

## Stable carbon structures: fullerene + $C_n$ + graphene

where  $C_n$  is a liner cluster

V. G. Stelmakh, I. D. Yadgarov<sup>†</sup>

<sup>†</sup>ishmuminyadgarov@gmail.com

Institute of Ion-Plasma and Laser Technologies n. a. U. A. Arifov, Academy of Sciences of Uzbekistan,  
33 Durmon Yuli St., Tashkent, 100125, Uzbekistan

Structures formed by fullerene and graphene, interconnected by either a linear carbon cluster with the number of atoms from 2 to 5, or only by one carbon atom, have been studied by the methods of computational simulation. A simple covalent interaction of fullerene with graphene with no binding atoms and clusters has been considered and characteristics of non-covalent interaction of fullerene with graphene have been calculated. Stability of the fullerene-cluster-graphene structures is defined by covalent bonds of carbon atoms, which we set within the Brenner potential of the second generation (REBO), and by non-covalent interaction of fullerene with graphene, which is set by the Lennard-Jones interatomic potential. Fullerene in the structure of the fullerene-cluster-graphene is well fixed to a specific place owing to covalent bonds; this feature of the structures favorably differs from the case of the easily moving fullerene over the graphene surface, if it is necessary to rigidly fix fullerene on graphene. It is shown that good binding of fullerene with graphene is achieved by carbon clusters, and the best binding, if the cluster is diatomic, binding by one carbon atom also leads to a stable structure. A simple covalent bonding of fullerene with graphene is less stable. For the models of fullerene-cluster-graphene to be obtained, main computational simulation is performed step-by-step, starting with the models of free carbon linear clusters, defect-free fullerene and ideal graphene, and then simulation of fullerene binding with clusters is carried out; further binding of fullerene-cluster with graphene is simulated with taking into account non-covalent interaction of fullerene with graphene. The comparison of the calculated values of the binding energy has demonstrated which structures are more stable and how non-covalent interaction influences stability. By analyzing the obtained structures of fullerene-cluster-graphene, changes in the shape of fullerene and the distance of fullerene to graphene in these structures were determined.

**Keywords:** fullerene, graphene, cluster, carbon structure.

УДК: 541.183

## Стабильные углеродные структуры: фуллерен + $C_n$ + графен,

где  $C_n$  — линейный кластер

Стельмах В. Г., Ядгаров И. Д.<sup>†</sup>

Институт ионно-плазменных и лазерных технологий им. У.А. Арифова УзАН,  
ул. Дурмон йули, 33, Ташкент, 100125, Узбекистан

В данной работе методами компьютерного моделирования исследуются структуры, образованные фуллереном и графеном, которые соединены между собой либо линейным углеродным кластером с количеством атомов от 2 до 5, либо только одним атомом углерода. Для сравнения результатов также было рассмотрено простое ковалентное взаимодействие фуллерена с графеном без связывающих атомов и кластеров и были рассчитаны характеристики только нековалентного взаимодействия фуллерена с графеном. Стабильность структур фуллерен-кластер-графен определяется ковалентными связями атомов углерода, которые мы задаем в рамках потенциала Бреннера второго поколения (REBO), и нековалентным взаимодействием фуллерена с графеном, которое задаем межатомным потенциалом Леннарда-Джонса. Фуллерен в структуре фуллерен-кластер-графен хорошо закреплен к определенному месту графена благодаря ковалентным связям, и такое свойство структуры выгодно отличает от случая легко перемещающегося фуллерена по поверхности графена, если требуется жестко фиксировать фуллерен на графене. Показано, что хорошее связывание фуллерена с графеном осуществляется посредством кластеров

углерода, и наилучшее связывание, если кластер двухатомный, связывание одним атомом углерода также приводит к стабильной структуре. Менее стабильным является простое ковалентное связывание фуллерена с графеном. Для получения моделей фуллерен-кластер-графен поэтапно проводилось основное компьютерное моделирование, начиная от создания моделей свободных углеродных линейных кластеров, бездефектного фуллерена и идеального графена, далее осуществлялось моделирование соединения фуллерена с кластерами, затем моделировалось соединение структур фуллерен-кластер к графену с учетом нековалентного взаимодействия фуллерена с графеном. Сравнение вычисленных энергий связывания показало, какие структуры более стабильные и как влияет нековалентное взаимодействие на стабильность. Анализ полученных структур фуллерен-кластер-графен определил изменение формы фуллерена и расстояние фуллерена до графена в этих структурах.

