	$2.3 \times 10^{14}$	$1.4 \times 10^{11}$	9.
V2	13.23	2.44	$6.1 \times 10^{14}$	$1.6 \times 10^{26}$	$6.4 \times 10^9$
V3	12.32	1.50	$1.4 \times 10^{15}$	$1.1 \times 10^{10}$	0.93

жиги не вычислялась, поскольку вакансию и образовавшийся из ПВА междуузельный атом (далее, МА) можно рассматривать как изолированные, не взаимодействующие дефекты. Примером удаленных друг от друга на расстояние  $5 \text{ \AA}$  вакансии и межслоевого МА является вариант  $N_r = 2$ ,  $E_0 = 33 \text{ эВ}$ ,  $\Theta/\pi = 4/6$ ,  $\varphi/\pi = 0/4$ . При этом МА имеет форму, аналогичную форме спиро междуузлия (*spiro interstitial*), представленной в работе [40]. В данной форме МА ковалентно связан с двумя атомами верхней графеновой плоскости и двумя атомами нижней плоскости. Название этот дефект получил из-за сходства с молекулой спиропентена [41]. В таблице 1 конфигурации, содержащие МА, ковалентно связанный с двумя атомами верхней и двумя атомами нижней плоскости, обозначаются символом “С4”. В образующихся конфигурациях МА наблюдаются некоторые различия величин углов между связями и длинами связей. В данной ситуации корректнее, видимо, говорить не о гибридизации междуузельных атомов, а об их координационных числах (С2, С3 и С4 в зависимости от числа ковалентных связей). В варианте  $N_r = 2$ ,  $E_0 = 33 \text{ эВ}$ ,  $\Theta/\pi = 4/6$ ,  $\varphi/\pi = 0/4$  МА при перемещении по ближайшим междуузельным метастабильным положениям так же, как и в работе [40], проходит через седловые конфигурации, в которых ковалентно связан с одним атомом одной из графеновых плоскостей и с двумя атомами другой плоскости. Далее МА, ковалентно связанный с графеновым окружением, таким образом имеет форму буквы Y (в предшествующих работах обозначен как “Y-lid”, см., например, [40] или обзор [42]) и далее маркируется символом “С3”. Расчет в рамках NTBM [25] показал, что энергетический барьер  $E_{\text{dif}}$ , определяющий диффузию МА по ближайшим междуузельным метастабильным положениям, равен 1.15 эВ для структуры ВГ и 1.17 эВ для аналогичного дефекта в графите. В работе [40] величина  $E_{\text{dif}} = 1.1 \text{ эВ}$ , а в более ранних работах [43] и [44] – 1.25 и 1.13 эВ, соответственно. Энергия Вигнера  $E_{\text{rel}}$  также слабо различается в структуре ВГ и графите. Величина  $E_{\text{rel}} = 12.74$  и 12.68 эВ в структуре ВГ и графите соответственно. Это значение  $E_{\text{rel}}$  коррелирует с данными, приведенными в обзоре [42], где энергия пары Френкеля лежит в интервале 10.6–13.7 эВ в за-

висимости от расстояния между вакансией и МА. Однако, если статические характеристики дефекта  $E_{\text{dif}}$  и  $E_{\text{rel}}$  для структуры ВГ и графита почти совпадают, то динамические характеристики Dist удаления ПВА от центра вакансии при одинаковых начальных скоростях ПВА в структуре ВГ и в графите заметно различаются. Величины  $\text{Dist} = 5$  и  $7.4 \text{ \AA}$  для структуры ВГ и графита соответственно. Большая длина пробега ПВА при каналировании между графеновыми плоскостями может быть обусловлена тем, что при вертикальном смещении атомов плоскости жесткость графита выше, чем жесткость структуры ВГ (вертикальному смещению атома в структуре ВГ препятствуют атомы только одной соседней плоскости, а в графите – атомы двух соседних плоскостей). Большая жесткость графита подавляет процесс торможения (передачи энергии ПВА окружающим атомам), и это увеличивает длину пробега ПВА.

