

ЭФФЕКТИВНОЕ ТРЕНИЕ И ПОДВИЖНОСТЬ ГРАФЕНОВЫХ НАНОЧАСТИЦ (НАНОЛЕНТ И НАНОТРУБОК) НА ПЛОСКОЙ МНОГОСЛОЙНОЙ ПОДЛОЖКЕ h-BN

*А. В. Савин**

*Федеральный исследовательский центр химической физики им. Н. Н. Семенова
Российской академии наук (ФИЦ ХФ РАН)
119991, Москва, Россия*

*Российский экономический университет им. Г. В. Плеханова
117997, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 12 июня 2021 г.,
после переработки 16 июля 2021 г.
Принята к публикации 25 июля 2021 г.

Методом молекулярной динамики с использованием двумерной цепной модели показано, что движение графеновых наночастиц (нанолент и нанотрубок) на плоской термализованной многослойной подложке h-BN описывается как движение частиц в вязкой среде с постоянным коэффициентом трения. Возникающее при движении эффективное трение имеет волновую природу, причиной торможения является взаимодействие наночастицы с тепловыми изгибными колебаниями листов подложки. Величина коэффициента трения монотонно увеличивается с ростом температуры и уменьшается с увеличением размера наночастицы. Для нанолент возникающее трение разделяется на два типа: на внутреннее и краевое (на трение внутренней поверхности наноленты и трение ее краев с поверхностью подложки). При длинах $L < 35$ нм главную роль в торможении движения играет краевое, а при $L > 35$ нм — внутреннее трение. Под действием постоянной продольной силы динамика наночастиц всегда выходит на режим движения с постоянной скоростью, значение которой прямо пропорционально величине силы и обратно пропорционально значению коэффициента трения. Моделирование движения наноленты при наличии нормальной нагрузки (давления) показывает, что рост нагрузки приводит к уменьшению внутреннего трения из-за уменьшения под нанолентой амплитуды тепловых изгибных колебаний слоев подложки и к увеличению краевого трения из-за вдавливания краев наноленты в подложку. В силу этого эффект уменьшения трения при увеличении нормальной нагрузки может наблюдаться только для нанолент достаточно большого размера ($L > 250$ нм), когда главную роль играет внутреннее трение.

DOI: 10.31857/S0044451021120105

1. ВВЕДЕНИЕ

Двумерные (2D) слоистые материалы, такие как графен (G), гексагональный нитрид бора (h-BN), дисульфид молибдена (MoS_2) и вольфрама (WS_2), вызывают большой интерес из-за своих уникальных электронных [1–3] и механических [4–7] свойств. Благодаря очень низкому трению слоев эти материалы могут быть использованы в качестве высокоэффективной сухой смазки [8–14]. В последнее время повышенное внимание уделяется гетерогенным

слоистым материалам, которые могут демонстрировать различные новые физические свойства по сравнению с их однородными аналогами [15–17]. Так, было показано, что использование гетероструктур G/h-BN позволяет получить нужные электронные свойства [18, 19], а также существенно понизить трение между слоями [20].

Важной задачей для механических устройств нано- и микро размеров является максимально возможное уменьшение трения [21]. Стандартные схемы смазки на таких размерах перестают работать, здесь необходимо от жидкой смазки перейти к сухой, связанной со скольжением плоских молекулярных слоев. Такой подход, впервые теоретически предложенный несколько десятилетий назад [22],

* E-mail: asavin@center.chph.ras.ru

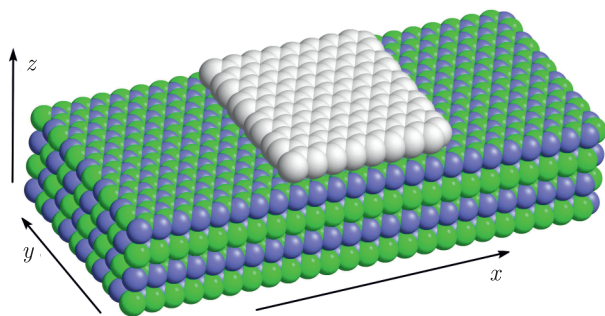


Рис. 1. Прямоугольный лист графена размера $2.02 \times 1.88 \text{ нм}^2$ (160 атомов углерода), лежащий на плоской поверхности кристалла h-BN

позволил достичь чрезвычайно низких коэффициентов трения [23–25]. Особенно сильно понизить трение позволяет использование двумерных материалов, таких как графен и гексагональный нитрид бора h-BN [26]. Слоистые структуры из этих материалов могут обладать сверхскольжением слоев [15, 20, 27].

Использование слоистых 2D-структур требует фундаментального понимания истоков силы трения на атомном уровне. В работах [20, 27, 28] проводилось моделирование медленного протягивания слоя графена, расположенного над слоем h-BN, под действием боковых сил. Величина трения оценивалась как максимальное значение возникающей силы, препятствующей скольжению. Фактически находилась сила трения покоя при нулевой температуре. Функционирование механических устройств нано- и микро-размеров невозможно описать без учета тепловых колебаний. Поэтому здесь учет влияния тепловых колебаний на трение имеет особое значение. В отличие от стандартных сценариев трения, где трение всегда уменьшается с повышением температуры [29], в двухслойной структуре G/h-BN трение может увеличиваться с повышением температуры [30].

Целью настоящей работы является объяснение на атомарном уровне возникающего трения при движении наночастиц (нанолента и нанотрубок графена) по плоской поверхности многослойной подложки. В качестве подложки будет использована плоская поверхность гексагонального кристалла нитрида бора h-BN (см. рис. 1). Для определения коэффициентов возникающего эффективного трения будет промоделировано торможение свободного движения наночастиц вследствие их взаимодействия с термализованной подложкой (вследствие перекачки начальной кинетической энергии наночастиц в подложку). Будет проанализирована зависимость коэффициен-

тов трения от размера наночастиц и температуры подложки.

Работа построена следующим образом. В разд. 2 строится цепная 2D-модель, используемая далее для моделирования движения графеновых наночастиц (нанолента и нанотрубок) по плоской многослойной подложке h-BN. В разд. 3 проводится моделирование торможения свободного движения наночастиц в результате их взаимодействия с термализованной подложкой. Определяется коэффициент возникающего эффективного трения и анализируется его природа. В разд. 4 анализируется подвижность наночастиц, моделируется их движение под действием боковой силы. В разд. 5 проводится проверка выполнения для нанолента эмпирического закона Амонта – Кулона (моделируется влияние на трение нормальной нагрузки). Заключительные замечания приводятся в разд. 6.

2. МОДЕЛЬ

Для описания динамики нанолента и нанотрубок графена на плоской поверхности многослойной подложки удобно использовать двумерную модель системы молекулярных цепей [31–33]. Если считать, что наночастица (нанолента или нанотрубка графена) и листы h-BN подложки лежат так, что у всех направление зигзаг совпадает с осью x (см. рис. 1), то двумерная цепная модель будет описывать сечение системы наночастица + многослойная подложка вдоль оси x (см. рис. 2). Тогда одной частице в двумерной модели будут соответствовать все атомы наноленты (нанотрубки), имеющие одинаковые координаты x, z .

Если атомы, расположенные вдоль одной линии, параллельной оси y , двигаются синхронно, меняя только координаты x, z , то гамильтониан одной наноленты (нанотрубки) графена (h-BN) будет иметь вид гамильтониана цепи, расположенной в плоскости xz :

$$H_i = \sum_{n=1}^N \left[\frac{1}{2} M_i (\dot{\mathbf{u}}_n, \dot{\mathbf{u}}_n) + V_i(R_n) + U_i(\theta_n) \right]. \quad (1)$$

Здесь индекс $i = 1$, если рассматривается нанолента графена (G), и $i = 2$, если рассматривается нанолента бор нитрида (BN). Двумерный вектор $\mathbf{u}_n = (x_n, z_n)$ задает координаты n -ой частицы цепи. Масса частицы для цепи G совпадает с массой атома углерода $M_1 = M_C = 12m_p$, а для цепи BN — со средней массой атомов бора и нит-