**Ключевые слова:** фуллерен, графен, кластер, углеродная структура.

## 1. Введение

Взаимодействие фуллерена  $C_{60}$  и его производных с графеном вызывает большой интерес и этому явлению посвящено множество работ. Нековалентное взаимодействие фуллерена с графеном рассматривалось в рамках классической молекулярной динамики, например, как в работе [1], методами так называемых первопринципных (*ab-init*) подходов [2]. В работе [3] с использованием парного потенциала Леннарда-Джонса выведены формулы для потенциала и силы нековалентного взаимодействия молекулы фуллерена с идеальным бесконечным листом графена, а работа [4] предоставляет экспериментальные данные о взаимодействии фуллерена с графеном. Также существует ряд работ, в которых рассмотрено нековалентное взаимодействие производных фуллерена  $C_{60}$  с графеном, например, как в [5], или рассмотрено получение химическим синтезом ковалентного связывания фуллерена с графеном посредством органических молекул, например, как в [6]. В обзорной работе [7] рассмотрено большое количество структур, содержащих фуллерен  $C_{60}$  и графен, которые разделены на две группы: нековалентные и ковалентные гибриды. Следует отметить, что наличие только нековалентного взаимодействия между фуллереном и графеном приводит к тому, что фуллерен имеет возможность перемещаться по поверхности графена [1,8]. Фиксировать положение фуллерена на графене можно с помощью небольших углеродных кластеров  $C_n$ , которые, ковалентно связываясь как фуллереном, так и с графеном, могут создать устойчивую структуру «фуллерен +  $C_n$  + графен», пример такой структуры можно найти в [6]. В работе [9] было показано, что среди малых углеродных кластеров наиболее устойчивыми являются линейные кластера, поэтому в нашей работе мы выбрали линейные углеродные кластеры с количеством атомов меньше или равно 5 для моделирования структур «фуллерен +  $C_n$  + графен» и исследования их свойств.

## 2. Детали моделирования

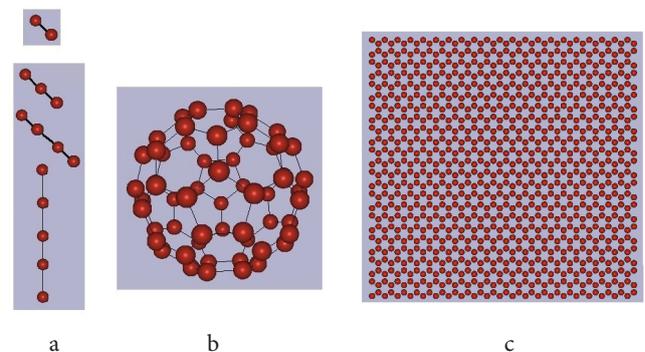
Для осуществления компьютерного моделирования использовалась программа Brenner's Code [10], которая реализует потенциал REBO [11], хорошо описывающий углеродные структуры. Эта программа, использованная нами в работе [12] для моделирования рассеяния

атомов углерода на графене, а в [13] для моделирования взаимодействия круговых углеродных кластеров с нанографеном, также позволяет включить межатомное взаимодействие Леннарда-Джонса, которое необходимо для моделирования нековалентного взаимодействия углеродных структур.

В настоящей работе основной процесс компьютерного моделирования углеродных структур проходил в 3 этапа с использованием метода минимизации энергии [13,14].

На первом этапе моделирования были построены компьютерные модели невзаимодействующих углеродных структур: линейных кластеров  $C_n$  ( $1 < n \leq 5$ ), бездефектного фуллерена  $C_{60}$ , который имеет 60 атомов углерода, и идеального графена, которые показаны на Рис. 1. В модели бездефектного фуллерена все атомы находятся на расстоянии  $R=3.6 \text{ \AA}$  от центра фуллерена, который считаем радиусом бездефектного невзаимодействующего фуллерена. Компьютерная модель идеального графена определялась посредством прямоугольного 1008-атомного участка графена с наложением периодических условий на граничные атомы.

