

CONSIDERATION OF LINEAR TOPOLOGICAL DEFECTS IN SILICENE THROUGH MOLECULAR DYNAMICS AND *AB-INITIO* CALCULATIONS

Igor Vitalievich Kosarev^{1a}, *Andrey Aleksandrovich Kistanov*¹, *Marat Rafikovich Ibragimov*¹,
*Elena Aleksandrovna Korznikova*¹, *Sergey Vladimirovich Dmitriev*²

¹ Laboratory of Metals and Alloys under Extreme Impacts, Ufa University of Science and Technology, 32 Zaki Validi str., Ufa 450076 Russia

² Institute of Physics of Molecules and Crystals, Ufa Federal Research Center, 71 pr. Oktyabrya, Ufa 450054 Russia

^a igor.v.kosarev@gmail.com

ABSTRACT

Defects in two-dimensional materials are of significant interest because they have a significant impact on the properties of the material. Using the molecular dynamics method and *ab-initio* calculations, linear topological defects in silicene are studied. Silicene has an extended honeycomb structure, a two-dimensional hexagonal structure with two atoms per unit cell, one above and one below relative to the plane of the sheet. Silicene can have two energetically equivalent structures, depending on which of the two atoms of the unit cell is located above. Topological defects are formed at the junction of these structures. Such defects do not imply the need to break bonds and cannot disappear from the structure otherwise than through the annihilation of such topological defects of different signs. Relaxed structures of linear topological defects in silicene are shown, defect energies are calculated, and molecular dynamics and *ab-initio* data are compared. Similar defects exist in other two-dimensional materials of group IVA, such as germanene, stanene, plumbene, etc. As a result of the work using *ab-initio*, the existence of this type of defects was confirmed and options for its experimental detection were suggested.

KEYWORDS

Nanostructures; two-dimensional materials; xenes; silicene; *ab initio* calculations; molecular dynamics.

РАССМОТРЕНИЕ ЛИНЕЙНЫХ ТОПОЛОГИЧЕСКИХ ДЕФЕКТОВ В СИЛИЦЕНЕ ПОСРЕДСТВОМ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ И РАСЧЕТОВ *AB-INITIO*

Игорь Витальевич Косарев^{1a}, *Андрей Александрович Кистанов*¹,
*Марат Рафикович Ибрагимов*¹, *Елена Александровна Корзникова*¹,
*Сергей Владимирович Дмитриев*²

¹ Лаборатория металлов и сплавов при экстремальных воздействиях, Уфимский университет науки и технологий, Россия, 450076, Уфа, ул. Заки Валиди, 32

² Институт физики молекул и кристаллов, Уфимский федеральный исследовательский центр, Россия, 450054, Уфа, пр. Октября, 71

^a igor.v.kosarev@gmail.com

АННОТАЦИЯ

Дефекты в двумерных материалах представляют значительный интерес, так как оказывают существенное влияние на свойства материала. Используя метод молекулярной динамики и расчеты *ab-initio* исследуются линейные топологические дефекты в силицене. Силицен имеет структуру выдвинутых сот, представляющую собой двумерную гексагональную структуру с двумя атомами в элементарной ячейке, один из которых находится выше, а другой ниже относительно плоскости листа. Силицен может иметь две энергетически эквивалентные структуры, в зависимости от того, какой из двух атомов элементарной ячейки находится выше. На стыке этих структур образуются топологические дефекты. Такие дефекты не подразумевают необходимости разрыва связей и не могут исчезнуть из структуры иначе, кроме как аннигиляции таких топологических дефектов разных знаков. Показаны отрелаксированные структуры линейных топологических дефектов в силицене, подсчитаны энергии дефектов и проводится сравнение данных молекулярной динамики и данных *ab-initio*. Подобные дефекты существуют в других двумерных материалах группы IVA, таких как германен, станен, плюмбен и др. В результате работы посредством *ab-initio* подтверждено существование данного типа дефектов и предполагаются варианты их экспериментального обнаружения.

КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА

Наноструктуры; двумерные материалы; ксены; силицен; первопринципные расчеты; молекулярная динамика.

Введение

Прорывные исследования свойств графена [1] спровоцировали открытие и последующий повышенный интерес как ко многим другим двумерным (2D) материалам [2–4], так и к их производным, таким как нанотрубки [5]. Аналогами графена являются ксены, двумерные структуры состоящие из элементов группы IVA, а именно силицен, германен, станен и плюмбен [6–10]. Все ксены имеют гексагональную решетку, однако, в отличие от графена, относятся к структуре выдвинутых сот, состоящей из двух треугольных подрешеток, смещенных относительно друг друга по нормали к плоскости листа. Другими словами, в отличие от абсолютно плоского графена, ксены, включая и силицен, имеют некоторую толщину.