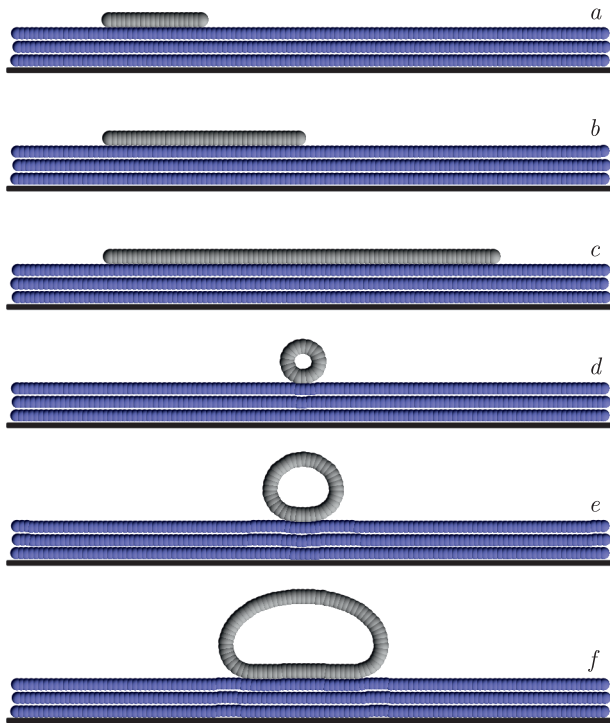


Рис. 2. Вид стационарных состояний однослойных листов графена длины $L = 2.33, 4.79, 9.70$ нм (число звеньев цепи $N_c = 20, 40, 80$) и однослойных нанотрубок с индексом киральности $(10, 0), (20, 0), (40, 0)$ (число звеньев циклической цепи $N_c = 20, 40, 80$) на многослойной подложке, образованной поверхностью кристалла h-BN (части *a, b, c* и *d, e, f*). Число слоев листов h-BN $K - 1 = 3$, число звеньев в BN-цепи $N_{bn} = 360$. Черная прямая показывает положение поверхности неподвижной подложки

рида $M_2 = (M_B + M_N)/2 = 12.4085m_p$ ($m_p = 1.6603 \cdot 10^{-27}$ кг — масса протона).

Отметим, что используемая цепная 2D-модель (1) не позволяет описать поперечные (вдоль оси y) колебания наноленты, но позволяет описать продольные (вдоль оси x) и изгибные (вдоль оси z) колебания наноленты.

Потенциал

$$V_i(R) = \frac{1}{2}K_i(R - R_i)^2 \quad (2)$$

описывает продольную жесткость цепи, K_i — жесткость взаимодействия, R_i — равновесная длина связи (шаг цепи), $R_n = |\mathbf{u}_{n+1} - \mathbf{u}_n|$ — расстояние между соседними узлами n и $n + 1$.

Потенциал

$$U_i(\theta) = \epsilon_i[1 + \cos(\theta)] \quad (3)$$

описывает изгибную жесткость цепи, θ — угол между двумя соседними связями,

$$\cos(\theta_n) = -(\mathbf{v}_{n-1}, \mathbf{v}_n)/R_{n-1}R_n,$$

вектор $\mathbf{v}_n = \mathbf{u}_{n+1} - \mathbf{u}_n$.

Параметры потенциалов (2), (3) для цепи G определены в [31, 32] из анализа дисперсионных кривых наноленты графена. Продольная жесткость $K_1 = 405$ Н/м, шаг цепи $R_1 = r_{CC}\sqrt{3}/2 = 1.228 \text{ \AA}$ ($r_{CC} = 1.418 \text{ \AA}$ — длина валентной связи C–C в листе графена), энергия $\epsilon_1 = 3.5$ эВ.

Нанолента h-BN имеет такую же структуру, как и нанолента графена. В двумерной модели ее гамильтониан тоже будет иметь вид (1). Для нахождения параметров цепи BN была рассмотрена нанолента h-BN. Взаимодействие атомов наноленты описывалось расширенным потенциалом Терсоффа для нитрида бора [34]. Вычисления показали, что нанолента h-BN имеет такую же гексагональную структуру, как и нанолента графена. В основном состоянии длина валентной связи B–N $r_{BN} = 1.445685 \text{ \AA}$ незначительно превышает длину валентной связи C–C. Анализ дисперсионных кривых наноленты показал, что она имеет частотный спектр изгибных (внеплоскостных) колебаний $0 \leq \omega \leq 747 \text{ см}^{-1}$ и спектр продольных (внутриплоскостных) колебаний $0 \leq \omega \leq 1688 \text{ см}^{-1}$. Вычисления показали, что дисперсионные кривые двумерной цепи с гамильтонианом (1) наилучшим образом соответствуют дисперсионным кривым полноатомной модели наноленты при жесткости $K_2 = 480$ Н/м, шаге цепи $R_2 = r_{BN}\sqrt{3}/2 = 1.252 \text{ \AA}$ и энергии $\epsilon_2 = 1.10$ эВ (см. рис. 3).

Отметим, что гамильтониан цепи (1) дает энергию деформации наноленты, приходящуюся на продольную полосу ширины $\Delta y = R_i/\sqrt{3}$, поэтому, если энергию системы цепей далее будем нормировать по наноленте графена, то энергию деформации нанолент h-BN нужно умножить на нормирующий множитель $c = R_1/R_2 = r_{CC}/r_{BN} = 0.9808$.

Для вычисления эффективного потенциала невалентного взаимодействия узлов цепей (энергии взаимодействия одного атома с поперечной линией атомов) были использованы потенциалы Леннарда–Джонса

$$V(r) = \epsilon_0 [(r_0/r)^{12} - 2(r_0/r)^6], \quad (4)$$

со значениями энергии ϵ_0 и равновесными длинами взаимодействия r_0 , приведенными в таблице.

Проведенные вычисления показали (см. рис. 4), что взаимодействия узлов цепей, соответствующих слоям бор-нитридной подложки и слою графена,

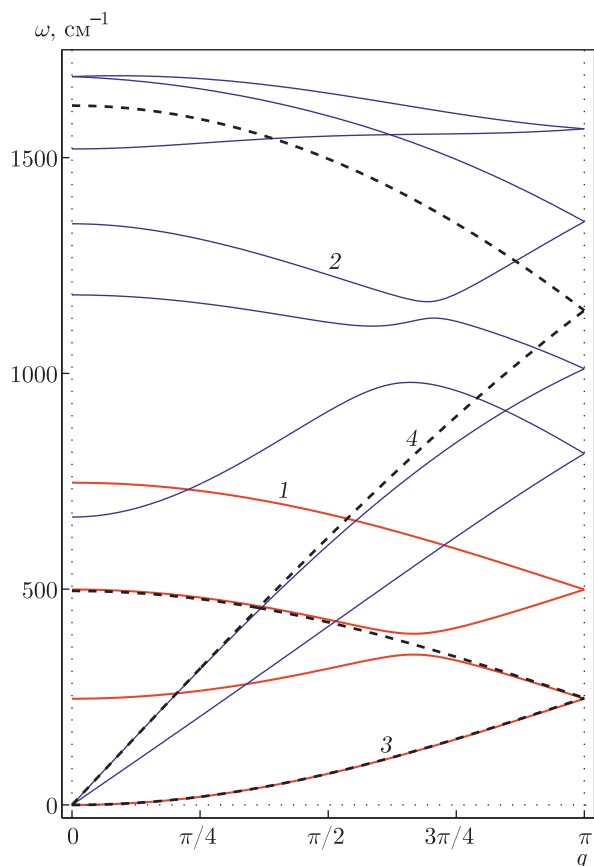


Рис. 3. Вид дисперсионных кривых наноленты h-BN (красные линии 1 соответствуют поперечным, а синие 2 — продольным колебаниям наноленты). Штриховые кривые 3 и 4 соответствуют изгибным и продольным колебаниям цепной 2D-модели наноленты

Таблица. Значения параметров потенциала Леннарда–Джонса (4) для различных пар взаимодействующих атомов [35]

	BB	NN	BN	CB	CN
ϵ_0 , МэВ	7.81	2.99	4.81	5.96	3.69
r_0 , Å	4.083	3.660	3.866	3.976	3.756

можно с высокой точностью описать потенциалом Леннарда–Джонса

$$W_i(r) = \epsilon_i [5(r_i/r)^{11} - 11(r_i/r)^5] / 6. \quad (5)$$

Здесь r — расстояние между взаимодействующими узлами (индекс $i = 1$, если описывается взаимодействие узлов цепей BN, $i = 2$ — взаимодействие узлов цепей BN и G). Энергии взаимодействия

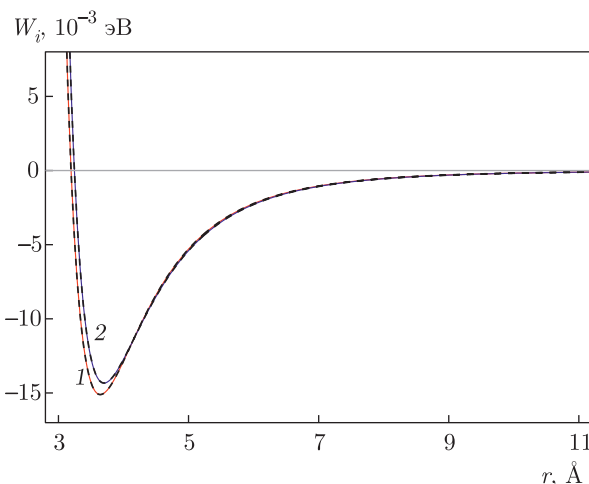


Рис. 4. Вид потенциалов взаимодействия узлов цепей $W_i(r)$, $i = 1, 2$ (кривые 1, 2). Сплошные линии дают зависимости, полученные численно, штриховые линии — зависимости, описываемые потенциалом Леннарда–Джонса (5)

$\epsilon_1 = 0.01511$ эВ, $\epsilon_2 = 0.01433$ эВ, равновесные расстояния $r_1 = 3.642$ Å, $r_2 = 3.701$ Å.

