

PACS numbers: 61.43.Bn, 62.25.Mn

ЧИСЛЕННОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ОБЛУЧЕНИЯ ПЛАСТИНКИ ГРАФЕНА ПУЧКОМ АТОМОВ УГЛЕРОДА

А.В. Хоменко, Н.В. Проданов, Ю.В. Щербак

Сумский государственный университет,
ул. Римского-Корсакова, 2, 40007, Сумы, Украина
E-mails: khom@mss.sumdu.edu.ua, prodk@rambler.ru

Проведено моделювання методом класическої молекулярної динаміки процесу облучення пластинки графену пучком атомів вуглецю. Ковалентні зв'язи в облучаємому образці описуються потенціалом Бреннера. Для частиць в пучку використано наближення пружинних шарів, взаємодіючих з графеном за допомогою потенціалу Леннарда – Джонса. Досліджено вплив енергії і густоти налетаючих атомів вуглецю, а також наявності термостата на фізическі процеси, протікаючі при зіткненні з образцом. Визначено значення енергії частиць в пучку, при яких відбувається руйнування пластинки графену.

Ключевые слова: ГРАФЕН, ОБЛУЧЕНИЕ, РАЗРУШЕНИЕ, ТЕРМОСТАТ, МОЛЕКУЛЯРНАЯ ДИНАМИКА.

(Получено 08.09.2009, в отредактированной форме – 21.10.2009)

1. ВВЕДЕНИЕ

Недавнее открытие графена вызвало и продолжает привлекать значительный интерес, главным образом сфокусированный на особенные электронные свойства этого материала, в котором носители заряда напоминают безмассовые релятивистские частицы [1-4]. Однако структура графена – одного слоя атомов углерода, плотно упакованных в гексагональную кристаллическую решетку, – является также не до конца понятной. С одной стороны, графен оказывается строго двумерным материалом, проявляющим такое высокое качество кристаллической структуры, что электроны могут перемещаться на субмикрометровые расстояния без рассеивания при комнатной температуре. С другой стороны, теоретически показано, что идеальные двумерные кристаллы не могут существовать в свободном состоянии, и долгое время это подтверждалось экспериментально [5-7].

Эксперименты с использованием растрового просвечивающего электронного микроскопа (РПЭМ) указывают на существование в графене изолированных точечных дефектов, в частности вакансий [8]. Их наличие связывается с повреждением кристаллической структуры в результате облучения или бомбардировки ионами, а также вследствие взаимодействия с электронным пучком РПЭМ. Всестороннее понимание условий формирования дефектной структуры графена имеет большое значение при построении электронных приборов на его основе, поскольку качество кристаллической решетки значительно влияет на электронные свойства данного материала.

Изучение образования дефектов в графене и его разрушения при бомбардировке различными частицами также может служить первым этапом на пути к пониманию процесса деструкции графита потоком

плазмы, представляющего интерес при исследовании ядерного синтеза [9, 10]. В экспериментальных установках и в термоядерных реакторах под воздействием потоков плазмы происходит разрушение дивертора, изготовленного из графита. В контексте этой задачи проведен ряд компьютерных экспериментов с использованием классической молекулярной динамики (МД). Изучались процессы бомбардировки пластинки графена одиночными атомами изотопов водорода [9], а также облучение графитового образца последовательностью этих же частиц [10]. В моделях использовалась новая версия потенциала Бреннера и рассматривался микроканонический статистический ансамбль. Основным результатом указанных работ состоит в определении энергий и масс частиц, при которых происходит их отражение, поглощение или проникновение в графеновую пластинку, а также разрушение графитового образца. Следует, однако, отметить, что недостатками численных экспериментов в [9, 10] являются применение только лишь короткодействующего потенциала Бреннера для взаимодействий между налетающими частицами и атомами углерода, а также использование для облучения не пучка частиц, а одиночных атомов, что является маловероятным в экспериментах. Кроме того, ограниченность моделей проявляется в отсутствии излучения энергии из системы, которое фактически всегда имеет место на практике.

Очевидна необходимость изучения более реалистичных моделей, в которых устранены указанные выше недостатки, что и явилось причиной компьютерных экспериментов, описываемых в данной работе. Проведены МД моделирования, в которых рассматривается взаимодействие графеновой пластинки с потоком атомов углерода. Главными целями работы являются исследование влияния энергии и плотности частиц в пучке, а также охлаждения графена на физические процессы, протекающие при облучении образца. В следующем разделе дано подробное описание условий моделирования.

2. МОДЕЛЬ

Графеновая пластинка состоит из 24×24 «пчелиных сот», транслированных периодически вдоль осей x и y (рис. 1). Периодические граничные условия приложены к образцу в плоскости xy . Углеродный слой содержит 3456 атомов и его размеры вдоль осей x и y составляют 10,082 нм и 8,731 нм соответственно.

Пучок атомов углерода моделируется совокупностью упругих шаров, образующих усеченную пирамидальную структуру и в начальный момент размещенных в вершинах кубической решетки, расположенной над центром симметрии образца. С целью изучения влияния плотности налетающих частиц на поведение системы использовались следующие три значения постоянной кубической решетки: $a = 0,3165$ нм, $0,2374$ нм и $0,1582$ нм. Пучок состоит из пяти слоев квадратного сечения, лежащих в плоскости xy . В нижнем (самом близком к облучаемому образцу) слое содержится 169 атомов, в каждом вышележащем слое прибавляется один ряд частиц вдоль осей x и y , так что всего в пучке содержится 1135 атомов, а общее число частиц, участвующих в моделировании, равно 4591.

