

Научная статья
1.3.8. Физика конденсированного состояния (физико-математические науки)
УДК 539.3 537.86
doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2024.01.006

ДИНАМИКА ВОЛНОВЫХ ПРОЦЕССОВ В СЛОЕ ФОСФОРЕНЕ ПРИ НЕПРЕРЫВНОМ СЖАТИИ

Игорь Александрович Шепелев^{1†}, Иван Дмитриевич Колесников²,
Сергей Владимирович Дмитриев³

¹ Альметьевский государственный нефтяной институт, ул. Ленина, 2, Альметьевск, 423462, Россия

^{1,2} Саратовский национальный исследовательский государственный университет им. Н.Г. Чернышевского, ул. Астраханская, 83, Саратов, 410012, Россия

³ Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН, пр. Октября, 71, Уфа, 450054, Россия

¹ igor_sar@li.ru[†], <https://orcid.org/0000-0002-7240-9150>

² kole200@yandex.ru

³ dmitriev.sergey.v@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-6744-4445>

Аннотация. В рамках данного исследования проведен детальный анализ волновых процессов в двумерной структуре черного фосфорена под воздействием непрерывного продольного сжатия. Это сжатие осуществлялось строго в двух кристаллографических ориентациях фосфорена – либо в направлении "зигзаг", либо в направлении "кресла". Сложная атомная геометрия фосфорена, значительно отличающаяся от структуры графена, вносит дополнительные особенности в динамику распространения волн, возникающих в материале в результате сжатия. Для моделирования динамических явлений были применены методы молекулярной динамики. Процесс возбуждения акустических и ударных волн был инициирован с помощью сжимающего поршня, движущегося с постоянной заданной скоростью. В ходе исследования был проведен детальный анализ распространения волнового фронта на атомном уровне. В рамках этого анализа были изучены колебания атомов, проходящих через волны, и изменения энергетических параметров атомов и волны в зависимости от скорости движения поршня. Полученные результаты вносят вклад в понимание нелинейных волновых процессов в двумерных материалах и расширяют представления о поведении волн в сложных геометрических кристаллических структурах. Это исследование помогает получить более глубокое понимание механизмов распространения и эволюции ударных и акустических волн в таких материалах, как фосфорен, и имеет важное значение для разработки новых наноматериалов и технологий. Полученные результаты расширяют наше понимание динамики материалов на атомном уровне и могут найти практическое применение в области нанотехнологий и разработке новых материалов с улучшенными свойствами.

Ключевые слова: акустические волны, двумерные материалы, фосфорен, непрерывное сжатие, молекулярная динамика.

Благодарности: Работа выполнена при финансовой поддержке Совета по грантам Президента РФ для государственной поддержки молодых ученых – кандидатов наук, грант № МК-891.2022.1.2.

Для цитирования: Шепелев И.А., Колесников И.Д., Дмитриев С.В. Динамика волновых процессов в слое фосфорене при непрерывном сжатии // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2024. Т. 21, № 1. С. 50–58. doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2024.01.006.

Original article

WAVE PROCESS DYNAMICS IN LAYER PHOSPHORENE
UNDER CONTINUOUS COMPRESSIONIgor A. Shepelev^{1†}, Ivan D. Kolesnikov², Sergey V. Dmitriev³¹Almetyevsk State Oil Institute, Lenin St., 2, Almetyevsk, 423462, Russia^{1,2}N.G. Chernyshevsky Saratov National Research State University, Astrakhanskaya St., 83, Saratov, 410012, Russia³Institute of Physics of Molecules and Crystals UFRC RAS, Oktyabr'sky Pr., 71, Ufa, 450054, Russia¹igor_sar@li.ru[†], <https://orcid.org/0000-0002-7240-9150>²kole200@yandex.ru³dmitriev.sergey.v@gmail.com, <https://orcid.org/0000-0002-6744-4445>

Abstract. This study presents a detailed analysis of wave processes in the two-dimensional structure of black phosphorene subjected to continuous longitudinal compression. The compression is strictly performed in two crystallographic orientations of phosphorene: either in the "zigzag" direction or in the "armchair" direction. The complex atomic geometry of phosphorene, which differs from the structure of graphene, gives additional complexity to the dynamics of wave propagation occurring due to compression. We employ molecular dynamics methods to simulate the dynamic phenomena. We excite process of acoustic and shock waves using a compressing piston moving at a constant predetermined speed. The study involves a comprehensive analysis of the propagation of the wavefront at the atomic level, which includes the vibrations of atoms passing through the waves and the changes in energy parameters of atoms and waves depending on the piston movement speed. The obtained results contribute to the understanding of nonlinear wave processes in two-dimensional materials, expanding our understanding of wave behavior in complex geometric crystalline structures. This research helps to gain a deeper understanding of the mechanisms of propagation and evolution of shock and acoustic waves in materials such as phosphorene and is of significant importance for the development of novel nanomaterials and technologies. The results obtained extend our understanding of the dynamics of materials at the atomic level and may find practical applications in nanotechnology and the development of new materials with improved properties.