При моделировании динамики многослойной подложки необходимо ограничить число слоев. Поэтому будем считать, что первый (самый нижний) слой уже взаимодействует с неподвижной плоской поверхностью кристалла (на рис. 2 эта поверхность показана черной линией). Энергия взаимодействия атомов слоев с неподвижной подложкой тоже вычислялась с помощью потенциалов Леннарда–Джонса (4).

Вычисления показали (см. рис. 5), что потенциал взаимодействия с неподвижной подложкой $W_0(h)$ (зависимость энергии от расстояния h узла цепи до плоскости подложки) с высокой точностью может быть описан (k, l) потенциалом Леннарда–Джонса

$$W_0(h) = \epsilon_0 [k(h_0/h)^l - l(h_0/h)^k] / (l - k), \quad (6)$$

где степень $l = 10$, $k = 3.75$, энергия взаимодействия $\epsilon_0 = 0.0974$ эВ, равновесное расстояние $h_0 = 3.49$ Å.

Рассмотрим K -слойные структуры, представленные на рис. 2. Пусть первые $k = 1, \dots, K - 1$ слоев соответствуют BN-цепям (слоям кристалла h-BN), состоящим из N_{bn} звеньев. Эти слои лежат на плоской твердой подложке и взаимодействуют с ней (будем считать, что поверхность твердой подложки совпадает с плоскостью $z = 0$). Последняя K -тая G-цепь, имеющая $N_c < N_{bn}$ звеньев, соответствует графеновой наночастице (наноленте, нанотрубке), лежащей на плоской деформируемой мно-

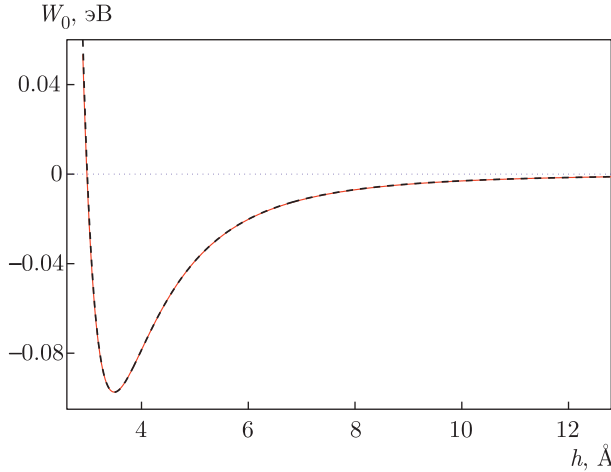


Рис. 5. Потенциал взаимодействия $W_0(h)$ узла цепи BN с неподвижной плоской поверхностью кристалла h-BN. Сплошная линия дает зависимость, полученную численно, штриховая линия — зависимость, описываемую потенциалом Леннарда–Джонса (6)

гослойной (K -1-слойной) подложке. Координаты узлов этой системы K цепей задаются векторами

$$\{\mathbf{u}_{n,k} = (x_{n,k}, z_{n,k})\}_{n=1, k=1}^{N_k, K},$$

где N_k — число узлов в k -й цепи ($N_k = N_{bn}$ при $k = 1, \dots, K - 1$ и $N_K = N_c$).

Гамильтониан системы цепей будет иметь вид

$$H = \sum_{k=1}^{K-1} \sum_{n=1}^{N_{bn}} \frac{1}{2} c M_2 (\dot{\mathbf{u}}_{n,k}, \dot{\mathbf{u}}_{n,k}) + \sum_{n=1}^{N_c} \frac{1}{2} M_1 (\dot{\mathbf{u}}_{n,K}, \dot{\mathbf{u}}_{n,K}) + E, \quad (7)$$

где потенциальная энергия

$$E = c \sum_{k=1}^{K-1} \sum_{n=1}^{N_{bn}} [V_2(R_{n,k}) + U_2(\theta_{n,k}) + W_0(z_{n,k})] + \quad (8)$$

$$+ c \sum_{k_1=1}^{K-2} \sum_{k_2=k_1+1}^{K-1} \sum_{n=1}^{N_{ab}} \sum_{l=1}^{N_{ab}} W_1(r_{n,k_1;l,k_2}) + \quad (9)$$

$$+ \sum_{n=1}^{N_c} [V_1(R_{n,K}) + U_1(\theta_{n,K})] + \quad (10)$$

$$+ \sum_{k=1}^{K-1} \sum_{n=1}^{N_{ab}} \sum_{l=1}^{N_c} W_2(r_{n,k;l,K}). \quad (11)$$

Здесь расстояние между соседними узлами k -й цепи $R_{n,k} = |\mathbf{u}_{n+1,k} - \mathbf{u}_{n,k}|$, косинус угла между двумя соседними связями

$$\cos(\theta_{n,k}) = -(\mathbf{v}_{n-1,k}, \mathbf{v}_{n,k}) / R_{n-1,k} R_{n,k},$$

вектор $\mathbf{v}_{n,k} = \mathbf{u}_{n+1,k} - \mathbf{u}_{n,k}$, расстояние между узлами разных цепей k_1 и k_2 $r_{n,k_1;l,k_2} = |\mathbf{u}_{l,k_2} - \mathbf{u}_{n,k_1}|$. В формуле потенциальной энергии первое слагаемое (8) задает энергию деформации BN-цепей с учетом энергии их взаимодействия с твердой подложкой, второе слагаемое (9) — энергию невалентного взаимодействия BN-цепей, третье слагаемое (10) — энергию деформации G-цепи, а последнее слагаемое (11) — энергию невалентного взаимодействия G-цепи с BN-цепями.

3. ТОРМОЖЕНИЕ СВОБОДНОГО ДВИЖЕНИЯ НАНОЧАСТИЦЫ

Рассмотрим систему, состоящую из $K - 1 = 3$ слоев BN-цепей с $N_{bn} = 2400$ звеньями. Длина такой трехслойной подложки $L = (N_{bn} - 1)R_2 = 300.4$ нм. В качестве графеновой наночастицы, расположенной на этой подложке, возьмем линейную G-цепочку из $N_c = 20, 40, 80, 160, 320$ звеньев (длина соответствующей наноленты графена $L_c = 2.3, 4.8, 9.7, 19.5, 39.2$ нм). Также в качестве графеновой наночастицы будут рассмотрены циклические цепочки (углеродные нанотрубки) из $N_c = 20, 40, 80$ звеньев (см. рис. 2*d,e,f*). Промоделируем свободное движение наночастицы по такой многослойной подложке.

Сначала поместим наночастицу у левого края подложки, как показано на рис. 2. Далее найдем стационарное состояние системы «наночастица + трехслойная подложка». Для этого численно методом сопряженных градиентов решим задачу на минимум энергии:

$$E \rightarrow \min : \{\mathbf{u}_{n,k}\}_{n=1, k=1}^{N_k, K}, \quad (12)$$

где число цепей $K = 4$, число узлов $N_1 = N_2 = N_3 = N_{ab} = 2400$, $N_4 = N_c$. Типичный вид стационарных состояний показан на рис. 2. Как видно на рисунке, нанотрубка графена в результате взаимодействия с подложкой с увеличением ее радиуса (числа звеньев N_c) начинает приобретать сплюснутую каплевидную форму.