На втором этапе осуществлялась адсорбция линейных углеродных кластеров  $C_n$  ( $1 < n \leq 5$ ) на фуллерен. Первоначальное расположение атомов кластера задавалось двумя способами. В первом способе все атомы кластера и один из атомов фуллерена лежат на одной прямой, проходящей через центр фуллерена. В результате получается структура, которую мы обозначим как « $C_{60} - C_n$ », где знак «--» означает, что один из крайних атомов кластера связан с одним атомом фуллерена посредством одной простой ковалентной



**Рис. 1.** Линейные углеродные кластеры  $C_n$  ( $1 < n \leq 5$ ) (a), бездефектный фуллерен  $C_{60}$  (b), 1008-атомный прямоугольный участок графена (c).

**Fig. 1.** Linear carbon clusters  $C_n$  ( $1 < n \leq 5$ ) (a), non-defect fullerene  $C_{60}$  (b), 1008-atomic rectangular part of graphene (c).

связью. Во втором способе все атомы кластера лежат на одной прямой, проходящей посередине отрезка, соединяющего два атома фуллерена, и через центр фуллерена, в результате получается структура, которую мы обозначим как « $C_{60} > C_n$ », где знак «>» означает, что один из крайних атомов кластера связан с двумя атомами фуллерена посредством простых ковалентных связей. Отметим также, что в этих двух способах линейные кластеры  $C_n$  перпендикулярны поверхности фуллерена. Одиночные атомы углерода также присоединялись к фуллерену по приведенным выше способам, полученные в результате структуры условно обозначаем как « $C_{60} -- C_1$ » и « $C_{60} > C_1$ ». Визуальные представления структур « $C_{60} -- C_n$ » и « $C_{60} > C_n$ » ( $1 \leq n \leq 5$ ) показаны на Рис. S1 (дополнительный материал). В дальнейшем условимся, что знак «+» в обозначении углеродных структур заменяет знаки «--» и «>», если не нужно различать способы ковалентного соединения, т.е. « $C_{60} + C_n$ » будет означать « $C_{60} -- C_n$ » или « $C_{60} > C_n$ ».

Энергия связывания  $E_+^{II}(n)$  кластера  $C_n$  с фуллереном определялась также как и в [15]:

$$E_+^{II}(n) = -[E^{II}(C_{60} + C_n) - E^I(C_{60}) - E^I(C_n)], \quad (1)$$

где  $E^I(C_{60})$  и  $E^I(C_n)$  — найденные на первом этапе моделирования тотальные энергии полностью релаксированных невзаимодействующих линейного кластера и бездефектного фуллерена, соответственно,  $E^{II}(C_{60} + C_n)$  — тотальная энергия полностью релаксированной структуры « $C_{60} + C_n$ », найденная на этом втором этапе моделирования. Знак «+» в формуле (1) условно означает знак «--» или знак «>», как оговорено выше.

В результате ковалентного взаимодействия с кластером  $C_n$  не все атомы фуллерена находятся на расстоянии  $R = 3.6 \text{ \AA}$  от центра фуллерена, что указывает на изменение формы взаимодействующего фуллерена. Чтобы оценить изменение формы взаимодействующего фуллерена были найдены расстояния каждого его атома до его центра масс и среди этих расстояний выбраны наибольшее  $R_{\max}$  и наименьшее  $R_{\min}$  расстояния. Значение  $R_{\max}/R_{\min}$  дает оценку изменения формы фуллерена. Значения энергий связывания кластера  $C_n$  с фуллереном и  $R_{\max}/R_{\min}$ , полученные на этом этапе моделирования, приведены в Табл. S1 (дополнительный материал).

На третьем этапе осуществлялась адсорбция структур « $C_{60} + C_n$ » ( $1 \leq n \leq 5$ ) на графен для получения устойчивых структур « $C_{60} + C_n + \text{graphene}$ », с учетом важного условия устойчивости: участие всех валентных электронов атомов кластера  $C_n$  в ковалентных связях.