Ключевую роль для реалистичного моделирования методом МД играет вид потенциала взаимодействия между частицами [12-15]. В данной работе ковалентные связи в пластинке графена описываются потенциалом, разработанным Бреннером для моделирования углеводов. Он имеет вид суммы по всем связям [16-18]:

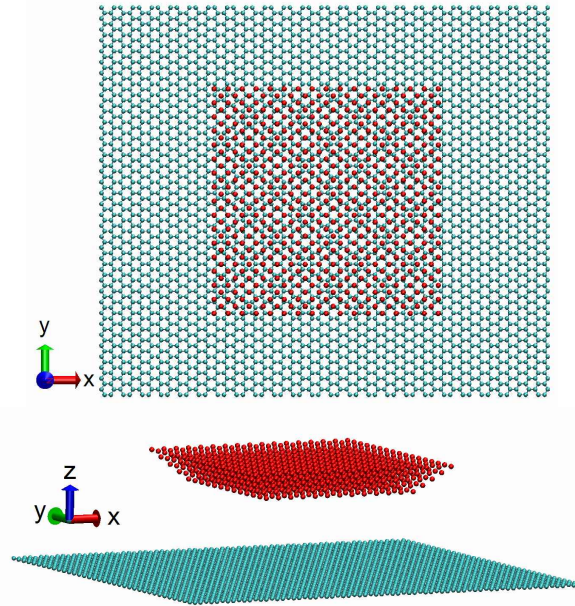


Рис. 1 – Начальные конфигурации системы для $a = 0,3165$ нм. Циановые и красные шарики изображают атомы углерода в пластинке и в пучке соответственно. Все мгновенные снимки системы построены с использованием программы *Visual Molecular Dynamics (VMD)* [11]

$$V_b = \sum_i \sum_{j>i} [V_R(r_{ij}) - \bar{B}_{ij} V_A(r_{ij})]. \quad (1)$$

Функции $V_R(r_{ij})$ и $V_A(r_{ij})$ являются парно-аддитивными взаимодействиями, представляющими все межатомные отталкивания (между ионными остовами и т. д.) и притяжение между валентными электронами соответственно. Величина r_{ij} – расстояние между парами ближайших атомов-соседей i и j , а \bar{B}_{ij} – член кратности связи, отражающий тип связи между атомами i и j и включающий многочастичные эффекты, необходимые для правильного описания связывания в гидрокарбонатах.

В данной работе для функций $V_R(r_{ij})$ и $V_A(r_{ij})$ используются выражения из реактивной эмпирической формы потенциала, учитывающей кратность связи (REBO) [17]. Они дают улучшенные значения для упругих свойств алмаза и графита и более реалистично моделируют короткодействующие отталкивания по сравнению со старой версией потенциала [17, 19]. Для простоты член кратности связи \bar{B}_{ij} выбран из первой версии потенциала Бреннера с параметрами для потенциала II в работе [16]. Все сплайны в данной работе вычислялись с использованием кода из TREMOLO [18], силы рассчитывались по алгоритму, основанному на списке связанных ячеек [14, 15, 18]. TREMOLO – программный пакет с открытым кодом, реализованный на C++ и разработанный в боннском университете для моделирования методом МД.

Атомы в пучке не взаимодействуют между собой. Взаимодействие частиц пучка с атомами пластинки описывается потенциалом Леннарда-Джонса:

$$u_{LJ} = \begin{cases} 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right], & r_{ij} \leq r_c, \\ 0, & r_{ij} > r_c \end{cases} \quad (2)$$

где $\sigma = 0,167$ нм, $\varepsilon = 0,5$ мэВ, радиус отсечки $r_c = 0,9018$ нм. Масса атомов углерода принята равной $19,9441 \cdot 10^{-27}$ кг.

Классические уравнения движения интегрируются с использованием метода Верле [14, 15] с временным шагом 0,1 фс. Большинство компьютерных экспериментов проходило в условиях микроканонического статистического ансамбля, т. е. фиксированными являются полная энергия E_{tot} системы, количество частиц N и объем V . Для исследования влияния отвода тепла на поведение системы также рассматривались условия, приближенные к каноническому ансамблю, путем отвода тепла посредством термостата Берендсена [12, 15], связанного с атомами слоя. Для его реализации использовалась методика, описанная в [15] – скорости атомов каждые 10 шагов умножались на величину

$$\beta_\gamma = \left(1 + \gamma \left[\frac{T^D}{T(t)} - 1 \right] \right)^{1/2}, \quad (3)$$

где $T(t)$ и T^D – текущая и требуемая температуры соответственно, $\gamma \in [0; 1]$ – коэффициент трения, определяющий силу связи термостата с системой. Чем ближе γ к единице, тем сильнее тепло отводится из системы. В данной работе использовалось значение $\gamma = 0,4$, соответствующее довольно сильному сцеплению атомов графена с термостатом. Поскольку термостат связывается только с образцом и не учитывается излучение энергии атомов пучка, то, строго говоря, рассматриваемые условия моделирования при наличии термостата не являются каноническими. Однако в дальнейшем для краткости мы будем использовать выражение «канонический ансамбль», помня при этом об истинных условиях моделирования.