Для получения термализованного состояния системы поместим ее в термостат Ланжевена. Для этого зафиксируем x -координаты краевых частиц BN-цепей (положим скорости $\{\dot{x}_{1,k} \equiv 0, \dot{x}_{N_{ab},k} \equiv 0\}_{k=1}^{K-1}$) и x -координату центральной частицы G-цепи ($\dot{x}_{N_c/2,K} \equiv 0$) и численно проинтегрируем систему уравнений Ланжевена

$$M_2 \ddot{\mathbf{u}}_{n,k} = -\frac{1}{c} \frac{\partial H}{\partial \mathbf{u}_{n,k}} - \Gamma M_2 \dot{\mathbf{u}}_{n,k} + \Xi_{n,k}, \quad (13)$$

$$k = 1, \dots, K - 1, \quad n = 1, \dots, N_{bn},$$

$$M_1 \ddot{\mathbf{u}}_{n,K} = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{u}_{n,K}} - \Gamma M_1 \dot{\mathbf{u}}_{n,K} + \Xi_{n,K}, \quad (14)$$

$$n = 1, \dots, N_c,$$

где $\Gamma = 1/t_r$ — коэффициент трения (время релаксации $t_r = 0.4$ пс), $\Xi_{n,k} = (\xi_{n,k,1}, \xi_{n,k,2})$ — двумерный вектор нормально распределенных случайных сил, нормализованных условиями

$$\langle \xi_{n,k_1,i}(t_1) \xi_{l,k_2,j}(t_2) \rangle = 2M\Gamma k_B T \delta_{nl} \delta_{k_1 k_2} \delta_{ij} \delta(t_2 - t_1)$$

(T — температура термостата, k_B — постоянная Больцмана, масса $M = M_2/c$ при $k < K$ и $M = M_1$ при $k = K$).

Возьмем начальные условия для системы уравнений движения Ланжевена (13), (14) соответствующими основному стационарному состоянию системы

$$\{\mathbf{u}_{n,k}(0) = \mathbf{u}_{n,k}^0, \quad \dot{\mathbf{u}}_{n,k}(0) = \mathbf{0}\}_{n=1, k=1}^{N_k, K}$$

и численно проинтегрируем систему в течение времени $t_0 = 20t_r$. За это время система придет в полное равновесие с термостатом, и мы получим термализованное состояние системы

$$\{\mathbf{w}_{n,k} = \mathbf{u}_{n,k}(t_0), \quad \mathbf{v}_{n,k} = \dot{\mathbf{u}}_{n,k}(t_0)\}_{n=1, k=1}^{N_k, K}$$

Для моделирования свободного движения наночастицы по термализованной многослойной подложке оставим фиксированными только x координаты краевых узлов ВН-цепей, уберем взаимодействие системы с термостатом, а всем атомам наночастицы сообщим дополнительную начальную скорость $v_0 > 0$, направленную вдоль оси x . Для этого численно проинтегрируем систему уравнений движения

$$M_2 \ddot{\mathbf{u}}_{n,k} = -\frac{1}{c} \frac{\partial H}{\partial \mathbf{u}_{n,k}}, \quad (15)$$

$$k = 1, \dots, K - 1, \quad n = 1, \dots, N_{bn},$$

$$M_1 \ddot{\mathbf{u}}_{n,K} = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{u}_{n,K}}, \quad (16)$$

$$n = 1, \dots, N_c,$$

с начальными условиями

$$\mathbf{u}_{n,k}(0) = \mathbf{w}_{n,k}, \quad \dot{\mathbf{u}}_{n,k}(0) = \mathbf{v}_{n,k}, \quad (17)$$

$$n = 1, \dots, N_{bn}, \quad k = 1, \dots, K - 1,$$

$$\mathbf{u}_{n,K}(0) = \mathbf{w}_{n,K}, \quad \dot{\mathbf{u}}_{n,K}(0) = \mathbf{v}_{n,K} + v_0 \mathbf{e}_x, \quad (18)$$

$$n = 1, \dots, N_c,$$

где вектор $\mathbf{e}_x = (1, 0)$.

Проследим за движением центра тяжести наночастицы $x_c = (x_{1,K} + x_{2,K} + \dots + x_{N_c,K})/N_c$ вдоль

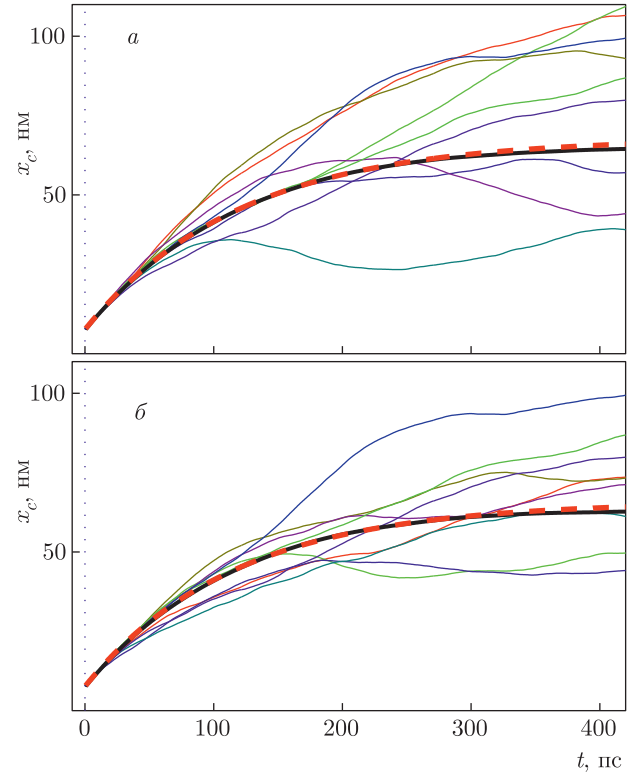


Рис. 6. Зависимость центра тяжести графеновой наночастицы x_c от времени t при температуре подложки $T = 300$ К. Тонкие кривые показывают 9 траекторий движения для различных независимых начальных реализаций термализованного состояния системы. Сплошная толстая (черная) линия дает траекторию среднего значения центра тяжести \bar{x}_c , полученную по 256 независимым реализациям термализованного состояния системы. Рисунок *a* показывает динамику для линейной цепи (наноленты), рис. *б* — для циклической цепи (нанотрубки) с $N_c = 20$ звеньями. Штриховые (красные) линии показывают зависимость (19) при значении коэффициента эффективного трения $\gamma = 8.3$ и 8.6 нс^{-1}

подложки. Характер движения графеновых наночастиц (нанолент и нанотрубок) показан на рис. 6. Как видно на рисунке, вид траектории $x_c(t)$ зависит от реализации начального термализованного состояния системы, но взаимодействие с подложкой всегда приводит к торможению направленного движения частицы (начальная скорость движения $v_0 = 500$ м/с). Если траектории усреднить по всем независимым реализациям термализованного состояния системы (взять среднее значение $\bar{x}_c(t) = \langle x_c(t) \rangle$), то динамика наночастицы с хорошей точностью описывается как движение частицы в вязкой среде:

$$\bar{x}_c(t) = \bar{x}_c(0) + v_0 [1 - \exp(-\gamma t)] / \gamma, \quad (19)$$

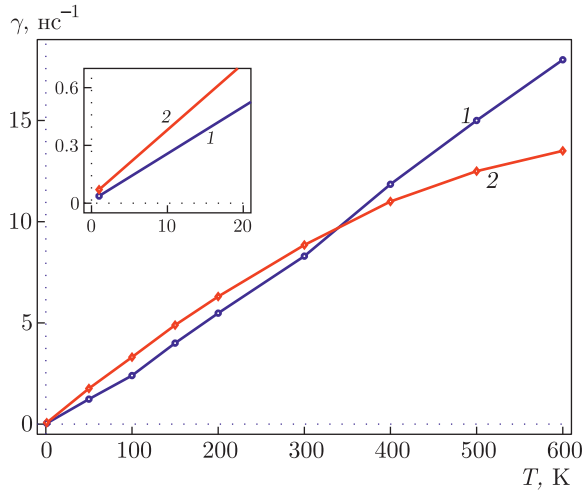


Рис. 7. Зависимость коэффициента трения γ от температуры T для линейной (наноленты) и циклической цепи (нанотрубки) из $N_c = 20$ звеньев (соответственно кривые 1 и 2)

с коэффициентом вязкого «трения» $\gamma > 0$ (обратная величина γ^{-1} соответствует времени, за которое начальная скорость наночастицы уменьшается в e раз). Так, при $N_c = 20$ и температуре $T = 300$ К коэффициент эффективного трения для движения по подложке наноленты и нанотрубки $\gamma = 8.3$ и 8.6 ns^{-1} , см. рис. 6.