Первоначальное расположение атомов структур « $C_{60} -- C_m$ » ( $m = 2, 4$ ) задавалось так, чтобы атомы кластера  $C_m$  были над одним из атомов графена и перпендикулярно к плоскости графена. В результате получалась структура « $C_{60} -- C_m -- \text{graphene}$ » ( $m = 2, 4$ ), в которой кластер  $C_m$  был перпендикулярен к поверхностям фуллерена и графена, см. фигуры (n) и (q) на Рис. S1 (дополнительный материал). Отметим, что все валентные электроны атомов кластера  $C_m$  в структуре « $C_{60} -- C_m -- \text{graphene}$ » ( $m = 2, 4$ ) участвуют в ковалентных связях, что очевидно, если подробнее записать эти структуры следующим образом « $C_{60} -- C \equiv C -- \text{graphene}$ » и « $C_{60} -- C \equiv C -- C \equiv C -- \text{graphene}$ »,

где знак « $\equiv$ » означает тройную ковалентную связь. Структуры « $C_{60} -- C_k -- \text{graphene}$ » ( $k = 1, 3, 5$ ) не являются стабильными из-за невозможности участия всех валентных электронов атомов кластера  $C_k$  в ковалентных связях и поэтому не рассматриваются.

Для структур « $C_{60} > C_n$ » ( $1 \leq n \leq 5$ ) первоначальное расположение атомов задавалось так, чтобы атомы кластера  $C_n$  были на прямой, проходящей посередине между двумя соседними атомами графена и перпендикулярно к плоскости графена. В результате получались структуры « $C_{60} > C_n < \text{graphene}$ » ( $1 \leq n \leq 5$ ), показанные на Рис. S1 (дополнительный материал) как фигуры (l), (m), (o), (p) и (r). В структурах « $C_{60} > C_n < \text{graphene}$ » все валентные электроны атомов кластера  $C_n$  участвуют в ковалентных связях, что очевидно из более подробного описания этих структур: « $C_{60} > C_1 < \text{graphene}$ », « $C_{60} > C = C < \text{graphene}$ », « $C_{60} > C = C = C < \text{graphene}$ », « $C_{60} > C = C = C = C < \text{graphene}$ », где знак « $=$ » означает двойную ковалентную связь, а знак « $<$ » означает, что крайний атом кластера связан с двумя атомами графена посредством простых ковалентных связей.

Для расчета энергии  $E_{f-g}$  нековалентного взаимодействия между фуллереном и графеном был использован потенциал Леннарда-Джонса, задаваемый между атомами фуллерена и атомами графена, с кубическим сплайном для обнуления этого потенциала на расстояниях ковалентного взаимодействия атомов углерода:

$$U(r) = \begin{cases} D \cdot \left[ \left( \frac{r_0}{r} \right)^{12} - 2 \cdot \left( \frac{r_0}{r} \right)^6 \right], & r > 0.8463 \cdot r_0 \\ K_2 (r - R_{\text{cov}})^2 + K_3 (r - R_{\text{cov}})^3, & 0.8463 \cdot r_0 > r > R_{\text{cov}} \\ 0, & r < R_{\text{cov}}. \end{cases} \quad (2)$$

В формуле (2)  $D = 3.202 \text{ мэВ}$  и  $r_0 = 3.985 \text{ \AA}$  — параметры взаимодействия Леннарда-Джонса для двух атомов углерода, использованные в аналитических расчетах в [3],  $r$  — расстояние между одним из атомов фуллерена и одним из атомов графена,  $R_{\text{cov}} = 2 \text{ \AA}$  — расстояние ковалентного взаимодействия между двумя атомами углерода [11],  $K_2 = 4.8785 \cdot 10^{-2}$  и  $K_3 = -3.3121 \cdot 10^{-2}$  — коэффициенты кубического сплайна.