Процесс облучения проходил следующим образом. На протяжении первых 1000 временных шагов (или 0,1 пс) система приводилась в равновесие при температуре 298 К, при этом вертикальное расстояние между нижним слоем в пучке и графеновой пластинкой составляло 1,9895 нм, 1,9374 нм и 1,9026 нм для $a = 0,3165$ нм, 0,2374 нм и 0,1582 нм соответственно. После этого частицам в пучке в отрицательном направлении оси z сообщался импульс p , определяемый кинетической энергией E :

$$p = \sqrt{2mE}, \quad (4)$$

где m – масса атома углерода. Частицы начинали двигаться по направлению к образцу с постоянной скоростью. Исследовались следующие значения кинетической энергии атомов в пучке: 50, 100, 250, 500, 1000 мэВ для условий микроканонического ансамбля, и 500 и 1000 мэВ при наличии термостата для всех значений плотности пучка. Для максимального значения кинетической энергии в 1000 мэВ скорость частиц составляет около 4000 м/с, что дает право использовать классическую механику без релятивистских поправок. Полная длительность моделирования изменялась от 1 пс до 3,2 пс в зависимости от энергии налетающих атомов углерода.

В численных экспериментах проводились измерения потенциальной энергии системы, механических напряжений, возникающих в пластинке графена, ее деформации вдоль оси z , а также каждые 50 временных шагов происходила запись атомных координат, что впоследствии позволило визуализировать поведение системы с помощью программы VMD [11]. Потенциальная энергия системы E_{pot} принималась равной сумме потенциальных энергий каждой частицы, что включает в себя как энергию связи атомов углерода в графене, так и их энергию взаимодействия с частицами в пучке.

Механические напряжения в углеродном слое рассчитывались с использованием следующего выражения для тензора напряжений [18]:

$$\sigma^{\alpha\beta} = \frac{1}{V} \sum_{i=1}^N \left(m_i u_i^\alpha u_i^\beta + 0,5 \sum_{j=1, j \neq i}^N F_{ij}^\alpha r_{ij}^\beta \right), \quad (5)$$

где α и β означают направление в декартовой системе координат (x , y , или z); u_i^k – скорость атома i вдоль направления k ; V – объем графеновой пластинки, для него использовалось значение, равное произведению площади образца на длину межатомной связи в графене, равной 0,142 нм; m_i – масса атома углерода; N – число атомов углерода; F_{ij}^α и r_{ij}^β – соответственно компоненты силы и радиус-вектора между атомами i и j . В данной работе вычислялась только компонента тензора напряжений вдоль направления движения пучка σ^{zz} , т. е. $\alpha, \beta = z$.

При взаимодействии с пучком деформирование образца является неоднородным, и для характеристики изменения его формы следует определять пространственное распределение деформации по пластинке. Но для простоты в работе измеряется изменение размера углеродного слоя только вдоль оси z , и для его количественной характеристики рассчитывается максимальное расстояние между атомами углерода вдоль этого направления. Данную величину мы рассматриваем только по модулю, в дальнейшем для краткости будем называть деформацией и обозначать как Δz .

3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

3.1 Микростатистический ансамбль

На рис. 2 представлены временные зависимости напряжений, возникающих в пластинке, и ее деформации в условиях постоянных N , V и E_{tot} для $a = 0,3165$ нм.

Полученные зависимости можно разделить на две группы: в первой образец не разрушается (энергия пучка менее 0,5 эВ), для второй же группы энергии налетающих частиц достаточно для разрыва связей в пластинке и соответственно для ее деструкции. Рассмотрим более подробно случаи $E = 0,1$ и $0,5$ эВ как представителей этих двух возможных сценариев поведения системы.

При $E = 0,1$ эВ частицы достигают образца примерно после 15000 временных шагов, что проявляется в увеличении деформации (абсолютного значения максимального расстояния между атомами в пластинке в направлении оси z) и напряжений (точка А на рис. 3 и 4). В точке В происходит наибольшее «натяжение» графенового слоя, при этом пластинка начинает двигаться как целое вниз, поскольку она не закреплена в пространстве, а изгибание пластинки изменяет направление

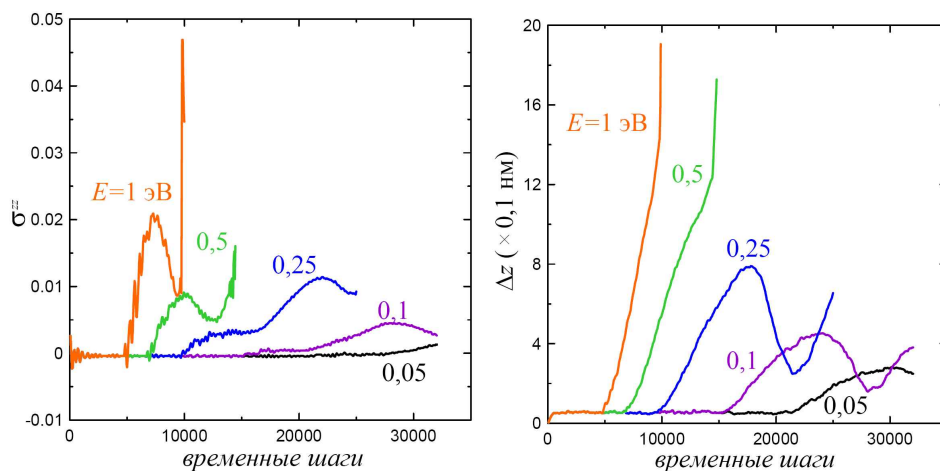


Рис. 2 – Временные зависимости напряжений (слева) и деформации (справа) графеновой пластинки для $a = 0,3165$ нм

(атомы в центре начинают двигаться вверх), что отражается в дальнейшем уменьшении деформации до точки С. Нелинейную связь между σ^{zz} и Δz можно объяснить тем, что величина полных напряжений определяется не столько отклонением атомов вдоль вертикальной оси, сколько числом атомов, до которых дошло воздействие частиц пучка. Максимум напряжений в точке С соответствует моменту, когда большинство атомов «ощутили» действие пучка.