Численное моделирование динамики наночастиц показало, что ее вязкое торможение (19) происходит при всех размерах наночастиц и температурах подложки $0 < T \leq 600\text{K}$, но значение коэффициента эффективного трения γ зависит от температуры, размера и типа наночастицы. Зависимость γ от температуры показана на рис. 7. Как видно на рисунке, коэффициент трения монотонно растет с увеличением температуры. При $T \leq 300\text{K}$ уменьшение температуры приводит к практически линейному уменьшению эффективного трения γ до значений, близких к нулю. Это позволяет заключить, что причиной торможения наночастиц является их взаимодействие с тепловыми колебаниями. Главную роль в этом взаимодействии играют изгибные колебания цепей — если уменьшить их амплитуду, то значительно уменьшается и эффективное трение. Так, если увеличить в десять раз энергию деформации валентных углов ϵ_i , $i = 1, 2$, увеличивая изгибную жесткость цепей, то коэффициент трения для цепи из $N_c = 20$ звеньев при $T = 300\text{K}$ уменьшится от значения $\gamma = 8.3$ до значения 3.5 ns^{-1} для линейной и от значения $\gamma = 8.6$ до 3.2 ns^{-1} для циклической цепи.

Заметим, что полученный существенный рост трения с увеличением температуры парадоксальным образом отличается от стандартных сценариев трения, где трение всегда уменьшается с увеличением температуры [29]. Отличие связано с тем, что в рассматриваемой системе трение имеет волновую природу (обусловлено взаимодействием с тепловыми колебаниями). Увеличение силы трения слоев G/h-BN с увеличением температуры также получено в работе [30].

С увеличением размера наночастицы коэффициент эффективного трения уменьшается. Так, при $T = 300$ К для циклической G-цепи (для нанотрубки) при числе звеньев $N_c = 20$ коэффициент трения для ее движения по подложке $\gamma = 8.6 \text{ ns}^{-1}$, при $N_c = 40$ коэффициент $\gamma = 4.6 \text{ ns}^{-1}$, а при $N_c = 80$ уже $\gamma = 1.9 \text{ ns}^{-1}$.

Торможение наночастицы происходит из-за ее взаимодействия с атомами многослойной подложки. Для того чтобы определить распределение сил торможения вдоль движущейся наноленты графена, найдем средние значения продольных сил $F_{x,n}$, действующих со стороны подложки на узлы G-цепи. Вектор силы

$$\mathbf{F}_n = (F_{x,n}, F_{z,n}) = \sum_{k=1}^{K-1} \sum_{l=1}^{N_{ab}} \frac{\partial W_2(r_{l,k;n,K})}{\partial \mathbf{u}_{n,K}},$$

расстояние $r_{l,k;n,K} = |\mathbf{u}_{n,K} - \mathbf{u}_{l,k}|$.

Для нахождения средних значений сил при численном интегрировании системы уравнений движения (15), (16) с начальными условиями (17), (18) найдем распределение вдоль G-цепи продольных сил взаимодействия с подложкой:

$$\bar{F}_{x,n}(v) = \left\langle \frac{1}{t_1} \int_0^{t_1} F_{x,n}(t) dt \right\rangle$$

при начальной скорости движения $v = 500$ м/с. Возьмем время усреднения $t_1 = 100$ пс (как видно на рис. 6, на начальном интервале времени $[0, t_1]$ наночастица всегда сохраняет направленное движение). Найдем также средние значения этих сил для неподвижной частицы $\bar{F}_{x,n}(0)$ (значения сил при начальной скорости движения $v = 0$). Тогда можно определить силы торможения, препятствующие направленному движению как

$$F_{n,b}(v) = \bar{F}_{x,n}(v) - \bar{F}_{x,n}(0).$$

Распределение сил торможения вдоль G-цепи (вдоль наноленты графена) показано на рис. 8. Как

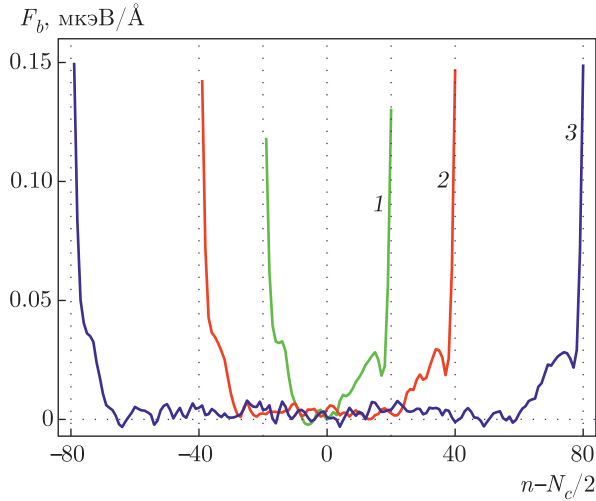


Рис. 8. Распределение вдоль G-цепи сил торможения движения (сил трения) F_b при числе звеньев цепи $N_c = 40, 80, 160$ (кривые 1, 2, 3). Начальная скорость движения цепи $v = 500$ м/с, температура подложки $T = 300$ К

видно на рисунке, главное действие силы трения с подложкой оказывают на края наноленты — на краях силы торможения значительно выше сил торможения во внутренней части цепи. Моделирование показало, что силы торможения прямо пропорциональны значению начальной скорости наночастицы v . Все это позволяет говорить о наличии двух сил трения — краевого трения, действующего на концевые атомы и значительно более слабого внутреннего трения, действующего на все остальные атомы цепи.

Наличие краевого трения позволяет объяснить зависимость коэффициента трения γ от длины цепи. Зависимость γ от числа звеньев линейной цепи N_c представлена на рис. 9. Как видно на рисунке, с увеличением длины цепи коэффициент эффективного трения монотонно уменьшается при всех значениях температуры.

Предположим, что при движении цепи по подложке со скоростью v на каждый ее узел действует одинаковая сила трения $F_1 = -M_1\gamma_1v$ (сила трения соприкасающихся поверхностей) и сила $F_2 = -M_1\gamma_2v$, действующая только на краевые узлы (сила краевого трения), тогда общий коэффициент трения для цепи из N_c звеньев

$$\gamma(N_c) = \gamma_1 + 2\gamma_2/N_c. \quad (20)$$

Полученные из численного моделирования динамики значения коэффициента трения γ для цепей с числом звеньев $N_c = 20, 40, 80, 160, 320$ с хорошей точностью подтверждают зависимость (20) (см. рис. 9). При температуре $T = 100$ К коэффициент

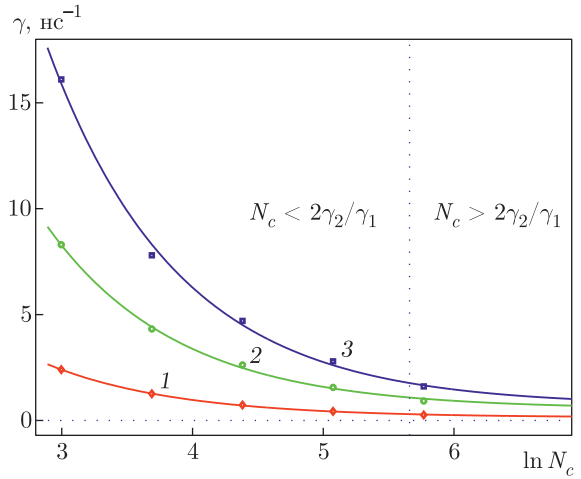


Рис. 9. Зависимость коэффициента трения γ от числа звеньев линейной G-цепи N_c (от длины наноленты) при температуре $T = 100, 300, 500$ К (кривые 1, 2, 3). Точки — значения, найденные численно, линии — зависимости $\gamma = \gamma_1 + 2\gamma_2/N_c$ со значениями коэффициентов γ_1, γ_2 соответственно $0.14, 22.6; 0.54, 77.5; 0.71, 152$ нс⁻¹

внутреннего трения $\gamma_1 = 0.14$, коэффициент краевого трения $\gamma_2 = 22.6$ нс⁻¹, при $T = 300$ К коэффициенты $\gamma_1 = 0.54, \gamma_2 = 77.5$ нс⁻¹, при $T = 500$ К коэффициенты $\gamma_1 = 0.71, \gamma_2 = 152$ нс⁻¹. Как следует из этих цифр, коэффициент краевого всегда значительно превышает коэффициент внутреннего трения ($\gamma_2 \gg \gamma_1$). Оба вида трения будут давать одинаковый вклад в торможение движения цепи при числе звеньев $\bar{N}_c = 2\gamma_2/\gamma_1$. При меньшем числе звеньев главный вклад в торможение будет давать краевое, а при большем — внутреннее трение. При $T = 100$ К это характерное число узлов $\bar{N}_c = 323$, при $T = 300$ К число $\bar{N}_c = 287$, при $T = 500$ К $\bar{N}_c = 428$. Таким образом, при размерах наночастиц $L < 35$ нм основной вклад в торможение ее движения по многослойной подложке будет давать краевое трение (трение краев наночастицы с подложкой), а при $L > 35$ нм — внутреннее трение (трение внутренней поверхности наночастицы с подложкой).