После задания первоначального расположения атомов углеродных структур компьютерная модель структуры « $C_{60} + C_n + \text{graphene}$ » релаксировалась методом минимизации энергии в рамках потенциала REBO и межатомного потенциала (2). Энергия связывания  $E_+^{III}(n)$  фуллерена с графеном определялась как

$$E_+^{III}(n) = -[E^{III}(C_{60} + C_n + \text{graphene}) - E^I(C_{60}) - E^I(C_n) - E^I(\text{graphene})], \quad (3)$$

где  $E^I(C_{60})$ ,  $E^I(C_n)$ , и  $E^I(\text{graphene})$  — найденные на первом этапе моделирования тотальные энергии фуллерена, линейных кластеров и графена, соответственно,  $E^{III}(C_{60} + C_n + \text{graphene})$  — тотальная энергия полностью релаксированной структуры « $C_{60} + C_n + \text{graphene}$ », найденная на этом третьем этапе моделирования. Знак «+» в формуле (3) имеет то же обозначение, что и оговорено выше, с тем лишь дополнением, что после « $C_n$ » ставится при необходимости знак «<».

После основного процесса компьютерного моделирования были дополнительно рассмотрены два варианта взаимодействия фуллерена с графеном при отсутствии «связывающего» кластера  $C_n$ : первый вариант — фуллерен связывается с графеном только одной простой ковалентной связью, второй — между фуллереном и графеном существует только нековалентное взаимодействие.

В первом варианте получается структура, которую условно обозначим как « $C_{60}$ --graphene», где «--» указывает на то, что есть одна ковалентная связь между фуллереном и графеном, см. фигуру (k) на Рис. S1 (дополнительный материал).

Во втором варианте между фуллереном и графеном существует только нековалентное взаимодействие, которое моделировалось по схеме, близкой к той, что приведена в работе [1]: перебор разных пространственных взаимных расположений бездефектного фуллерена и идеального графена и нахождение в рамках межатомного потенциала (2) соответствующего набора энергий  $E_{f-g}(R_{f-g})$  нековалентного взаимодействия фуллерена с графеном, зависящих от расстояния  $R_{f-g}$  между фуллереном и графеном. Расстояние  $R_{f-g}$  определяется как расстояние от точки на фуллерене  $C_{60}$ , ближайшей к графену, до плоскости графена. Из этого набора энергий выбиралось наименьшее значение, которое обозначим как  $E_{f-g}^{min}$ . Модуль этого наименьшего значения, т.е. величина  $|E_{f-g}^{min}|$ , соответствует термину «глубина потенциальной ямы» взаимодействия фуллерен-графен из работы [3].

### 3. Результаты и обсуждение

Сначала представим наши результаты моделирования нековалентного взаимодействия бездефектного фуллерена с идеальным графеном. Полученный набор энергий нековалентного взаимодействия  $E_{f-g}(R_{f-g})$  фуллерена с графеном дает график зависимости этой энергии от расстояния  $R_{f-g}$  (см. Рис. 2), глубину

потенциальной ямы взаимодействия  $|E_{f-g}^{min}| = 0.867$  эВ и соответствующее этой глубине расстояние  $R_{eq1} = 2.9$  Å, которое называют равновесным и отсчитывают от точки на фуллерене  $C_{60}$ , ближайшей к графену, до плоскости графена.

В работе [3] авторы аналитически получили следующие величины  $|E_{f-g}^{min}| = 0.957$  эВ,  $R_{eq1} = 3.05$  Å, в работе [1] методами молекулярной динамики найдено, что  $|E_{f-g}^{min}| = 0.73$  эВ,  $R_{eq1} = 2.78$  Å, а в работе [4] экспериментально получено  $|E_{f-g}^{min}| = 0.85$  эВ,  $R_{eq1} = 2.9$  Å.

Отметим, что значительная, почти 1 эВ, глубина потенциальной ямы не закрепляет фуллерен к определенному месту на графене: фуллерен может свободно перемещаться по поверхности графена [1, 8]. Ковалентное связывание фуллерена с графеном закрепляет фуллерен на графене, причем большая энергия связывания фуллерена с графеном означает большую пространственную стабильность. Характеристики ковалентного связывания фуллерена с графеном, в том числе посредством атома и линейных кластеров углерода приведены в Табл. 1.