Из данных табл. 1 следует, что радиационные дефекты с межслоевыми перемычками по величине энергии активации отжига могут быть разбиты на две неравные группы. К первой группе относятся дефекты с величиной  $E_a \leq 1.1 \text{ эВ}$ . Эта группа ввиду низкой термической устойчивости не представляет интереса для создания элементов графеновой электроники. Действительно, для варианта из табл. 1 с параметрами  $N_r = 1$ ,  $E_0 = 30 \text{ эВ}$ ,  $\Theta/\pi = 4/6$ ,  $\varphi/\pi = 2/4$ ,  $E_a = 1.1 \text{ эВ}$  частотный фактор, определенный по формуле Виньярда [38],  $A = 2.5 \times 10^{13} \text{ с}^{-1}$ . В этом случае выражение (1) дает время отжига  $\tau(T = 300 \text{ K}) = 33 \text{ ч}$ . Такая низкая термическая устойчивость не позволяет создавать элементы электроники, работающие при комнатных температурах.

Ко второй группе относятся дефекты с величиной  $E_a \geq 1.5 \text{ эВ}$ . Эта группа обладает высокой термической устойчивостью. В табл. 2 для второй группы дефектов приведены характерные времена отжига при температурах  $T = 300$  и  $500 \text{ K}$ . Ячейки, соответствующие дефектам второй группы в табл. 1, обведены жирной рамкой, а в нижней строке помещен идентификатор дефекта (V1, V2 или V3). Поскольку конфигурация дефектов V1, V2 и V3 будет представлена в соответствующих рисунках, координационные числа для них в табл. 1 не приводятся.

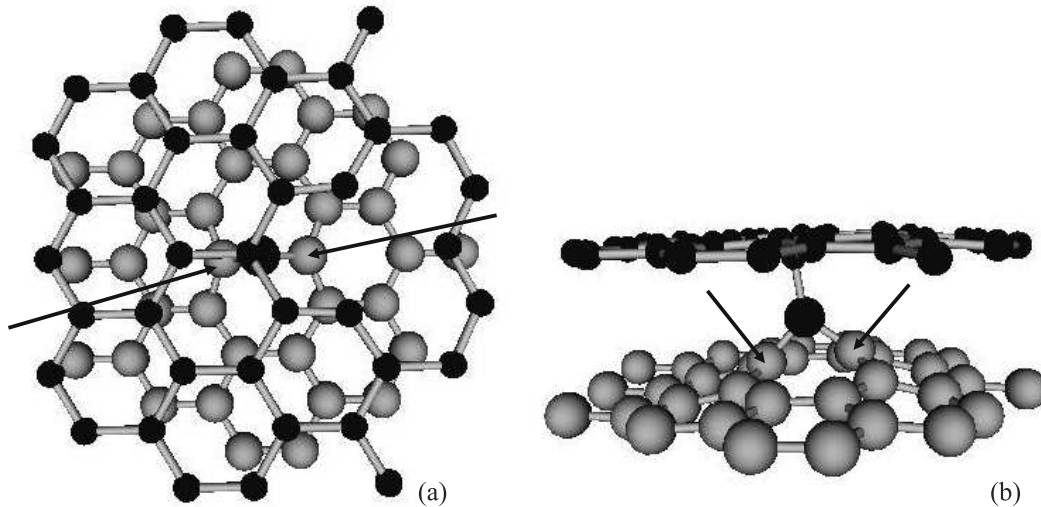


Рис. 2. Фрагмент структуры ВГ из 75 атомов, содержащий дефект V1. Вид сверху (а) и боковой вид (b)