Keywords: acoustic waves, two-dimensional materials, phosphorene, continuous compression, molecular dynamics.

Acknowledgements: The work was carried out with the financial support of the Grant Council of the President of the Russian Federation for state support of young scientists – candidates of science, grant No. MK-891.2022.1.2.

For citation: Shepelev, I. A., Kolesnikov, I. D. & Dmitriev, S. V. (2024). Wave process dynamics in layer phosphorene under continuous compression. *Fundamental'nye problemy sovremennogo materialovedeniya (Basic Problems of Material Science (BPMS))*, 21(1), 50–58. (In Russ.). doi: 10.25712/ASTU.1811-1416.2024.01.006.

Введение

Отслоение графена [1] стало вехой в науке, которая открыла новое направление по исследованию различных двумерных (2D) материалов. Прогресс в технологиях отслоения и обработки слоистых веществ привел к созданию новых однослойных материалов, и одним из них является фосфорен – двумерный слой черного фосфора [2]. Несмотря на то, что черный фосфорен является наиболее стабильным аллотропом фосфора, его синтез произошел лишь спустя многие десятилетия после открытия самого химического элемента фосфора. Оба эти материала, графен и фосфорен, представляют собой монослойные кристаллы, состоящие из одних и тех же атомов. Возможность создания фосфорена открыла новые перспективы для исследо-

ваний этого материала и его возможных применений в различных областях.

В 2014 году были проведены исследования, которые сосредоточились на изучении электронных свойств монослоя или нескольких слоев черного фосфора [3]. Эти результаты показали, что фосфорен обладает полупроводниковой проводимостью и характеризуется высокой подвижностью носителей заряда. Это означает, что фосфорен имеет значительный потенциал для применения в разработке электронных высокоэффективных устройств с большой производительностью. Также эти исследования подтверждают перспективы использования фосфорена в различных технологических приложениях. Это делает его потенциально полезным для различных электронных приложений, таких как фотодетекторы и светодиоды, благодаря его

способности лучше абсорбировать свет в сравнении с другими двумерными материалами, такими как графен.

Хотя фосфорен, как двумерный материал, относительно недавно стал объектом исследования, уже существует значительное количество обзорных статей, которые описывают его свойства, методы производства и устройства, созданные на его основе [4]. Кроме того, были обнаружены уникальные тепловые характеристики фосфорена, которые заметно отличаются от макромасштабного черного фосфора [5]. Особенно стоит отметить, что фосфорен обладает высокой термостабильностью и способен сохранять свои свойства даже при очень высоких температурах без деградации. Эти результаты показывают, что фосфорен имеет потенциал применения в качестве перспективного материала для различных тепловых приложений.

Исследования [6] также предсказали, что фосфорен может стать эффективным термоэлектрическим материалом с высокой электропроводностью и низкой теплопроводностью. Эти свойства делают его особенно привлекательным для создания устройств, которые могут преобразовывать тепловую энергию в электрическую энергию, таких как термогенераторы. Кроме того, фосфорен может быть использован в качестве катализатора благодаря высокой поверхностной активности и возможности изменять свою структуру в процессе реакции. Это расширяет горизонты производства различных химических соединений и промышленных процессов, открывая новые возможности и перспективы.

Метод молекулярной динамики является высокоэффективным инструментом для изучения трансформации структуры двумерных материалов. Он может использоваться для моделирования различных процессов, таких как отслаивание и скольжение графеновых нанолент [7], термически и механически индуцированную пульсацию [8], динамику поверхностных пульсаций и твистонов [9], создание и аннигиляцию солитонов, распространение ударных волн, моделирование второго звука в графене и мультстабильности углеродных нанотрубок.

Метод молекулярной динамики также может быть использован для исследования передачи тепла, энергии и массы в двумерных материалах, включая баллистическую передачу тепла и выравнивание энергии в двумерной гармо-

нической решетке графена. Кроме того, этот метод позволяет изучать амортизацию ударов и колебаний в других двумерных материалах, в частности пространственно-локализованные колебательные моды большой амплитуды, известные как дискретные бризеры. Метод молекулярной динамики также может использоваться для моделирования поведения двумерных материалов при экстремальных воздействиях, таких как высокие температуры и высокие давления.

Двумерные материалы, использованные в устройствах, часто подвергаются экстремальным динамическим нагрузкам. Изучение механизмов передачи энергии в двумерных материалах, включая нелинейные эффекты, является необходимым для понимания их свойств в таких условиях [10]. Научные исследования подтверждают, что поведение двумерных материалов при высокоскоростной деформации существенно отличается от их поведения при низких скоростях деформации [11]. Например, углеродные нанотрубки, подвергнутые ударной волне, повреждаются в значительно большей степени, чем при статическом сжатии при соответствующем давлении [12]. В то же время, графен может быть потенциально использован в качестве материала, способного поглощать ударные волны без разрушения, а также в качестве слоя для отражения и ослабления ударных волн [13]. Эти исследования указывают на перспективы использования двумерных материалов в области защиты от ударных волн и других высокоэнергетических динамических нагрузок.