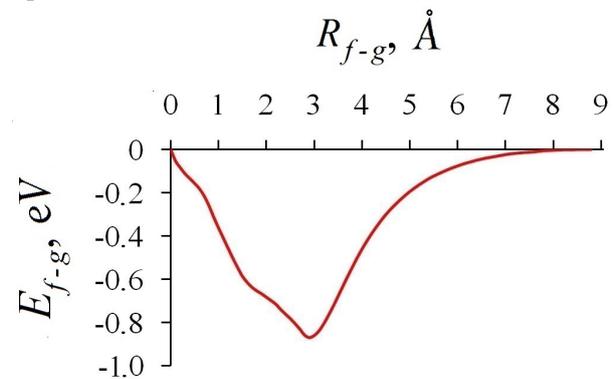


Рис. 2. Зависимость энергии  $E_{f-g}$  нековалентного взаимодействия фуллерен-графен от расстояния  $R_{f-g}$  между бездефектным фуллереном и идеальным графеном.

Fig. 2. The dependence of the energy  $E_{f-g}$  of non-covalent fullerene-graphene interaction on the distance  $R_{f-g}$  between non-defect fullerene and ideal graphene.

Табл. 1. Характеристики структур « $C_{60}$ --graphene» и « $C_{60} + C_n +$  graphene».

Table 1. Characteristics of the structures “ $C_{60}$ --graphene” and “ $C_{60} + C_n +$  graphene”.

Условное обозначение структуры Symbols of structures	Энергия связывания фуллерена с графеном, эВ Binding energy of fullerene with graphene, eV	Расстояние фуллерена до графена, Å Distance of fullerene to graphene, Å	Отношение наибольшего расстояния $R_{max}$ атомов фуллерена до его центра к наименьшему $R_{min}$ The ratio of the greatest distance $R_{max}$ of fullerene atoms to its center to the smallest $R_{min}$	Энергия нековалентного взаимодействия фуллерена с графеном, эВ Energy of non-covalent interaction of fullerene with graphene, eV
$C_{60}$ --graphene	1.2161	2.071	1.107	-0.7263
$C_{60} > C_1 <$ graphene	3.7564	3.348	1.086	-0.6397
$C_{60} > C_2 <$ graphene	3.8576	4.924	1.089	-0.2421
$C_{60}$ -- $C_2$ --graphene	3.6765	4.872	1.103	-0.1726
$C_{60} > C_3 <$ graphene	3.1543	6.199	1.090	-0.0774
$C_{60} > C_4 <$ graphene	3.0949	7.693	1.091	-0.0125
$C_{60}$ -- $C_4$ --graphene	2.2179	7.753	1.106	-0.0054
$C_{60} > C_5 <$ graphene	3.0823	8.915	1.091	-0.0007

Из Табл. 1 следует, что наиболее стабильные структуры это «C<sub>60</sub>+C<sub>2</sub>+graphene» и «C<sub>60</sub>>C<sub>1</sub><graphene», так как у них наибольшие энергии связывания; для последней структуры ощутимый вклад в энергию связывания вносит нековалентное взаимодействие фуллерена с графеном. Остальные структуры «C<sub>60</sub>+C<sub>n</sub>+graphene» тоже достаточно стабильны. Структура «C<sub>60</sub>--graphene» наименее стабильна, но вклад нековалентного взаимодействия фуллерена с графеном в энергию связывания здесь наибольший. Отметим, что расстояние R<sub>f-g</sub> от фуллерена до графена в структурах «C<sub>60</sub>+C<sub>n</sub>+graphene» почти линейно увеличивается с увеличением количества n атомов в кластере C<sub>n</sub>, зависимость R<sub>f-g</sub> от n можно выразить соотношением R<sub>f-g</sub>(n) = 1.398 · n + 2.047, 1 < n ≤ 5, относительная ошибка которого не больше 3%. Также следует отметить, что относительное изменение формы фуллерена, определяемое как относительное изменение его радиуса (R<sub>max</sub> - R<sub>min</sub>)/R<sub>max</sub>, равно приблизительно 10%.