Отметим, что полученные оценки не зависят от числа краевых узлов, на которые действует краевое трение. Если краевое трение действует на N_e конечных узлов с каждого края, то формула (20) примет вид

$$\gamma(N_c) = \gamma_1 + 2N_e\gamma'_2/N_c, \quad (21)$$

где $N_e\gamma'_2 = \gamma_2$.

4. ПОДВИЖНОСТЬ НАНОЧАСТИЦ

Если частица движется в вязкой среде под действием внешней силы F_x , то ее динамика описывается уравнением движения

$$M\ddot{x}_c = -\gamma M\dot{x}_c + F_x, \quad (22)$$

где $M = N_c M_1$ — масса частицы. Из уравнения (22) следует, что со временем частица всегда будет двигаться с установившейся постоянной скоростью $v_F = F_x/\gamma M$. Здесь подвижность частицы, отношение средней скорости ее движения к силе,

$$\mu = v_F/F_x = 1/\gamma N_c M_1. \quad (23)$$

Найдем подвижность наночастицы μ из прямого моделирования ее движения по термализованной подложке под действием постоянной силы $F_x > 0$ на узел G-цепи с номером $n = N_c/2$. Здесь динамика узлов G-цепи будет задаваться системой уравнений движения

$$M_1 \ddot{\mathbf{u}}_{n,K} = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{u}_{n,K}} + F_x \delta_{n,N_c/2} \mathbf{e}_x, \quad (24)$$

$$n = 1, \dots, N_c.$$

Таким образом, для моделирования вынужденного движения наночастицы нужно численно проинтегрировать систему уравнений движения (15), (24) с начальными условиями (17), (18), где скорость начального движения $v_0 = F_x/\gamma N_c M_1$.

Численное моделирование движения показало, что под действием постоянной силы $F_x > 0$ наночастица всегда (при любом значении температуры T и числа звеньев N_c) выходит на режим движения вдоль подложки с постоянной скоростью $v_F > 0$ (см. рис. 10). Конечно, вид траектории движения центра тяжести наночастицы $x_c(t)$ зависит от выбора начального термализованного состояния системы $\{\mathbf{w}_{n,k}, \mathbf{v}_{n,k}\}_{n=1, k=1}^{N_c, K}$ — могут происходить небольшие флуктуации скорости движения частицы. Но если усреднить по всем независимым реализациям начального термализованного состояния, то движение центра тяжести будет происходить с постоянной скоростью

$$\bar{x}_c(t) = \langle x_c(t) \rangle = \bar{x}_c(0) + v_F t. \quad (25)$$

Таким образом, движение наночастицы под действием постоянной силы по многослойной подложке происходит с постоянным значением скорости, а при выходе частицы на край подложки происходит ее отражение от края (см. рис. 10).

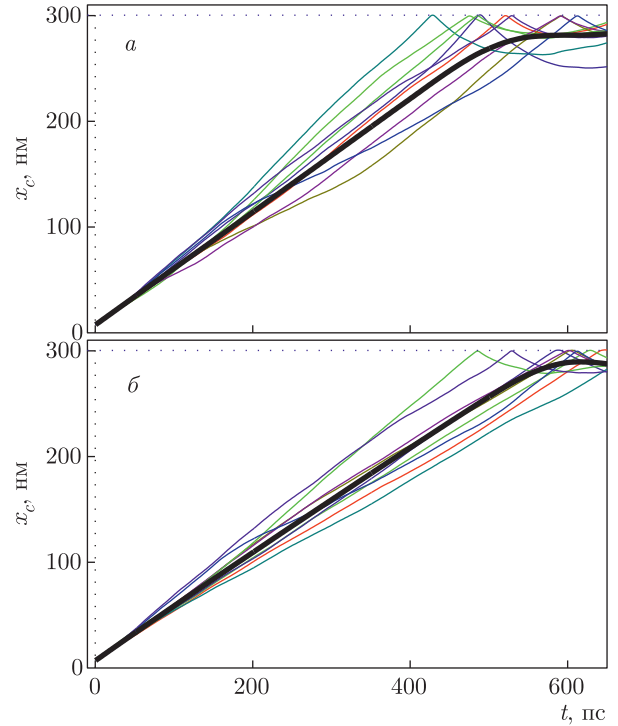


Рис. 10. Зависимость центра тяжести графеновой наночастицы x_c из $N_c = 20$ звеньев от времени t при температуре подложки $T = 300$ К и внешней силе $F_x = 0.001$ эВ/Å. Тонкие кривые показывают 9 траекторий движения для различных независимых начальных реализаций термализованного состояния системы. Сплошная толстая (черная) линия дает траекторию среднего значения центра тяжести \bar{x}_c , полученную по 256 независимым реализациям термализованного состояния системы. Рисунок *a* показывает динамику для линейной цепи (наноленты), рис. *б* — для циклической цепи (нанотрубки). Скорости установившегося движения частиц $v_F = 542$ и 530 м/с

Значение постоянной скорости движения наночастицы v_F практически линейно зависит от величины силы F_x . Поэтому мы всегда можем найти подвижность наночастицы $\mu = v_F/F_x$. Зависимость подвижности наночастицы от температуры подложки показана на рис. 11. Как видно на рисунке, подвижность монотонно убывает с ростом температуры, а значение подвижности хорошо приближается формулой (23).

Таким образом, полученные значения подвижности подтверждают, что движение наночастиц на многослойной термализованной подложке носит характер движения частицы в вязкой среде, вязкость которой сильно зависит от значения температуры. С увеличением температуры возрастает сопротивление среды движению наночастицы. Возникающее эффективное трение имеет волновую природу, его

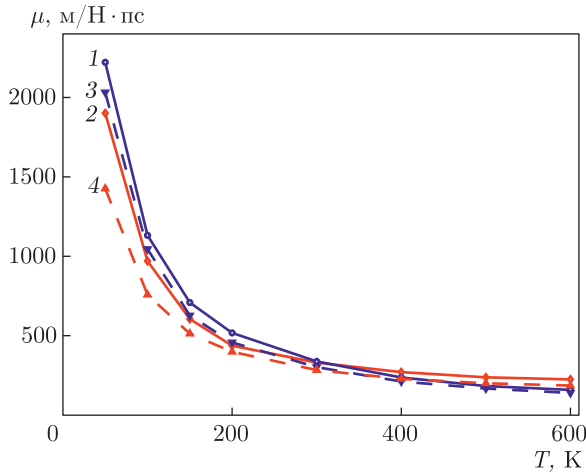


Рис. 11. Зависимость подвижности μ линейной и циклической G-цепи (наноленты и нанотрубки) из $N_c = 20$ звеньев от температуры подложки T . Сплошные кривые 1 и 2 дают значения, полученные из прямого моделирования движения наночастицы под действием внешней силы, штриховые кривые 3 и 4 — значения, полученные из формулы (23). Кривые 1 и 3 дают зависимости для наноленты, 2 и 4 — для нанотрубки

значение обусловлено в первую очередь взаимодействием наночастицы с тепловыми поперечными колебаниями слоев подложки. Чем сильнее эти колебания (чем выше температура), тем сильнее это взаимодействие и тем сильнее происходит отток кинетической энергии наночастицы в подложку.