В отличие от графена и нитрида бора, фосфорен обладает более сложной пространственной структурой и состоит из двух субатомных слоев. Кроме того, фосфорен является высокоанизотропным материалом, с различными значениями модуля Юнга в зависимости от направления: от 90 до 166 ГПа в направлении "зигзаг" и от 40 до 44 ГПа в направлении "кресло" [14]. Эти характеристики указывают на уникальные свойства фосфорена и его потенциал для различных приложений в науке и технологиях. С другой стороны, графен имеет гораздо более высокий (1 ТПа) и изотропный модуль Юнга. В работе [15] было показано, что кратковременное высокоинтенсивное воздействие на фосфорен приводит к появлению в нем солитонной волны сжатия, схожим по свойствам с теми, что возбуждаются в графене или

нитриде бора при подобной нагрузке [16, 17] В связи с этим возникает вопрос о различии в динамике акустических волн в этих материалах.

Таким образом, целью данной работы является анализ динамики акустических волн, возникающих в материале при медленном продольном сжатии, а также выявление каналов диссипации энергии в сильно анизотропной решетке фосфорене с помощью молекулярно-динамического моделирования.

Методология

Фосфорен как монослойная структура представляет собой 2D-материал, состоящий из атомов фосфора с пространственной топологией, показанной на рис.1. Отличительной чертой этого материала является его слоистая структура вдоль направления "кресло". Каждая трансляционная ячейка фосфорене состоит из четырех атомов фосфора, распределенных по двум параллельным подслоям в плоскости XU .

В верхнем подслое атомы фосфора обозначены как P_1 , тогда как в нижнем слое они идентифицированы как P_2 . В фосфорене выделяются два различных вида валентных связей. Одна из них, l_{in} , лежит в плоскости XU и называется внутренней связью. Другая, l_{out} , соединяет ато-

мы P_1 и P_2 между слоями и называется внешней связью, что продемонстрировано на рис.1б. Это приводит к формированию двух разных типов углов связей, обозначаемых как θ_{in} (внутренний угол) и θ_{out} (внешний угол).

Согласно недавним исследованиям, взаимодействие между атомами фосфорене можно с достаточно высокой точностью описать с использованием потенциала Стиллинджера-Вебера (SW) [18]. Этот подход был ранее эффективно применен для моделирования атомных взаимодействий в кремнии, как описано в [19]. Этот потенциал позволяет воспроизвести кристаллическую структуру, скорость звука и дисперсию фононов, полученных в результате расчетов. Используемый потенциал SW содержит двухчастичный член, описывающий длину связи, и трехчастичный член, описывающий углы связей. Он может быть записан следующим образом:

$$E_{total} = \sum_i \sum_{i<j} V_{ij}(r_{ij}) + \sum_{i \neq j} \sum_{i<k} V_3(r_{ij}, r_{ik}, \theta_{ijk}), \quad (1)$$

где r_{ij} – длина связи, соединяющей атомы i и j , θ_{ijk} – угол, образованный векторами r_{ij} и r_{jk} с вершиной в атоме i , а функции V_1 и V_3 имеют следующий вид:

$$V_2(r_{ij}) = A_{ij} (B_{ij} r_{ij}^{-4} - 1) \exp \left[\frac{1}{\rho_{2ij} (r_{ij} - r_{mij})} \right], \quad (2)$$

$$V_3(r_{ij}, r_{ik}, \theta_{ijk}) = K_{ijk} (\cos \theta_{ijk} - \cos \theta_{0ijk})^2 \cdot \exp \left[\frac{1}{\rho_{3ij} (r_{ij} - r_{mij})} + \frac{1}{\rho_{3ik} (r_{ik} - r_{mik})} \right],$$

где r_{mij} – радиус отсечки для взаимодействия между атомами i и j , а θ_{0ijk} – равновесное значение для угла θ_{ijk} . Значения параметров потенциала выбираются в соответствии с работой [18]. Параметры листа фосфорене получают следующим образом: длина связи в слое, параллельном плоскости XU , $l_{in}=2,21$ Å, длина связи между атомами из верхнего и нижнего слоев $l_{out}=2,258$ Å, параметры решетки равны $a_x=3,284$ Å и $a_y=4,59$ Å, углы связей $\theta_{in}=95,999^\circ$ и $\theta_{out}=104,0^\circ$ энергия равновесия на атом $\Delta E=3,48$ эВ. Все эти значения очень близки к значениям, полученным при расчетах первыми принципами в работе [20].