Символом “\*\*” в табл. 1 отмечена строка  $N_r = 2$ ,  $\Theta/\pi = 5/6$ ,  $\varphi/\pi = 1/4$ , для которой величина  $E_d > 39$  эВ. При этих параметрах дефектообразование происходит при начальной энергии ПВА  $E_0 = 42$  эВ. Образовавшаяся конфигурация имеет координационное число С3, величины Dist,  $E_{\text{rel}}$  и  $E_a$  равны 2.55 Å, 13.96 и 1.12 эВ соответственно. При значениях величин  $E_0 = 45$  и 48 эВ образовавшиеся дефекты характеризуются марками “Int2” и “decay” соответственно. Конфигурация, отмеченная в табл. 1 символом “\*\*”, близка по форме к дефекту V3 и будет описана ниже одновременно с этим дефектом.

Полное число обнаруженных дефектов с координационными числами С2, С3 и С4 равно 1, 22 и 3 соответственно. Несмотря на большое количество дефектов с координационным числом С3, эти дефекты не определяют свойства ВГ при комнатной температуре, поскольку имеют низкую энергию активации отжига. Величину  $E_a$ , лежащую в интервале  $0.5 < E_a \leq 1.1$  эВ имеют 5 дефектов, а величину  $E_a \leq 0.5$  эВ – 15 дефектов. Высокой термической устойчивостью обладают только межслоевые перемычки, обозначенные в табл. 1 и 2 как V1, V2 и V3.

Фронтальный и боковой виды дефекта V1 представлены на рис. 2а, б. Малыми черными кружками представлены атомы верхней плоскости, содержащей вакансию. Большими серыми кружками – атомы нижней плоскости. Большой черный кружок – МА (ПВА в начальный момент времени). На рисунке 2 видно, что радиационное повреждение получила не только верхняя графеновая плоскость, в которой образовалась вакансия. Повреждена также и нижняя плоскость, в которой ПВА разорвал одну ко-

валентную связь (между атомами, которые указаны стрелками). В результате в нижней плоскости образовались два смежных кольца из семи атомов. Расчет, проведенный для графита при тех же начальных условиях, при которых образовались дефекты типа V1 в структуре ВГ показывает, что при этом образуются дефекты, практически совпадающие с дефектом V1. Форма этих дефектов не отличается от представленной на рис. 2. Величины Dist и  $E_{\text{rel}}$  равны 3.51 Å и 12.14 эВ, что не существенно отличается от данных табл. 1 для дефекта V1.

Наиболее устойчивый дефект V2 с энергией активации  $E_a = 2.44$  эВ имеет форму, представленную на рис. 3. Обозначение атомов аналогично принятому на рис. 2. На рисунке 3 видно, что повреждена нижняя плоскость, в которой ПВА разорвал одну ковалентную связь, в результате чего образовались два смежных кольца из семи и одиннадцати атомов. При этом ПВА образовал межслоевую перемычку. Расчет, проведенный для графита при тех же начальных условиях, при которых образовались дефекты типа V2 в структуре ВГ показывает, что при этом образуется дефект, обозначенный выше символом Int2, существенно отличающийся от дефекта V2 (межслоевая перемычка в нем отсутствует).

Форма дефекта V3 представлена на рис. 4. Обозначения атомов аналогичны рис. 2 и 3. Конфигурация V3 имеет общие черты с конфигурацией, отмеченной в табл. 1 символом “\*\*”. В верхней плоскости располагается вакансия. ПВА образует межслоевую перемычку с ближайшим атомом нижней плоскости. Однако в конфигурации “\*\*” перемычка перпендикулярна графеновым слоям, а в дефекте V3 располо-