5. ВЛИЯНИЕ НА ТРЕНИЕ СИЛЫ ДАВЛЕНИЯ НАНОЧАСТИЦЫ НА ПОДЛОЖКУ

Согласно эмпирическому закону Амонтона–Кулона сила трения скольжения одного тела по поверхности другого тела (опоры) пропорциональна силе давления тела на опору (чем больше давление, тем больше сила трения). Проверим этот закон для наночастиц, находящихся на многослойной плоской подложке, выполняющей роль опоры. Для этого рассмотрим движение линейной G-цепи (наноленты) в присутствии силы F_z , вертикально прижимающей ее к подложке. В этом случае динамика звеньев G-цепи будет описываться системой уравнений движения:

$$M_1 \ddot{\mathbf{u}}_{n,K} = -\frac{\partial H}{\partial \mathbf{u}_{n,K}} - F_z \mathbf{e}_z, \quad n = 1, \dots, N_c, \quad (26)$$

где вектор $\mathbf{e}_z = (0, 1)$. Таким образом, для моделирования движения наночастицы при наличии прижи-

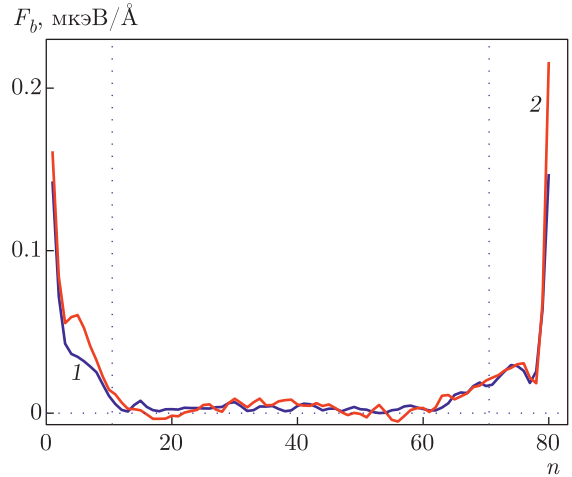


Рис. 12. Распределение сил торможения движения (сил трения) F_b вдоль G-цепи из $N_c = 80$ звеньев при силе давления $F_z = 0$ (кривая 1) и $F_z = 0.03$ эВ/Å. Начальная скорость движения цепи $v = 500$ м/с, температура подложки $T = 300$ К

мающей ее к подложке вертикальной силы нужно численно проинтегрировать систему уравнений движения (15), (26) с начальными условиями (17), (18).

Численное моделирование динамики показало, что добавление вертикальной силы, прижимающей G-цепь к подложке, приводит к возрастанию краевых и уменьшению внутренних сил торможения (см. рис. 12). Так, при начальной скорости движения $v = 500$ м/с, температуре $T = 300$ К для цепи из $N_c = 80$ звеньев в отсутствие давления (при силе $F_z = 0$) сила внутреннего торможения

$$F_{b,1} = \sum_{n=11}^{N_c-10} F_{n,b} = 0.259 \cdot 10^{-3} \text{ эВ/Å},$$

сила краевого торможения

$$F_{b,2} = \sum_{n=1}^{10} F_{n,b} + \sum_{n=N_c-9}^{N_c} F_{n,b} = 0.848 \cdot 10^{-3} \text{ эВ/Å}.$$

При давлении $F_z = 0.03$ эВ/Å сила внутреннего торможения уменьшается $F_{b,1} = 0.249$ эВ/Å, а сила краевого торможения увеличивается $F_{b,2} = 1.068$ эВ/Å.

С увеличением силы давления F_z коэффициент эффективного трения наночастицы с подложкой γ монотонно увеличивается (см. рис. 13). Полученные зависимости коэффициента трения от числа звеньев цепи N_c (длины наноленты) при разных значениях силы давления с хорошей точностью аппроксимируются формулой (20). Поэтому при каждом значении

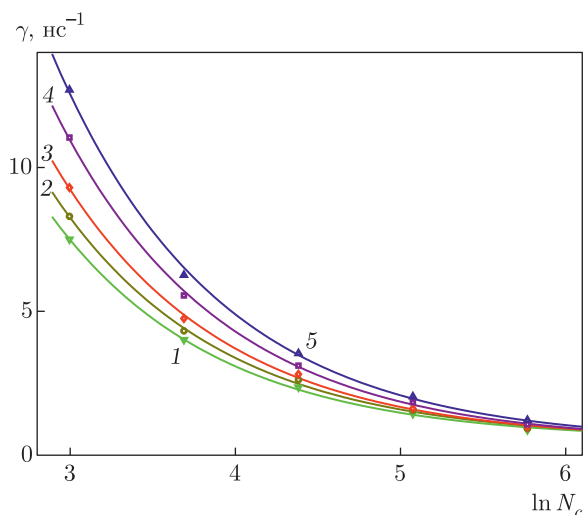


Рис. 13. Зависимость коэффициента трения γ от числа звеньев линейной G-цепи N_c (от длины наноленты) при силе давления $F_z = -0.01, 0, 0.01, 0.03, 0.05$ эВ/Å (кривые 1, 2, 3, 4, 5). Точки — значения, найденные численно, линии — аппроксимирующие эти значения зависимости $\gamma = \gamma_1 + 2\gamma_2/N_c$. Температура подложки $T = 300$ К

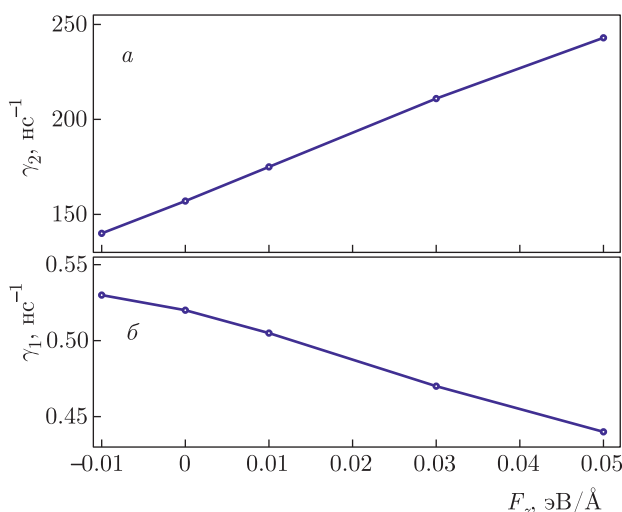


Рис. 14. Зависимость коэффициентов краевого γ_2 и внутреннего γ_1 трения (рис. а, б) от силы давления на наноленту F_z при температуре подложки $T = 300$ К

силы F_z мы можем определить значение коэффициентов внутреннего γ_1 и краевого γ_2 трения. Зависимости этих коэффициентов от силы давления представлены на рис. 14. Как видно на рисунке, величина коэффициента краевого трения (трения краев наночастицы с подложкой) γ_2 линейно растет, а величина коэффициента внутреннего трения (трения внутренней поверхности наночастицы с подложкой)

γ_1 монотонно уменьшается с увеличением силы давления F_z .

Полученные зависимости $\gamma_1(F_z), \gamma_2(F_z)$ позволяют заключить, что при размерах наночастицы, при которых главную роль в торможении ее движения по подложке играет краевое трение, закон Амонтона – Кулона выполняется, а при размерах, при которых главную роль играет внутреннее трение, — не выполняется (здесь увеличение нагрузки будет уже приводить к уменьшению общего трения). Таким образом, для нанолент графена на многослойной подложке h-BN эмпирический закон Амонтона-Кулона будет выполняться при длинах $L < 250$ нм и перестанет выполняться при $L > 250$ нм.

Заметим, что понижение трения между листами графена и h-BN при увеличении давления, т. е. прямое нарушение закона Амонтона – Кулона, было обнаружено в работе [30] при моделировании протаскивания листа графена по листу нитрида бора (при увеличении давления сила трения может уменьшиться на 30%). При протаскивании бесконечных листов краевое трение отсутствует, поэтому этот результат согласуется с понижением коэффициента внутреннего трения γ_1 при повышении внешней нагрузки. Здесь имеет место эффект «отрицательного коэффициента трения (ОКТ)» — уменьшение трения при увеличении нормальной нагрузки [36, 37]. Это парадоксальное поведение связано с тем, что нормальная нагрузка приводит к уменьшению амплитуды изгибных тепловых колебаний слоев (в силу этого уменьшается коэффициент внутреннего трения γ_1). Но нормальная нагрузка на конечный лист графена приводит к вдавливанию краев листа в подложку. Из-за этого краевое сопротивление (коэффициент краевого трения γ_2) увеличивается пропорционально увеличению нагрузки. Поэтому эффект ОКТ будет наблюдаться только для листов достаточно больших размеров, когда трение краев листа будет оказывать более слабое влияние, чем трение с подложкой внутренней поверхности листа.

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Моделирование свободного движения графеновых наночастиц (нанолент и нанотрубок) показало, что их движение на плоской многослойной подложке h-BN можно описать как движение частицы в вязкой среде с постоянным коэффициентом трения (коэффициентом релаксации скорости) γ . Торможение движения происходит из-за перекачки кинетической энергии наночастицы в подложку. Величи-

на коэффициента эффективного трения наночастицы с подложкой монотонно увеличивается с увеличением температуры T . При $T \leq 300\text{K}$ уменьшение температуры приводит к линейному уменьшению γ до очень низких значений. Такое поведение объясняется волновой природой эффективного трения — причиной торможения движения наночастиц является их взаимодействие с тепловыми (в первую очередь изгибными) колебаниями листов подложки.