#### 4. Заключение

В данной работе методом минимизации энергии в рамках потенциалов REBO и Леннарда-Джонса выполнено теоретическое исследование свойств стабильных углеродных структур «фуллерен + C<sub>n</sub> + графен», где C<sub>n</sub> — малый линейный кластер, играющий роль «мостика» между фуллереном и графеном. В процессе моделирования отдельно учитывалось влияние нековалентного взаимодействия фуллерена с графеном на стабильность, которое оказалось незначительным в случае соединения фуллерена и графена с помощью кластеров, так как благодаря этим кластерам фуллерен отстоит от графена на расстояниях больших, чем равновесное расстояние нековалентного взаимодействия фуллерена с графеном. Структуры, в которых фуллерен соединяется с графеном посредством одного атома углерода или углеродного димера оказались наиболее стабильными, соединение фуллерена с графеном посредством линейных кластеров C<sub>m</sub>, m = 3, 4, 5 также достаточно стабильны, если выбирать такие конфигурации структур, в которых все валентные электроны атомов кластера C<sub>m</sub> участвуют в ковалентных связях. Простое ковалентное связывание фуллерена с графеном наименее стабильно, так как имеет наименьшую энергию связывания. Относительное изменение формы фуллерена в стабильных структурах «фуллерен + C<sub>n</sub> + графен» находится в пределах 10%, это изменение слабо зависит от количества атомов в линейном кластере.

#### Дополнительный материал/Supplementary Material.

Электронная версия статьи содержит дополнительный материал (рисунки, таблица), доступный безвозмездно на сайте журнала (lettersonmaterials.com)./The online version of this paper contains supplementary material (figures, table) available free of charge at the journal's Web site (lettersonmaterials.com).

Благодарности/Acknowledgements. Авторы выражают благодарность д.ф.-м.н. А. А. Джуракхалову за плодотворные дискуссии и помощь в работе./The authors are grateful to Dr. A. A. Dzhurakhalov for fruitful discussions and assistance in this work.

#### Литература/References

1. A.V. Savin, Y.S. Kivshar. Scientific Reports. 2, 1012 (2012). [Crossref](#)
2. K. Berland, P. Hyldgaard. Phys. Rev. B. 87, 205421 (2013). [Crossref](#)
3. S.S. Rechviashvili, M.M. Bukhurova. Prot Met Phys Chem Surf. 53 (6), 967 (2017). [Crossref](#)
4. H. Ulbricht, G. Moos, T. Hertel. Phys. Rev. Lett. 90, 095501 (2003). [Crossref](#)
5. M. Garrido, J. Calbo, L.R. Perez, J. Arago, E. Orti, M.A. Herranz, N. Martin. Chem. Commun. 53, 12402 (2017). [Crossref](#)
6. D. Garcia, L. R. Perez, M. A. Herranz, D. Pena, E. Guitian, S. Bailey, Q. A. Galiby, M. Noori, C. J. Lambert, D. Perez, N. Martin. Chem. Commun. 52, 6677 (2016). [Crossref](#)
7. M. Chen, R. Guan, Sh. Yang. Adv. Sci. 6, 1800941 (2018). [Crossref](#)
8. M. Neek-Amal, N. Abedpour, S.N. Rasuli, A. Naji, M.R. Ejtehad. Phys. Rev. E. 82, 051605 (2010). [Crossref](#)
9. D.P. Kosimov, A.A. Dzhurakhalov, F.M. Peeters. Phys. Rev. B. 78, 235433 (2008). [Crossref](#)
10. [Brenner's Code](#)
11. D.W. Brenner, O.A. Shenderova, J.A. Harrison, S.J. Stuart, B. Ni, S.B. Sinnott. J. Phys.: Condens. Matter. 14, 783 (2002). [Crossref](#)
12. I.D. Yadgarov, V.G. Stelmakh, A.M. Rasulov, A.A. Dzhurakhalov. Tech. Phys. 60 (3), 474 (2015). [Crossref](#)
13. A.A. Dzhurakhalov, V.G. Stelmakh, I.D. Yadgarov. Journal of Physics: Conference Series. 640, 012023 (2015). [Crossref](#)
14. M.C. Payne, M.P. Teter, D.C. Allan, T.A. Arias, J.D. Joannopoulos. Rev. Mod. Phys. 64, 1045 (1992). [Crossref](#)
15. S. Laref, A.M. Asaduzzaman, W. Beck, P.A. Deymier, K. Runge, L. Adamowicz, K. Muralidharan. Chemical Physics Letters. 582, 115 (2013). [Crossref](#)