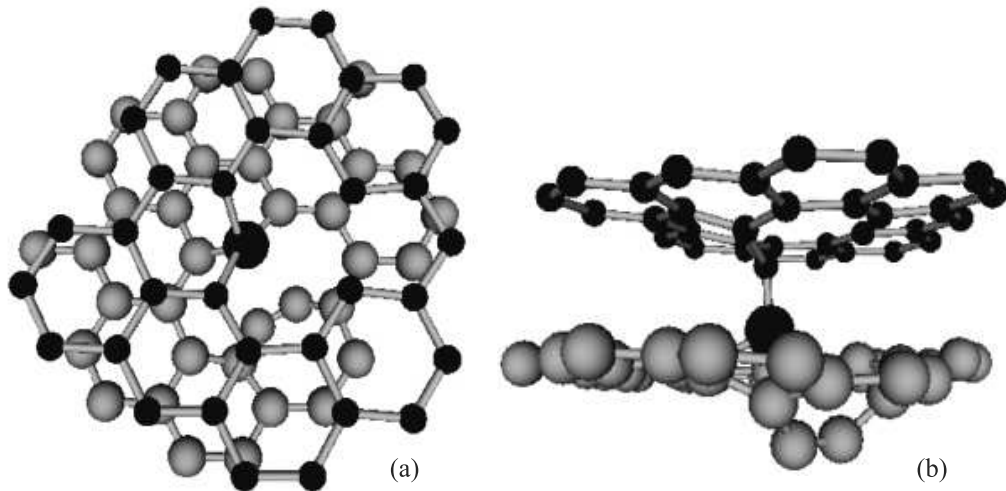


Рис. 3. Фрагмент структуры ВГ из 72 атомов, содержащий дефект V2. Вид сверху (a) и боковой вид (b)

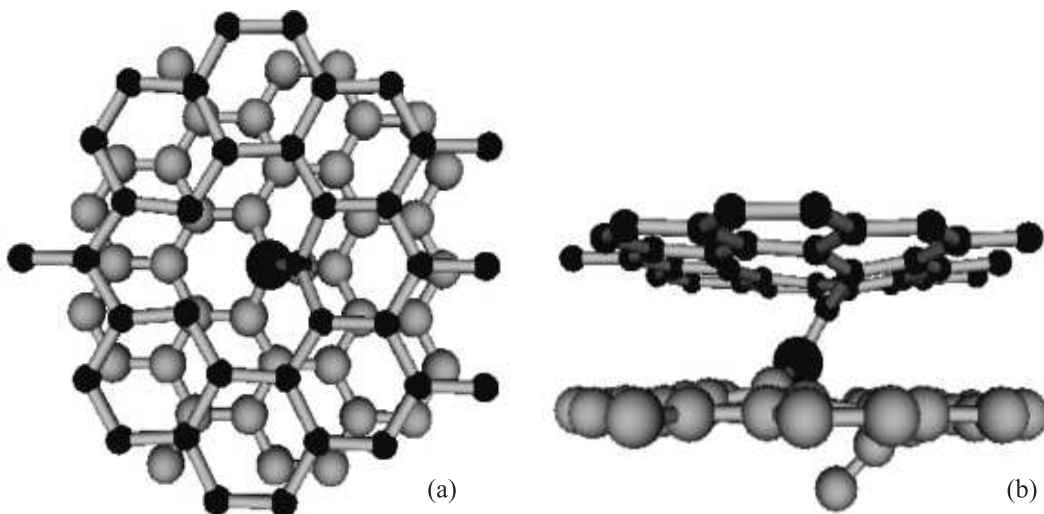


Рис. 4. Фрагмент структуры ВГ из 75 атомов, содержащий дефект V3. Вид сверху (a) и боковой вид (b)

жена под углом  $\sim \pi/6$  к “поверхности” верхней плоскости. В нижней плоскости образуется десятиатомное кольцо и присоединенный к нему атом с координационным числом, равным единице. Расчет, проведенный для графита при тех же начальных условиях, при которых образовались дефекты типа V3 в структуре ВГ, показывает, что образуются аналогичные дефекты.