С увеличением размера наночастицы коэффициент эффективного трения монотонно уменьшается при всех значениях температуры. Анализ распределения вдоль движущейся наноленты сил торможения показывает, что трение разделяется на два типа: на внутреннее и краевое (на трение внутренней поверхности наноленты и ее краев с поверхностью подложки). Такое разделение сил трения объясняет зависимость значения коэффициента от длины наноленты. Коэффициент краевого трения γ_2 всегда значительно превышает коэффициент внутреннего трения γ_1 . Общий коэффициент $\gamma = \gamma_1 + 2\gamma_2 a/L$, где a — продольный шаг наноленты, L — ее длина. При длинах $L < 35$ нм главную роль в торможении движения наноленты играет краевое, а при $L > 35$ нм — внутреннее трение.

Моделирование подвижности наночастиц показало, что под действием постоянной продольной силы их динамика всегда выходит на режим движения с постоянной скоростью, значение которой прямо пропорционально значению силы и обратно пропорционально значению коэффициента трения γ . Это подтверждает, что динамика графеновых наночастиц (нанолент и нанотрубок) на многослойной термализованной подложке выглядит как движения частицы в вязкой среде, вязкость которой увеличивается с ростом температуры. Возникающее эффективное трение имеет волновую природу, его значение обусловлено в первую очередь взаимодействием наночастицы с тепловыми поперечными колебаниями слоев подложки. Чем сильнее эти колебания (чем выше температура), тем сильнее это взаимодействие и тем сильнее происходит торможение движения частицы.

Моделирование движения наноленты при наличии нормальной (прижимающей к подложке) нагрузки показало, что рост нагрузки приводит к уменьшению внутреннего трения из-за уменьшения под нанолентой амплитуды тепловых изгибных колебаний слоев подложки и к увеличению краевого трения из-за вдавливания краев наноленты в подложку. Поэтому замеченный ранее в работах [30, 36, 37] эффект «отрицательного коэффициен-

та трения» (уменьшение трения при увеличении нормальной нагрузки) может наблюдаться только для нанолент достаточно большого размера ($L > 250$ нм), когда главную роль играет внутреннее трение.

Финансирование. Научно-исследовательская работа выполнена за счет субсидии, выделенной Федеральным исследовательским центром химической физики Российской академии наук на выполнение государственного задания (тема 0082-2019-0005). Вычислительные ресурсы предоставлены межведомственным суперкомпьютерным центром Российской академии наук.

ЛИТЕРАТУРА

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**(5696), 666 (2004).
2. A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, and A. K. Geim, *Rev. Mod. Phys.* **81**, 109 (2009).
3. E. Koren, I. Leven, E. Lörtscher, A. Knoll, O. Hod, and U. Duerig, *Nature Nanotech.* **11**, 752 (2016).
4. J. C. Meyer, A. K. Geim, M. Katsnelson, K. Novoselov, T. Booth, and S. Roth, *Nature* **446**, 60 (2007).
5. C. Lee, X. Wei, J. W. Kysar, and J. Hone, *Science* **321**, 385 (2008).
6. A. Falin, Q. Cai, E. J. G. Santos, D. Scullion, D. Qian, R. Zhang, Z. Yang, S. Huang, K. Watanabe, T. Taniguchi, M. R. Barnett, Y. Chen, R. S. Ruoff, and L. H. Li, *Nat. Commun.* **8**, 15815 (2017).
7. E. Han, J. Yu, E. Annevelink, J. Son, D. A. Kang, K. Watanabe, T. Taniguchi, E. Ertekin, P. Y. Huang, and A. M. van der Zande, *Nature Materials* **19**, 305 (2020).
8. P. E. Sheehan and C. M. Lieber, *Science* **272**, 1158 (1996).
9. M. Dienwiebel, G. S. Verhoeven, N. Pradeep, J. W. Frenken, J. A. Heimberg, and H. W. Zandbergen, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 126101 (2004).
10. C. Lee, Q. Li, W. Kalb, X.-Z. Liu, H. Berger, R. W. Carpick, and J. Hone, *Science* **328**, 76 (2010).
11. S. Cahangirov, C. Ataca, M. Topsakal, H. Sahin, and S. Ciraci, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 126103 (2012).
12. Z. Liu, J. Yang, F. Grey, J. Z. Liu, Y. Liu, Y. Wang, Y. Yang, Y. Cheng, and Q. Zheng, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 205503 (2012).

13. J. Yang, Z. Liu, F. Grey, Z. Xu, X. Li, Y. Liu, M. Urbakh, Y. Cheng, and Q. Zheng, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 255504 (2013).
14. E. Koren, E. Lörtscher, C. Rawlings, A. W. Knoll, and U. Duerig, *Science* **348**, 679 (2015).
15. I. Leven, D. Krepel, O. Shemesh, and O. Hod, *J. Phys. Chem. Lett.* **4**, 115 (2013).
16. A. Geim and I. Grigorieva, *Nature* **499**, 419 (2013).
17. K. S. Novoselov, A. Mishchenko, A. Carvalho, and A. H. Castro Neto, *Science* **353**(6298), 461 (2016).
18. C. R. Woods, L. Britnell, A. Eckmann, R. S. Ma, J. C. Lu, H. M. Guo, X. Lin, G. L. Yu, Y. Cao, R. V. Gorbachev, A. V. Kretinin, J. Park, L. A. Ponomarenko, M. I. Katsnelson, Y. N. Gornostyrev, K. Watanabe, T. Taniguchi, C. Casiraghi, H. J. Gao, A. K. Geim, and K. S. Novoselov, *Nature Phys.* **10**, 451 (2014).
19. G. J. Slotman, M. M. van Wijk, P. L. Zhao, A. Fasolino, M. I. Katsnelson, and S. Yuan, *Phys. Rev. Lett.* **115**, 186801 (2015).
20. D. Mandelli, I. Leven, O. Hod, and M. Urbakh, *Sci. Rep.* **7**(1), 10851 (2017).
21. J. A. Williams and H. R. Le, *J. Phys. D: Appl. Phys.* **39**, R201 (2006).
22. K. Shinjo and M. Hirano, *Surface Science* **283**, 473 (1993).
23. O. Hod, E. Meyer, Q. Zheng, and M. Urbakh, *Nature (London)* **563**, 485 (2018).
24. J. M. Martin and A. Erdemir, *Phys. Today* **71**, No. 4, 40 (2018).
25. M. Z. Baykara, M. R. Vazirisereshk, and A. Martini, *Appl. Phys. Rev.* **5**, 041102 (2018).
26. D. Berman, A. Erdemir, and A. V. Sumant, *ACS Nano* **12**, 2122 (2018).
27. Y. Song, D. Mandelli, O. Hod, M. Urbakh, M. Ma, and Q. Zheng, *Nat. Mater.* **17**, 894 (2018).
28. W. Ouyang, D. Mandelli, M. Urbakh, and O. Hod, *Nano Lett.* **18**(9), 6009 (2018).
29. A. Vanossi, N. Manini, M. Urbakh, S. Zapperi, and E. Tosatti, *Rev. Mod. Phys.* **85**, 529 (2013).
30. D. Mandelli, W. Ouyang, O. Hod, and M. Urbakh, *Phys. Rev. Lett.* **122**, 076102 (2019).
31. A. V. Savin, E. A. Korznikova, and S. V. Dmitriev, *Phys. Rev. B* **92**, 035412 (2015).
32. А. В. Савин, Е. А. Корзникова, С. В. Дмитриев, *ФТТ* **57**(11), 2278 (2015).
33. A. V. Savin, E. A. Korznikova, and S. V. Dmitriev, *Phys. Rev. B* **99**, 235411 (2019).
34. J. H. Los, J. M. H. Kroes, K. Albe, R. M. Gordillo, M. I. Katsnelson, and A. Fasolino, *Phys. Rev. B* **96**, 184108 (2017).
35. A. K. Rappé, C. J. Casewit, K. S. Colwell, W. A. Goddard III, and W. M. Skiff, *J. Amer. Chem. Soc.* **114**, 10024 (1992).
36. S.-W. Liu, H.-P. Wang, Q. Xu, T.-B. Ma, G. Yu, C. Zhang, D. Geng, Z. Yu, S. Zhang, W. Wang, Y.-Z. Hu, H. Wang, and J. Luo, *Nat. Commun.* **8**, 14029 (2017).
37. Y. Liu, A. Song, Z. Xu, R. Zong, J. Zhang, W. Yang, R. Wang, Y. Hu, J. Luo, and T. Ma, *ACS Nano* **12**, 7638 (2018).