В качестве инструмента для молекулярно-динамического моделирования был использован хорошо зарекомендовавший программный пакет LAMMPS. Мы использовали Верле-интегрирование с шагом времени 0,2 фс. Гра-

ничные условия являются периодическими во всех трех направлениях. В направлении Z введен вакуумный слой толщиной 20 Å для устранения взаимодействия рассматриваемого листа с его периодическими образами. Решетка фосфорене состоит из 192000 атомов с размерами 367,18×19,7×2,0 нм для случая распространения волн вдоль направления "зигзаг" и 27,54×266,7×2,0 нм для распространения вдоль направления "кресло".

В ходе моделирования кристаллическая решетка фосфорене непрерывно сжимается с помощью поршня, который движется с постоянной скоростью вдоль одного из кристаллографических направлений. В результате этого сжатия происходит интенсивное нагревание решетки и возбуждение акустических или ударных волн, в зависимости от скорости поршня. В данной работе не учитываются сто-

хастические эффекты температуры кристалла, и предполагается, что начальная температура равна 0 К. Следовательно, все атомы остаются в своих равновесных положениях до тех пор, пока они не подвергнутся воздействию акустических либо ударных волн, возбужденных в кристалле вследствие сжатия решетки.

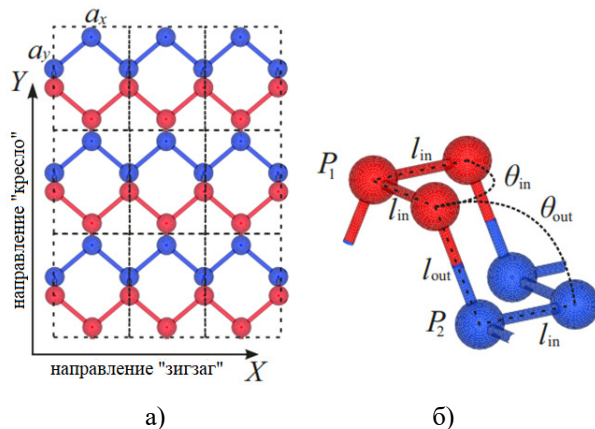


Рис.1. Схема расположения атомов фосфора в монослое фосфорена. (а) вид сверху решетки, состоящей из 3×3 трансляционных ячеек с четырьмя атомами фосфора в каждой ячейке. Пунктирные линии разделяют трансляционные ячейки. Оси X и Y направлены вдоль направлений "зигзаг" и "кресло", соответственно. (б) Перспективное изображение одной трансляционной ячейки. Верхние (красного цвета) и нижние (синего цвета) атомы фосфора обозначаются как P_1 и P_2 . Внутренние связи и углы связей обозначаются как l_{in} и θ_{in} . Внешние связи и углы связей обозначаются как l_{out} и θ_{out}

Fig.1. Diagram of the arrangement of phosphorus atoms in a phosphorene monolayer. (a) Top view of a lattice consisting of 3×3 translation cells with four phosphorus atoms in each cell. Dashed lines separate translation cells. The X and Y axes are directed along the "zigzag" and "armchair" directions, respectively. (b) Perspective image of a single translation cell. The top (red) and bottom (blue) phosphorus atoms are designated as P_1 and P_2 . Internal connections and connection angles are designated as l_{in} and θ_{in} . External connections and connection angles are designated as l_{out} and θ_{out}

Результаты

При движении поршня, сжимающего кристаллическую решетку фосфорена со скоростью меньше скорости звука в фосфорене, в решетке возникает акустическая волна. Эта волна распространяется вдоль одного из кристаллографических направлений – "кресло" или "зигзаг", вдоль которых и происходит сжатие материала. В результате такого воздействия происходит сильное нагревание решетки.

На первом этапе исследования рассматривается сжатие кристаллической решетки вдоль направления "кресло" со скоростью поршня от $u = 0,1$ до $0,5$ км/с. Чтобы сравнить динамику акустической волны, мы изменяем скорость поршня от $u = 0,1$ до $u = 0,5$ км/с. Если рассмотреть эволюцию энергии атомов для ряда атомов (рис.2), расположенных вдоль направления "кресло" при прохождении через них акустической волны при $u = 0,2$ км/с (рис.2а, в) и $u = 0,5$ км/с (рис.2б, г), то можно увидеть, что атомы получают сильно отличающуюся энергию. Для оценки уровня энергии масштаб по энергиям сделан одинаковым. Так, когда акустическая волна проходит через атом кристаллической решетки, энергия атома скачкообразно возрастает в течение короткого времени, и стремительно падает до определенного ненулевого уровня, который не изменяется со временем после прохождения через атом волны. Значение этой остаточной энергии прямо пропорционально скорости поршня: чем она больше, тем значительнее остаточная энергия атомов. Также отметим, что при одной и той же скорости поршня, энергия, которую получает атом при прохождении через него акустической волны, зависит от направления распространения. При движении вдоль направления "кресло" энергия, получаемая атомом заметно ниже, чем в случае распространения вдоль направления "зигзаг". Это происходит в связи с тем, что в кристаллической решетке фосфорена в направлении "зигзаг" существует большее количество связей между атомами, чем в направлении "кресло". Это приводит к более сильному сжатию и растяжению решетки при распространении акустической волны в направлении "зигзаг", что в свою очередь приводит к более высокой передаче энергии от волны к атомам.