**Заключение.** При моделировании процесса радиационного формирования и статических характеристик межслоевых перемычек было получено 33 метастабильных конфигурации. Две идентичные конфигурации (обозначенные в работе как V3) имели энергию активации отжига  $E_a = 1.50$  эВ и еще две (V1) –  $E_a = 1.52$  эВ. Наиболее устойчивая конфигурация V2 имела энергию активации  $E_a = 2.44$  эВ.

Остальные межслоевые перемычки имели низкую энергию активации отжига  $E_a \leq 1.1$  эВ, т.е. оказались неустойчивыми при комнатной температуре. Сопоставление процессов радиационного образования дефектов в двухслойном графене и в графите показало, что при равных начальных скоростях ПВА в ВГ формируется дефект V2 с межслоевой перемычкой, а в графите перемычка не возникает. Также в ВГ и в графите различаются баллистические длины пробегов ПВА при движении их между графеновыми плоскостями.

Характерной чертой всех обнаруженных устойчивых перемычек является существенное повреждение вблизи перемычки как нижней, так и верхней графеновых плоскостей. В связи с этой особенностью в дальнейшем представляет интерес исследова-

ние процесса радиационного формирования перемычек в несимметричной двухслойной структуре (графен) + (графен со множеством дефектов).

Автор благодарен К. П. Катину за обсуждение результатов работы.

Работа выполнена при поддержке программы НИЯУ МИФИ Приоритет 2030.