Из рис. 3 и 4 видно, что энергии частиц $E = 0,1$ эВ не достаточно для разрыва связей в образце, и происходит их упругое рассеяние. Причем все атомы отражаются, и ни один не проникает за пластинку.

Для $E = 0,5$ эВ частицы сталкиваются с пластинкой после 7000 шагов (точка А на рис. 5 и 6). Видно, что напряжения довольно быстро, фактически линейно возрастают с ростом деформации, достигая максимума в точке В.

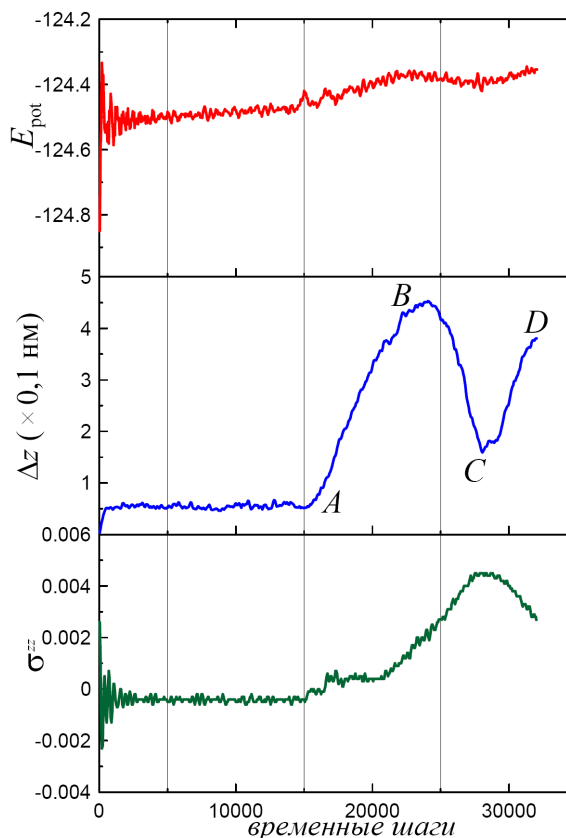


Рис. 3 – Временные зависимости потенциальной энергии системы (на атом), деформации и напряжений для $E = 0,1$ эВ и $a = 0,3165$ нм

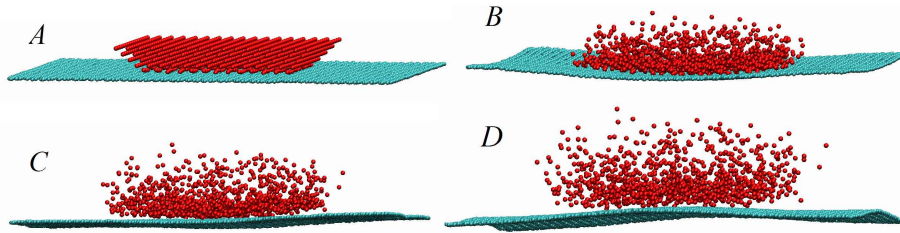


Рис. 4 – Мгновенные снимки системы, отвечающие отмеченным на рис. 3 точкам

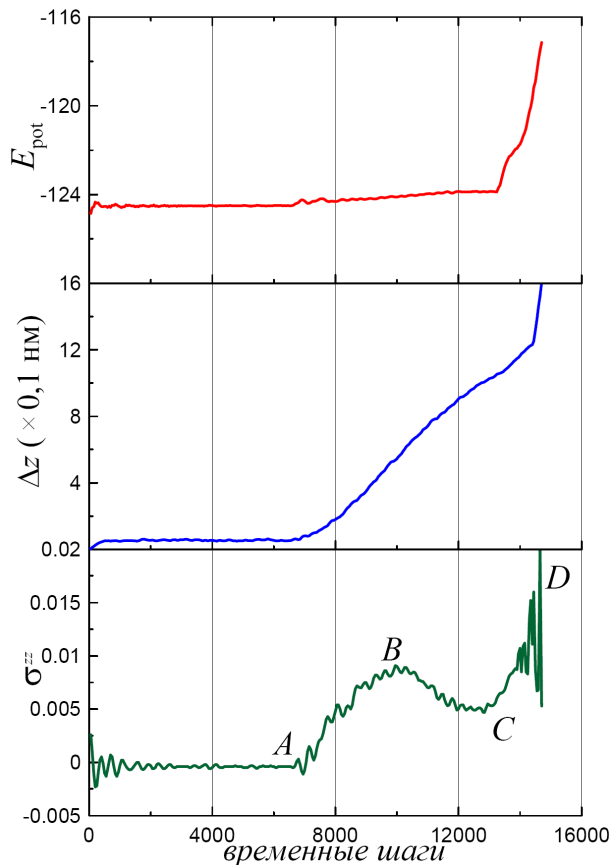


Рис. 5 – Временные зависимости потенциальной энергии системы (на атом), деформации и напряжений для $E = 0,5$ эВ и $a = 0,3165$ нм

остальных значений кинетической энергии пучка, представленных на рис. 2.