Благодаря своим электронным, магнитным и оптическим свойствам, а также имеющейся базе по обработке кремния [11, 12], силицен является перспективным для хранения и преобразования энергии [13, 14], для сенсоров и биосенсоров [15], разработки

новых материалов 2D-электродов для суперконденсаторов [16] и биомедицинских приложений [17, 18]. При этом для ксенов, имеющих толщину, включая и станен, в отличие от графена, из-за усиления спин-орбитального взаимодействия может наблюдаться квантовый спиновый эффект Холла [14].

Хорошо известно, что дефекты оказывают значительное влияние на многие свойства 2D-материалов [19–24]. Дефекты могут быть собственными, т.е. внесенными в материалы в процессе их синтеза. Это могут быть точечные дефекты, такие как вакансии, примеси, дефекты Стоуна-Уэйлса, линейные дефекты и т. д. В свою очередь внешние дефекты вводятся искусственно путем химической модификации и легирования.

С 2012 года силицен успешно синтезируется на различных подложках и, ввиду перспективности материала, стал горячей темой при изучении 2D-материалов [25]. Точечные дефекты, как вакансии, так и межузельные, уменьшают предельную деформацию сили-

цена, причем механические свойства сильнее всего снижаются в направлении зигзаг по сравнению с направлением кресла [26]. Прочность силицена снижается с увеличением плотности вакансий, угла перегиба границ зерен и соотношения ширины трещин [27].

Как уже упоминалось ранее, двумерные материалы группы IVA, за исключением графена, имеют определенную толщину (высоту выпучивания h [28, 29]). Толщина выпучивания силицена на подложке Ag(111) была измерена при температуре 5 К с помощью атомно-силовой микроскопии с точностью 0,1 Å, и наблюдалось смещение подрешеток в диапазоне от 0,8 до 1,1 Å [30].

В нашей работе по исследованию стабильности монослоя станена [31] молекулярно-динамическое моделирование с использованием потенциала Терсоффа показало, что отдельно стоящий станен может трансформироваться в плоскую конфигурацию с $h=0$ при достаточно большой деформации растяжения в плоскости. Так как данный метод подразумевает, что станен сохраняет стабильность, другими словами, происходят лишь упругие деформации, то снятие напряжения приводит к возврату выпученной структуры, причем возможны два эквивалентных пути выпучивания с одинаковой энергией, в зависимости от того, какая из двух треугольных подрешеток сдвинута в положительном, нормальном к плоскости листа направлении. Это означает существование в станене областей с положительной и отрицательной толщиной h , если толщину определить, как разность координат Z двух подрешеток, $h=Z_2-Z_1$. Для $Z_2>Z_1$ мы имеем h , и для $Z_2<Z_1$ h отрицателен. Доменная граница, разделяющая домены с положительным и отрицательным h , является топологическим дефектом, который может исчезнуть из структуры только в результате столкновения и аннигиляции с доменной стенкой с противоположным топологическим зарядом. Так как силицен, плюмбен, германен, как и станен, имеют аналогичную изогнутую структуру,

то данные дефекты, порожденные особенностью решетки, обязаны быть свойственны и другим ксенам, имеющим высоту. Таким образом, в другой нашей работе было проведено исследование данного типа дефектов в силицене методом молекулярной динамики, изучено влияние температуры, поведение дефектов в динамике [32]. В настоящей работе проводится исследование структуры и энергии линейных топологических дефектов, а также сравнение данных, полученных методом молекулярной динамики и посредством расчетов из первых принципов (*ab-initio*).

1. Методика

Молекулярная динамика (МД) используется для моделирования топологических дефектов в силицене с помощью Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator (LAMMPS) [31]. В качестве потенциала для кремния был выбран потенциал метода модифицированного встроенного атома (MEAM) на основе сплайнов cite [34] с дополнительным членом Стиллинджера-Вебера cite [35] и параметрами Баламана [36] в энергии. Этот потенциал придает структуру выдвинутых сот и симметрию решетки при введении рассматриваемых дефектов в отдельно стоящий силицен при 0 К. Периодические граничные условия применялись в плоскости листа силицена.