Кроме того, в направлении "зигзаг" атомы решетки расположены ближе друг к другу, чем в направлении "кресло", что также способствует более высокой передаче энергии от волны к атомам.

Если рассмотреть случаи $u = 0,2$ км/с (верхний ряд на рис.2) и $u = 0,5$ км/с (нижний ряд рис.2), то хорошо видно, что энергия атомов во втором случае многократно больше чем в случае более медленного движения поршня. Из этого следует, что остаточная энергия атомов при распространении акустической волны во многом определяется скоростью сжатия поршнем.

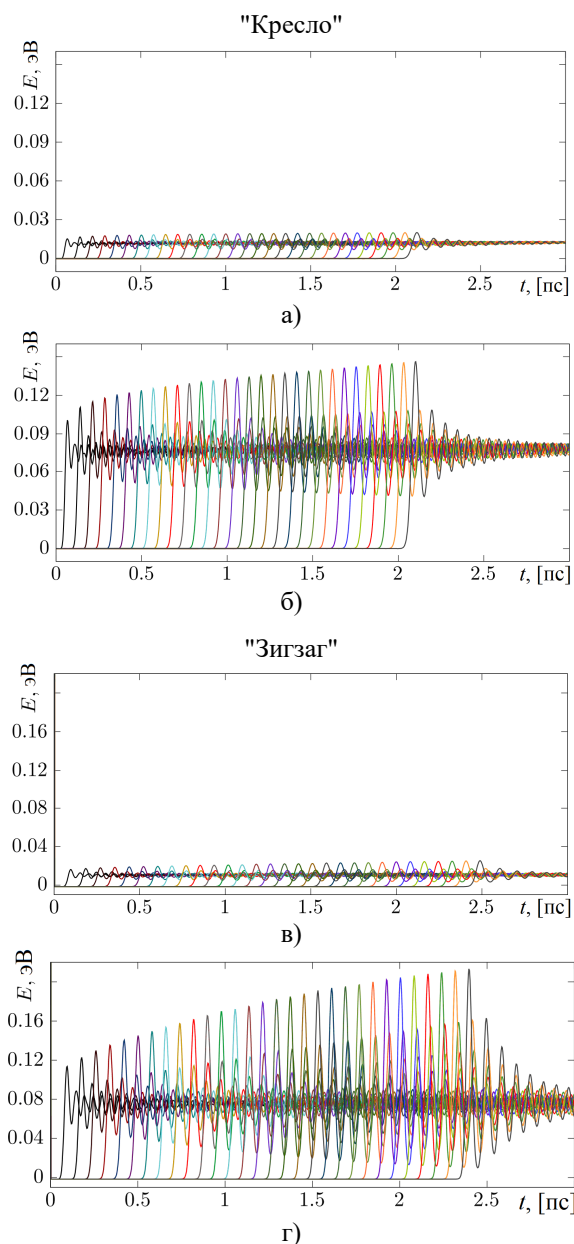


Рис.2. Динамика полной энергии атомов $E(t)$ в атомном ряду в направлении "кресло" при прохождении через них акустической волны. Графики (а) и (в) соответствуют случаю, когда скорость поршня $u = 0,2$ км/с, а (б) и (г) – случаю, когда скорость поршня составляет $u = 0,5$ км/с

Fig.2. Dynamics of the total energy of atoms $E(t)$ in an atomic row in the "armchair" direction when an acoustic wave passes through them. Graphs (a) and (c) correspond to the case when the piston speed is $u = 0.2$ km/s, and (b) and (d) – to the case when the piston speed is $u = 0.5$ km/s

Кроме того, атомы, через который происходит распространение волны, получают все большую энергию с течением времени. Это можно объяснить следующим образом. При непрерывном сжатии решетки происходит накоп-

ление энергии в пружинистых свойствах решетки, что приводит к увеличению энергии каждого последующего атома в ряду. Это происходит потому, что при сжатии решетки увеличивается ее пружинная жесткость, что приводит к увеличению энергии, необходимой для деформации каждого последующего атома. Это приводит к увеличению энергии акустической волны. При прохождении акустической волны через первый атом, он начинает колебаться с определенной амплитудой и частотой. При прохождении через следующий атом волна деформации передается и ему, а он начинает колебаться в том же ритме и, но с уже большей амплитудой, что и предыдущий атом. Таким образом, энергия акустической волны передается от одного атома к другому, и каждый последующий атом получает все большую энергию. Максимальная энергия, которую получает атом, можно рассматривать как энергию акустической волны. Чтобы оценить ее динамику во времени и ее зависимость от скорости, были построены графики максимальной энергии атомов $E_m(t)$ для разных скоростей поршня в направлении "кресло" и "зигзаг", представленные на рис.3а и рис.3б, соответственно.