Отметим, что однозначно сравнить результаты данной работы с полученными в [9, 10] не представляется возможным. Это связано с тем, что в [9, 10] вследствие использования потенциала Бреннера для налетающих частиц возможно протекание химических реакций и поглощение изотопов водорода образцом. Это происходит в интервале энергий частиц 0,5 - 15 эВ [9]. Для энергий, больших 15 эВ, частицы

Спадание напряжений на участке BC объясняется их перераспределением по всей пластинке. Отметим, что в отличие от предыдущего случая, здесь наблюдается постоянное увеличение деформации, что указывает на продавливание образца пучком в одном направлении (вниз). После достижения минимума напряжений в точке C, пластинка начинает двигаться вниз как целое, а напряжения возрастают, достигая значения, достаточного для разрыва межатомных связей. Происходит разрушение образца, проявляющееся в скачках напряжений, а также в резком увеличении Δz и E_{pot} . Очевидно отличие от предыдущего случая, где наблюдалось отсутствие значительных изменений в потенциальной энергии (см. рис. 3), а также имеет место проникновение частиц за пластинку до ее разрушения, что видно из рис. 6C.

Подобным же образом можно объяснить графики для

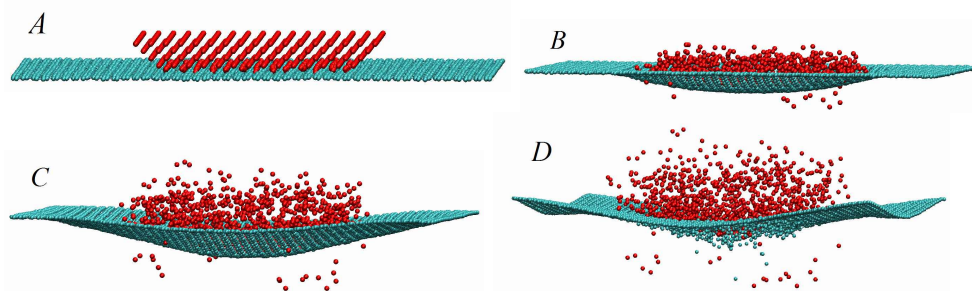


Рис. 6 – Мгновенные снимки системы, отвечающие отмеченным на рис. 5 точкам

проникают за пластинку графена, не поглощаясь и не разрушая образец [9]. Более низкие энергии налетающих частиц, при которых разрушается графен, полученные в данной работе, можно объяснить использованием выражения из первой версии потенциала Бреннера для члена кратности \bar{V}_{ij} в (1), что могло привести к более слабым ковалентным связям в образце.

Временные зависимости напряжений σ^{zz} и деформации Δz для $a = 0,2374$ нм имеют практически такой же вид, и, следовательно, такое же объяснение, что и для $a = 0,3165$ нм (рис. 7). Можно лишь отметить, что большая плотность пучка способствует большему максимальному натяжению пластинки, что видно из графиков для деформации.

На рис. 8 даны атомные конфигурации системы для $a = 0,2374$ нм и $E = 0,5$ эВ в разные моменты времени. Видно, что как и в предыдущем случае имеет место проникновение частиц за образец до его разрушения. Также можно заметить, что большая плотность пучка приводит к более интенсивному разрушению, что также отражается в выраженных скачках напряжений на соответствующей зависимости (рис. 7 слева).

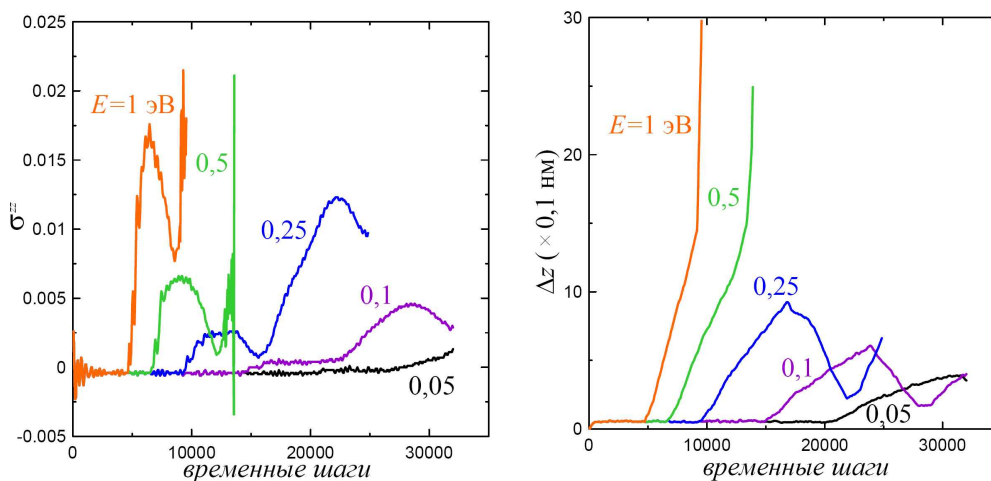


Рис. 7 – Временные зависимости напряжений (слева) и деформации (справа) графеновой пластинки для $a = 0,2374$ нм в условиях микроканонического ансамбля