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. А. Е. Галашев, О. Р. Рахманова, *УФН* **184**, 1045 (2014).
3. K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, M. I. Katsnelson, I. V. Grigorieva, S. V. Dubonos, and A. A. Firsov, *Nature* **438**, 197 (2005).
4. X. Liu and M. C. Hersam, *Sci. Adv.* **5** (2019); <https://doi.org/10.1126/sciadv.aax6444>.
5. А. И. Коचाев, К. Р. Катин, М. М. Маслов, and Р. М. Мефтакхутдинов, *J. Phys. Chem. Lett.* **11**, 5668 (2020).
6. А. И. Коचाев, М. М. Маслов, К. Р. Катин, V. Efimov, and I. Efimova, *Materials Today Nano.* **20**, 100247 (2022).
7. Л. А. Чернозатонский, П. Б. Сорокин, А. Г. Квашнин, Д. Г. Квашнин, *Письма в ЖЭТФ* **90**, 144 (2009).
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, *Nature Nanotechnol.* **15**, 59 (2019).
9. L. A. Chernozatonskii, K. P. Katin, V. A. Demin, and M. M. Maslov, *Appl. Surf. Sci.* **537**, 148011 (2021).
10. T. Ohta, A. Bostwick, T. Seyller, K. Horn, and E. Rotenberg, *Science* **313**, 951 (2006).
11. Y. Cao, D. Chowdhury, D. Rodan-Legrain, O. Rubies-Bigorda, K. Watanabe, T. Taniguchi, T. Senthil, and P. Jarillo-Herrero, *Phys. Rev. Lett.* **124**, 076801 (2020).
12. Y. Cao, V. Fatemi, S. Fang, K. Watanabe, T. Taniguchi, E. Kaxiras, and P. Jarillo-Herrero, *Nature* **556**, 43 (2018).
13. G. E. Volovik, *Письма в ЖЭТФ* **107**, 537 (2018).
14. Y. Zhang, T. Tang, and C. Girit, *Nature* **459**, 820 (2009).
15. G. Fiori and G. Iannaccone, *IEEE Electron Device Letters* **30**, 261 (2009).
16. M.-C. Chen, C.-L. Hsu, and T.-J. Hsueh, *IEEE Electron Device Letters* **35**, 590 (2014).
17. Y. Tang, Z. Liu, and Z. Shen, *Sens. Actuators B* **238**, 182 (2017).
18. L. A. Chernozatonskii, V. A. Demin, and Ph. Lambin, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **18**, 27432 (2016).
19. А. А. Артюх, Л. А. Чернозатонский, *Письма в ЖЭТФ* **109**(7), 481 (2019).
20. В. А. Демин, Д. Г. Квашнин, П. Ванчо, Г. Марк, Л. А. Чернозатонский, *Письма в ЖЭТФ* **112**, 328 (2020).
21. M. M. Maslov, A. I. Podlivaev, and K. P. Katin, *Molecular Simulation* **42**, 305 (2016).
22. K. P. Katin, K. S. Grishakov, A. I. Podlivaev, and M. M. Maslov, *J. Chem. Theory Comput.* **16**, 2065 (2020).
23. K. P. Katin and M. M. Maslov, *J. Phys. Chem. Solids* **108**, 82 (2017).
24. Л. А. Опенев, А. И. Подливаев, *Письма в ЖЭТФ* **109**, 746 (2019).
25. А. И. Подливаев, К. С. Гришаков, К. П. Катин, М. М. Маслов, *Письма в ЖЭТФ* **113**, 182 (2021).
26. А. И. Подливаев, К. С. Гришаков, К. П. Катин, М. М. Маслов, *Письма в ЖЭТФ* **114**, 172 (2021).
27. А. И. Подливаев, К. П. Катин, *Письма в ЖЭТФ* **92**, 54 (2010).
28. М. М. Маслов, К. П. Катин, А. И. Авхадиева, А. И. Подливаев, *Химическая физика* **33**, 27 (2014).
29. А. И. Подливаев, *Письма в ЖЭТФ* **115**, 384 (2022).
30. K. P. Katin and M. M. Maslov, *Molecular Simulation* **44**, 703 (2018).
31. Ю. С. Нечаев, Е. А. Денисов, Н. А. Шурыгина, А. О. Черетаева, Е. К. Костицова, С. Ю. Давыдов, *Письма в ЖЭТФ* **114**, 372 (2021).
32. А. И. Подливаев, *Письма в ЖЭТФ* **111**, 728 (2020).
33. F. Seitz and J. S. Koehler, *Solid State Physics* **2**, 305 (1956).
34. *Химическая энциклопедия*, под ред. И. Л. Кнунянц, в 5 т., Сов. энц., М. (1988) т. 1, 623 с.
35. Е. И. Жмуриков, И. А. Бубненко, В. В. Дремов, С. И. Самарин, А. С. Покровский, Д. В. Харьков, *Графит в науке и ядерной технике*, Новосибирск (2013), 159 с.; <https://arxiv.org/ftp/arxiv/papers/1307/1307.1869.pdf>.
36. B. Farbos, H. Freeman, T. Hardcastle, J.-P. Da Costa, R. Brydson, A. J. Scott, P. Weisbecker, C. Germain, G. L. Vignoles, and J.-M. Leyssale, *Carbon* **120**, 111 (2017); <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2017.05.009>
37. E. M. Pearson, T. Halicioglu, and W. A. Tiller, *Phys. Rev. A* **32**, 3030 (1985).
38. G. V. Vineyard, *J. Phys. Chem. Solids.* **3**, 121 (1957).
39. А. М. Косевич, *Основы механики кристаллической решетки*, Наука, М. (1972).
40. A. A. El-Barbary, *Appl. Surf. Science* **426**, 238 (2017).
41. R. H. Telling, C. P. Ewels, A. A. El-Barbary, and M. I. Heggie, *Nat. Mater.* **2**(5), 333 (2003); <https://doi.org/10.1038/nmat876>.
42. S. B. Isbill, A. E. Shields, D. J. Mattei-Lopez, R. J. Kapsimalis, and J. L. Niedziela, *Comput. Mat. Sci.* **195**, 110477 (2021).
43. L. M. Brown, A. Kelly, and R. M. Mayer, *Philos. Mag.* **19**, 721 (1969).
44. W. N. Reynolds and P. A. Thrower, *Philos. Mag.* **12**, 573 (1965).