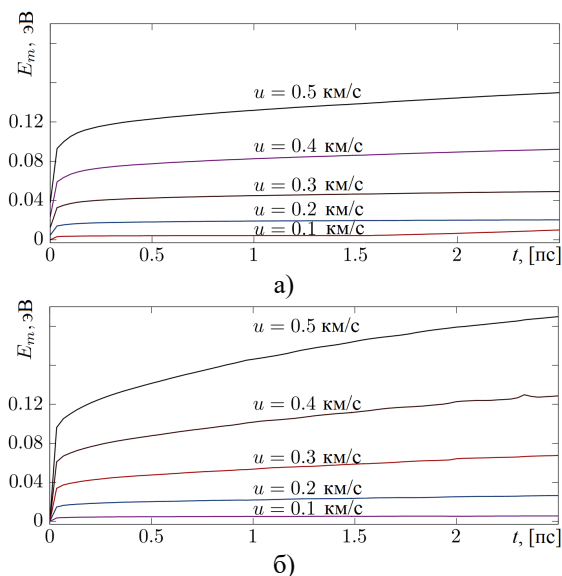


Рис.3. Эволюция энергии атомов $E_i(t)$ (максимального значения) вдоль атомного ряда, вдоль которого движется акустическая волна: "кресло" (а) и "зигзаг" (б)

Fig.3. Evolution of atomic energy $E_i(t)$ (maximum value) along the atomic row along which the acoustic wave moves: "armchair" (a) and "zigzag" (b)

Графики показывают монотонный рост энергии атомов, через которые проходит акустическая волна во времени, а также значительный скачок энергии при увеличении значе-

ния скорости поршня. Растет не только эта энергия, а еще и ее инкремент во времени. Также можно заметить, при распространении в направлении "зигзаг" рост максимальной энергии атомов заметно интенсивнее, чем при движении в направлении "кресло". Причины этих эффектов были описаны выше.

При распространении акустической волны через кристаллическую решетку происходят колебания атомов, которые вызывают изменения внутренней энергии решетки. В результате этого на фронте распространения волны происходят колебания термодинамических параметров решетки, включая ее температуру. В зависимости от интенсивности колебаний атомов на фронте распространения волны происходит сильный нагрев решетки, так как атомы сжимаются и приобретают дополнительную кинетическую энергию, что приводит к нагреву решетки. Температура решетки на фронте распространения волны зависит от интенсивности колебаний атомов и скорости распространения волны. При больших амплитудах колебаний и высоких скоростях распространения волны изменения температуры решетки могут быть значительными. Это хорошо видно из графиков динамики температуры атомов решетки на границе распространения фронта акустической волны для двух кристаллографических направлений на рис.4.

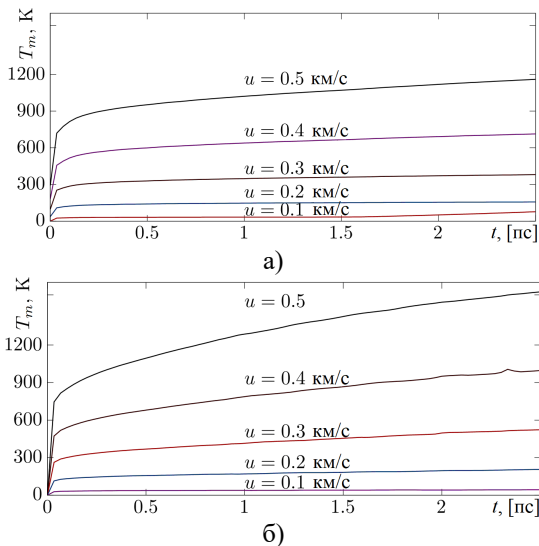


Рис.4. Эволюция температуры атомов $E_i(t)$ на границе фронта распространения акустической волны, инициированной сжатием поршнем с различными скоростями u , в направлении "кресло" (а) и "зигзаг" (б)

Fig.4. Evolution of the temperature of atoms $E_i(t)$ at the boundary of the propagation front of an acoustic wave initiated by compression by a piston at different speeds u , in the "armchair" (a) and "zigzag" (b) directions

При больших сжатиях происходит очень сильный разогрев кристаллической решетки. Так при сильных скоростях сжатия поршня температура становится настолько высокой, что она превышает температуру плавления черного фосфора, которая лежит в пределах 850-1300 К (на данный момент точно не определена). В связи с этим, при больших скоростях движения поршня начинает наблюдаться разрушение кристаллической решетки фосфора.