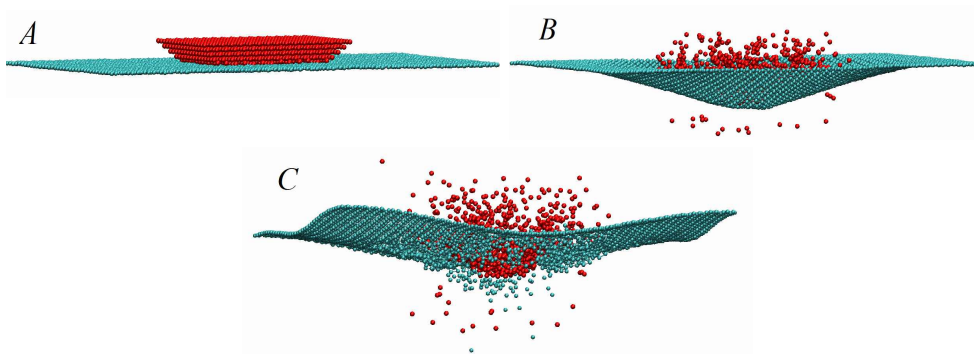


Рис. 8 – Мгновенные снимки системы для $E = 0,5$ эВ и $a = 0,2374$ нм: А – 6750, В – 12250, С – 14450 временных шагов

Графики зависимостей напряжений σ^{zz} и деформации Δz от времени для $a = 0,1582$ нм (рис. 9) аналогичны предыдущим двум случаям. Видны еще большие скачки напряжений, указывающие на более интенсивное разрушение, что также можно увидеть из рис. 10.

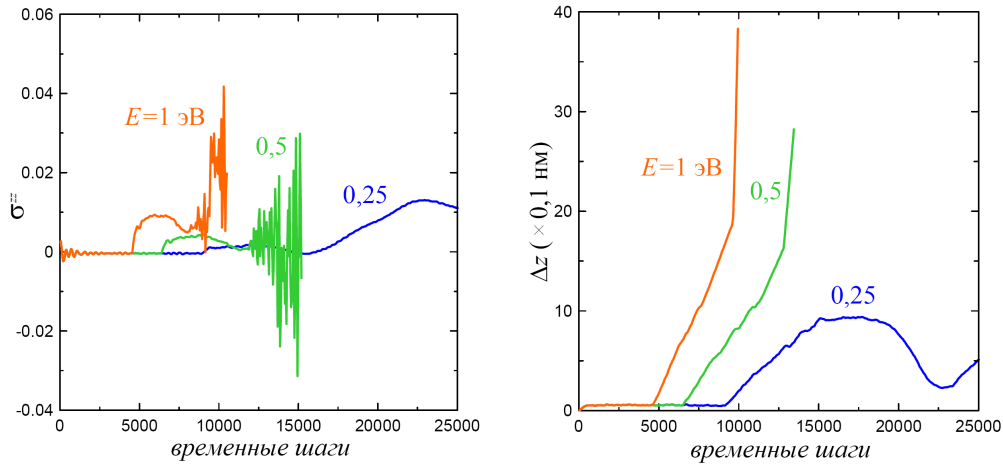


Рис. 9 – Временные зависимости напряжений (слева) и деформации (справа) графеновой пластинки для $a = 0,1582$ нм

3.2 Канонический ансамбль

До сих пор рассматривались условия микроканонического статистического ансамбля, т. е. фиксированными были полная энергия системы E_{tot} , объем V и число частиц N . На практике система фактически всегда является незамкнутой, и имеется отвод тепла из нее. Охлаждение в нашем случае усиливается малой толщиной объекта [20]. Для учета указанных фактов было проведено несколько компьютерных экспериментов, в которых охлаждение пластинки графена обеспечивалось использованием термостата Берендсена [15].

Временные зависимости напряжений и деформации при $E = 0,5$ эВ (для $E = 1$ эВ получились аналогичные результаты, которые здесь не приводятся), представленные на рис. 11, имеют качественно одинаковый вид для всех трех значений плотности частиц в пучке.

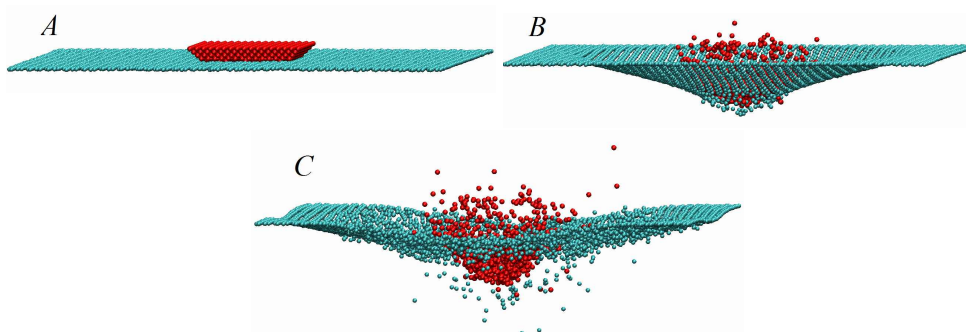


Рис. 10 – Мгновенные снимки системы для $E = 0,5$ эВ и $a = 0,1582$ нм: A – 6750, B – 12250, C – 14450 временных шагов

Наличие термостата обуславливает то, что для энергии, при которой происходила деструкция образца в условиях микроканонического ансамбля, теперь имеет место упругое рассеяние частиц, что также можно видеть из рис. 12, где представлены мгновенные снимки системы для $a = 0,3165$ нм. Отсутствие разрушения образца также отражается формой кривых, которая для напряжений имеет два максимума, а для деформаций – один, что аналогично рассмотренному в предыдущем пункте случаю малых энергий частиц. Поэтому объяснение поведения системы также аналогично рассмотренному в п. 2.1.

Кратко проанализируем поведение системы для различных плотностей частиц в пучке. Увеличение плотности частиц (или уменьшение a) обуславливает сужение первого максимума напряжений, уменьшение его высоты и углубление минимума, следующего за ним. Для меньших a наблюдается более высокий второй максимум напряжений, что указывает на увеличение напряжений с повышением плотности частиц. При этом имеет место большее «продавливание» образца, что проявляется в увеличении максимальной деформации с уменьшением a на рис. 11 справа.

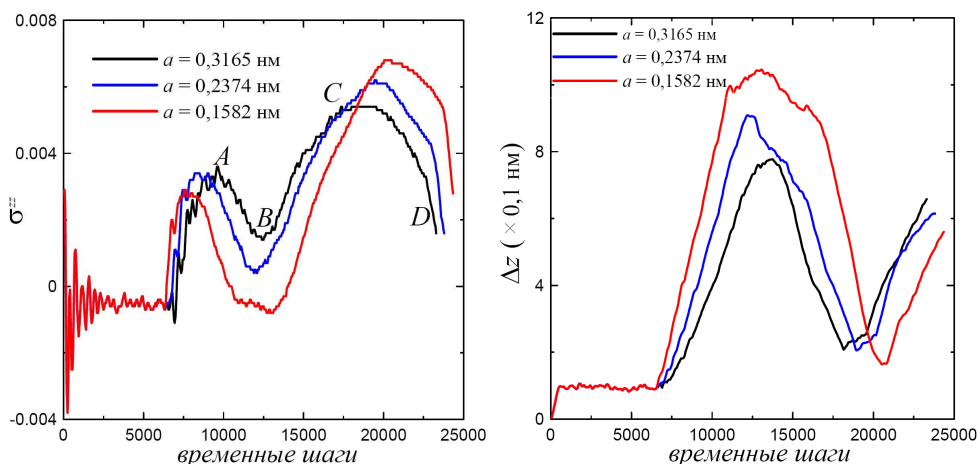


Рис. 11 – Временные зависимости напряжений (слева) и деформации (справа) графеновой пластинки при энергии частиц $E = 0,5$ эВ для различных плотностей пучка в условиях канонического ансамбля

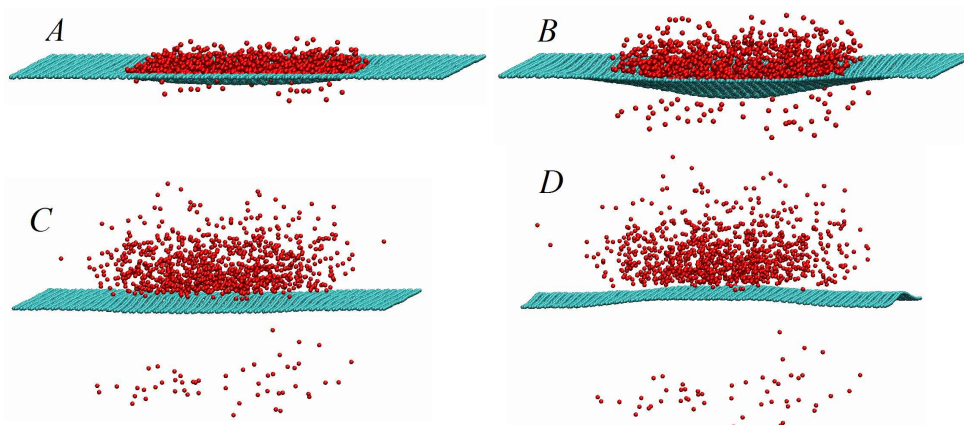


Рис. 12 – Мгновенные снимки системы, отвечающие отмеченным на рис. 11 (слева) точкам

Таким образом, соединение графеновой пластинки с термостатом способствует тому, что образец начинает выдерживать более высокие энергии пучка, не разрушаясь. Другими словами, отвод тепла смещает величину энергии, при которой разрушается образец, в сторону больших значений.

4. ВЫВОДЫ

Проведено моделирование методом классической молекулярной динамики процесса облучения графеновой пластинки потоком атомов углерода. Получены следующие основные результаты:

- в условиях микроканонического ансамбля существует значение энергии частиц, равное приблизительно 0,5 эВ, превышение которого вызывает разрушение образца, проявляющееся в скачках напряжений и в резком возрастании деформации и потенциальной энергии системы. Для меньших a наблюдается более интенсивное разрушение;
- временные зависимости напряжений и деформаций в NVE условиях при низких энергиях имеют качественно одинаковый вид для всех плотностей пучка. Количественно большие плотности обуславливают большую деформацию образца;
- отвод тепла из системы вызывает смещение в сторону больших значений величины энергии пучка, при которой происходит разрушение образца;
- плотность пучка при наличии термостата качественно не влияет на вид временных зависимостей напряжений и деформации. Увеличение плотности пучка обуславливает рост максимального значения напряжений в пластинке. При этом имеет место большее «продавливание» образца, что проявляется в увеличении максимальной деформации.

Выражаем благодарность Государственному фонду фундаментальных исследований Украины и Российскому фонду фундаментальных исследований (грант Ф28/443-2009) за поддержку работы.