Заключение

Одним из ключевых факторов, определяющих передачу энергии от волны к атомам в двумерных кристаллических материалах, является возбуждение акустической волны. В случае черного фосфора, акустическая волна может возбуждаться из-за непрерывного сжатия кристаллической решетки поршнем с определенной скоростью. Исследование распространения акустической волны через двумерную кристаллическую решётку черного фосфора показало, что скорость движения поршня является ключевым фактором, определяющим передаваемую энергию от волны к атомам. Чем выше скорость поршня, тем больше передаваемая энергия и тем больше остаточная энергия атомов. Однако, при сильных скоростях сжатия поршня, температура решетки может возрасти настолько, что решетка может начать разрушаться.

Также было обнаружено, что направление сжатия и последующее распространение волны играет очень важную роль в передаче энергии. При распространении вдоль направления "зигзаг" передаваемая энергия заметно выше, чем в направлении "кресло". Это связано с особенностями кристаллической структуры черного фосфора, где в направлении "зигзаг" существует большее количество связей между атомами, а расстояние между атомами наоборот ниже.

Полученные результаты могут быть потенциально полезными для различных областей науки, в которых использование двумерных материалов открывает широкие перспективы развития, включая электронику, оптику. Вопрос, что будет происходить с материалом при экстремальных механических нагрузках и как они повлияют на его свойства остается открытым и актуальным.

Изучение распространения акустической волны через двумерную решетку черного фосфорена позволяет более глубоко понимать процессы, происходящие в двумерных кристаллических материалах при передаче энергии от волн к атомам при длительном сильном сжатии.

Список литературы

1. Geim A.K., Novoselov K.S. The rise of graphene // *Nature materials*. 2007. V. 6, N 3. P. 183–191.
2. Kang J. et al. Graphene and beyond-graphene 2D crystals for next-generation green electronics // *Micro- and Nanotechnology Sensors, Systems, and Applications VI*. SPIE, 2014. V. 9083. P. 20–26.
3. Li L. et al. Black phosphorus field-effect transistors // *Nature nanotechnology*. 2014. V. 9, N 5. P. 372–377.
4. Ling X. et al. The renaissance of black phosphorus // *Proceedings of the National Academy of Sciences*. 2015. V. 112, N 15. P. 4523–4530.
5. Yang N. et al. Thermal transport in nanostructures // *AIP Advances*. 2012. V. 2, N 4. 041410.
6. Zhang J. et al. Sulfur nanocrystals anchored graphene composite with highly improved electrochemical performance for lithium-sulfur batteries // *Journal of Power Sources*. 2014. V. 270. P. 1–8.
7. Xue Z. et al. Peeling and sliding of graphene nanoribbons with periodic van der Waals interactions // *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*. 2022. V. 158. P. 104698.
8. Thiemann F.L. et al. Machine learning potential for hexagonal boron nitride applied to thermally and mechanically induced rippling // *The Journal of Physical Chemistry C*. 2020. V. 124, N 40. P. 22278–22290.
9. Savin A.V., Korznikova E.A., Dmitriev S.V. Twistons in graphene nanoribbons on a substrate // *Physical Review B*. 2020. V. 102, N 24. P. 245432.
10. Botella P. et al. Single-Walled Carbon Nanotubes Shock-Compressed to 0.5 Mbar // *Physica status solidi (b)*. 2017. V. 254, N 11. P. 1700315.
11. Li Z. et al. Efficient strain modulation of 2D materials via polymer encapsulation // *Nature communications*. 2020. V. 11, N 1. P. 1151.
12. Galiakhmetova L.K. et al. Shock loading of carbon nanotube bundle // *Mechanics of Materi-*

als. 2022. V. 174. P. 104460.

13. Zhang C. et al. High shock resistance and self-healing ability of graphene/nanotwinned Cu nanolayered composites // *Journal of Alloys and Compounds*. 2021. V. 860. P. 158435.

14. Wei Q., Peng X. Superior mechanical flexibility of phosphorene and few-layer black phosphorus // *Applied Physics Letters*. 2014. V. 104, N 25. 251915.

15. Shepelev I.A. et al. Compressive solitary waves in black phosphorene // *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*. 2023. V. 146. P. 115519.

16. Shepelev I.A. et al. Shock waves in graphene and boron nitride // *Computational Materials Science*. 2020. V. 177. P. 109549.

17. Shepelev I.A., Dmitriev S.V., Korznikova E.A. Molecular dynamics simulation of high-speed loading of 2D boron nitride // *Letters on Materials*. 2021. V. 11, N 1. P. 79–83.

18. Xu W. et al. Direction dependent thermal conductivity of monolayer phosphorene: parameterization of stillinger-weber potential and molecular dynamics study // *Journal of Applied Physics*. 2015. V. 117, N 21. 214308.