NUMERICAL INVESTIGATION OF THE BOMBARDMENT OF A GRAPHENE SHEET BY A BEAM OF CARBON ATOMS

O.V. Khomenko, M.V. Prodanov, Yu.V. Scherbak

Sumy State University,
2, Rimsky-Korsakov Str., 40007, Sumy, Ukraine
E-mail: khom@mss.sumdu.edu.ua, prodk@rambler.ru

Classical molecular dynamics simulations of the bombardment of a graphene sheet by a beam of carbon atoms are carried out. Covalent bonds in the bombarded sample are described by the Brenner potential. The approximation of elastic balls interacting with graphene via the Lennard-Jones potential is used for particles in the beam. The influence of the energy and density of irradiating carbon atoms and of the presence of a thermostat on physical processes occurring during the collisions with the sample is investigated. Energy values of the particles in the beam, which are enough for the sample destruction, are defined.

Keywords: GRAPHENE, BOMBARDMENT, FRACTURE, THERMOSTAT, MOLECULAR DYNAMICS.

ЧИСЕЛЬНЕ ДОСЛІДЖЕННЯ ОПРОМІНЕННЯ ПЛАСТИНКИ ГРАФЕНУ ПУЧКОМ АТОМІВ ВУГЛЕЦЮ

О.В. Хоменко, М.В. Проданов, Ю.В. Щербак

Сумський державний університет,
вул. Римського-Корсакова, 2, 40007, Суми, Україна
E-mail: khom@mss.sumdu.edu.ua, prodk@rambler.ru

Проведено моделювання методом класичної молекулярної динаміки процесу опромінення пластинки графену пучком атомів вуглецю. Ковалентні зв'язки у зразку, що опромінюється, описуються потенціалом Бреннера. Для частинок в пучку використано наближення пружних шарів, які взаємодіють із графеном через потенціал Леннарда – Джонса. Досліджено вплив енергії і густини атомів вуглецю, що налітають, а також наявності термостату на фізичні процеси, які мають місце при зіткненні із зразком. Визначено значення енергії частинок у пучку, за яких відбувається руйнування пластинки графену.

Ключові слова: ГРАФЕН, ОПРОМІНЕННЯ, РУЙНУВАННЯ, ТЕРМОСТАТ, МОЛЕКУЛЯРНА ДИНАМІКА.

СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. K.S. Novoselov, A.K. Geim, S.V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S.V. Dubonos, I.V. Grigorieva, A.A. Firsov, *Science* **306**, 666 (2004).
2. K.S. Novoselov, A.K. Geim, S.V. Morozov, D. Jiang., M.I. Katsnelson, I.V. Grigorieva, S.V. Dubonos, A.A. Firsov, *Nature* **438**, 197 (2005).
3. Y. Zhang, J.W. Tan, H.L. Stormer, P. Kim, *Nature* **438**, 201 (2005).
4. A.H. Castro Neto, F. Guinea, N.M.R. Peres, K.S. Novoselov, A.K. Geim, *Rev. Mod. Phys.* **81**, 109 (2009).
5. K.S. Novoselov, D. Jiang, F. Schedin, T.J. Booth, V.V. Khotkevich, S.V. Morozov, A.K. Geim, *P. Natl Acad. Sci. USA* **102**, 10451 (2005).
6. A.K. Geim, K.S. Novoselov, *Nat. Mater.* **6**, 183 (2007).
7. J.C. Meyer, A.K. Geim, M.I. Katsnelson, K.S. Novoselov, T.J. Booth, S. Roth, *Nature* **447**, 60 (2007).
8. M.H. Gass, U. Bangert, A.L. Bleloch, P. Wang, R.R. Nair, A.K. Geim, *Nat. Nanotechnol.* **3**, 676 (2008).

9. H. Nakamura, A. Takayama, A. Ito, *Contrib. Plasm. Phys.* **48**, 265 (2008).
10. A. Ito, H. Nakamura, *Thin Solid Films* **516** No19, 6553 (2008).
11. W. Humphrey, A. Dalke, K. Schulten, *J. Mol. Graphics* **14** No1, 33 (1996).
12. S.J. Heo, S.B. Sinnott, D.W. Brenner, J.A. Harrison, *Nanotribology and nanomechanics*, 623 (Berlin: Springer: 2005).
13. M.P. Allen, D.J. Tildesley, *Computer Simulation of Liquids* (Oxford: Clarendon Press: 1995).
14. D.C. Rapaport, *The art of molecular dynamics simulation*, 2nd ed. (Cambridge: Cambridge University Press: 2004).
15. M. Griebel, S. Knapek, G. Zumbusch, *Numerical simulation in molecular dynamics* (Berlin, Heidelberg: Springer: 2007).
16. D.W. Brenner, *Phys. Rev. B* **42** No15, 9458 (1990).
17. D.W. Brenner, O.A. Shenderova, J.A. Harrison, S.J. Stuart, B. Ni, S.B. Sinnott, *J. Phys.-Condens. Mat.* **14**, 783 (2002).
18. A. Caglar, M. Griebel, *Molecular dynamics on parallel computers*, 1 (Julich: World Scientific: 1999).
19. J.A. Harrison, D.W. Brenner, C.T. White, R.J. Colton, *Thin Solid Films* **206**, 213 (1991).
20. R.P. Feynman, *Eng. Sci.* **23**, 22 (1960) (См. <http://www.zyvex.com/nanotech/feynman.html>).