19. Stillinger F.H., Weber T.A. Computer simulation of local order in condensed phases of silicon // *Physical review B*. 1985. V. 31, N 8. P. 5262.

20. Zhu L., Zhang G., Li B. Coexistence of size-dependent and size-independent thermal conductivities in phosphorene // *Physical Review B*. 2014. V. 90, N 21. P. 214302.

Информация об авторах

И. А. Шепелев – кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник, Альметьевский государственный нефтяной институт; Саратовский национальный исследовательский государственный университет им. Н.Г. Чернышевского.

И. Д. Колесников – аспирант Саратовского национального исследовательского государственного университета им. Н.Г. Чернышевского.

С. В. Дмитриев – доктор физико-математических наук, профессор, заведующий лабораторией Института физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН.

References

1. Geim, A. K. & Novoselov, K. S. (2007). The rise of graphene. *Nature materials*, 6(3), 183–

- 191.
2. Kang, J. et al. (2014). Graphene and beyond-graphene 2D crystals for next-generation green electronics. *Micro- and Nanotechnology Sensors, Systems, and Applications VI. SPIE, 9083*, 20–26.
 3. Li, L. et al. (2014). Black phosphorus field-effect transistors. *Nature nanotechnology*, 9(5), 372–377.
 4. Ling, X. et al. (2015). The renaissance of black phosphorus. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 112(15), 4523–4530.
 5. Yang, N. et al. (2012). Thermal transport in nanostructures. *AIP Advances*, 2(4), 041410.
 6. Zhang, J. et al. (2014). Sulfur nanocrystals anchored graphene composite with highly improved electrochemical performance for lithium-sulfur batteries. *Journal of Power Sources*, 270, 1–8.
 7. Xue, Z. et al. (2022). Peeling and sliding of graphene nanoribbons with periodic van der Waals interactions. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, 158, 104698.
 8. Thiemann, F. L. et al. (2020). Machine learning potential for hexagonal boron nitride applied to thermally and mechanically induced rippling. *The Journal of Physical Chemistry C*, 124(40), 22278–22290.
 9. Savin, A. V., Korznikova, E. A. & Dmitriev, S. V. (2020). Twistons in graphene nanoribbons on a substrate. *Physical Review B*, 102(24), 245432.
 10. Botella, P. et al. (2017). Single-Walled Carbon Nanotubes Shock-Compressed to 0.5 Mbar. *Physica status solidi (b)*, 254(11), 1700315.
 11. Li, Z. et al. (2020). Efficient strain modulation of 2D materials via polymer encapsulation. *Nature communications*, 11(1), 1151.
 12. Galiakhmetova, L. K. et al. (2022). Shock loading of carbon nanotube bundle. *Mechanics of Materials*, 174, 104460.
 13. Zhang, C. et al. (2021). High shock resistance and self-healing ability of graphene/nanotwinned Cu nanolayered composites. *Journal of Alloys and Compounds*, 860, 158435.
 14. Wei, Q. & Peng, X. (2014). Superior mechanical flexibility of phosphorene and few-layer black phosphorus. *Applied Physics Letters*, 104(25), 251915.
 15. Shepelev, I. A. et al. (2023). Compressive solitary waves in black phosphorene. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, 146, 115519.
 16. Shepelev, I. A. et al. (2020). Shock waves in graphene and boron nitride. *Computational Materials Science*, 177, 109549.
 17. Shepelev, I. A., Dmitriev, S. V. & Korznikova, E. A. (2021). Molecular dynamics simulation of high-speed loading of 2D boron nitride. *Letters on Materials*, 11(1), 79–83.
 18. Xu, W. et al. (2015). Direction dependent thermal conductivity of monolayer phosphorene: parameterization of stillinger-weber potential and molecular dynamics study. *Journal of Applied Physics*, 117(21), 214308.
 19. Stillinger, F. H. & Weber, T. A. (1985). Computer simulation of local order in condensed phases of silicon. *Physical review B*, 31(8), 5262.
 20. Zhu, L., Zhang, G. & Li, B. (2014). Coexistence of size-dependent and size-independent thermal conductivities in phosphorene. *Physical Review B*, 90(21), 214302.

Information about the authors

I. A. Shepelev – Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Senior Researcher, Almet'yevsk State Oil Institute; N.G. Chernyshevsky Saratov National Research State University.

I. D. Kolesnikov – PhD Student, N.G. Chernyshevsky Saratov National Research State University.

S. V. Dmitriev – Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, Head of Laboratory, Institute of Physics of Molecules and Crystals UFRC RAS.

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.
The authors declare that there is no conflict of interest.

Статья поступила в редакцию 09.11.2023; одобрена после рецензирования 05.12.2023; принята к публикации 09.01.2024.

The article was received by the editorial board on 09 Nov. 23; approved after reviewing 05 Dec. 23; accepted for publication 09 Jan. 24.