Спин-поляризованные расчеты проводились в рамках теории функционала плотности с использованием метода расширенных плоских волн, реализованного в пакете Vienna Ab initio Simulation Package (VASP) [37]. Функционал Пердью-Берка-Эрнцгергофа в приближении обобщенного градиента использовался для оптимизации структуры и расчетов упругих констант [38]. Релаксация расчетной ячейки для всех случаев была остановлена при достижении порога полной энергии 10^{-4} эВ и силы 0,001 эВ/Å. Релаксация проводилась в гамма точке с ограничением кинетической энергии для волновых

функций 400 эВ. Периодические граничные условия применялись в плоскости листа, чтобы избежать взаимодействия между листами силицена был установлен периодический вектор по нормали к листу в 25 Å.

Элементарная ячейка силицена состоит из двух атомов, различающихся по высоте, и имеет трансляционные вектора $a_1 = a(1, 0, 0)$ и $a_2 = (a/2)(1, \sqrt{3}, 0)$, где a – параметр решетки. Равновесное межатомное расстояние соотносится с параметром решетки как $\rho_0 = \sqrt{a^2/3 + h^2}$. Положение атомов

в элементарной ячейке можно описать векторами как $s_1 = (0, 0, 0)$ и $s_2 = (a/2, a/2\sqrt{3}, h)$.

Ввиду соблюдения периодических граничных условий в структуре возникают два линейных топологических дефекта: непосредственно рассматриваемый дефект в центре расчетной ячейки и на границе. Таким образом, чтобы избежать значимого взаимодействия между дефектами, протяженность каждого домена бралась равной 10 периодам.

Элементарная ячейка, ортогональная ячейка трансляции, а также проекции структуры на плоскости XY , XZ , ZX показаны на рис. 1.

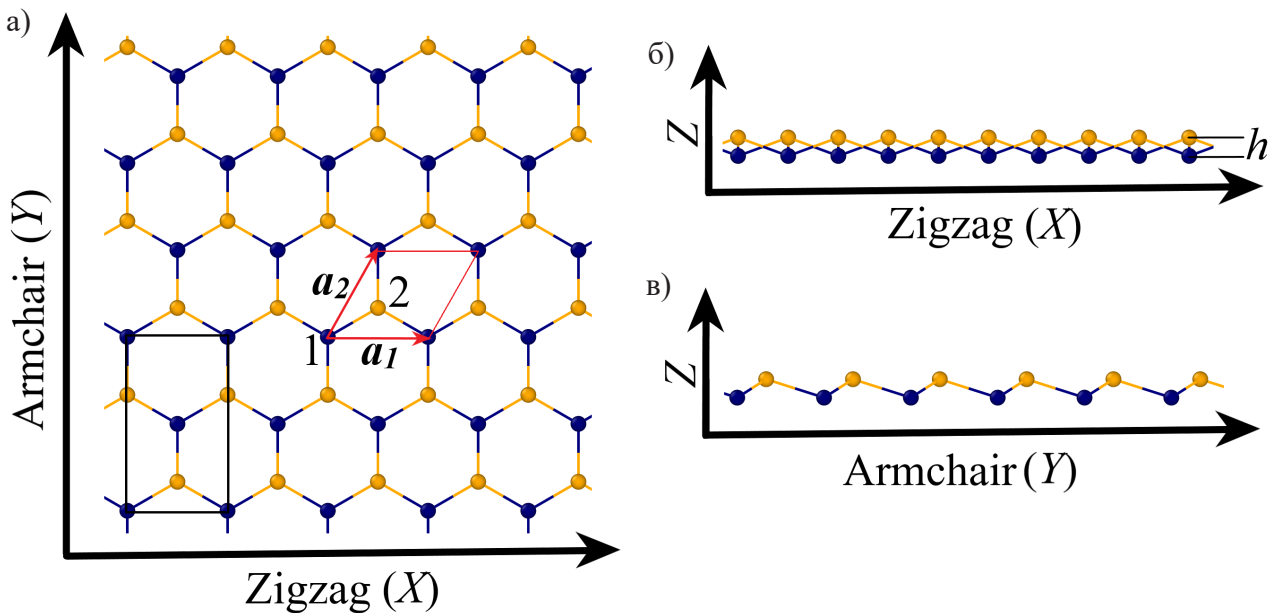


Рис. 1. Проекция атомарной структуры станена на плоскости XY , XZ , YZ соответственно (а–в). Оси X соответствует структурное направление зигзаг, а оси Y – кресло. Для демонстрации двух треугольных подрешеток атомы окрашены в зависимости от высоты относительно плоскости листа. На рисунке (а) обозначена примитивная ячейка, содержащая два атома Si, и соответствующие вектора трансляции a_1 , a_2 . Также на рисунке (а) обозначена ортогональная ячейка трансляции, которая содержит 4 атома. На рисунке (б) обозначена высота структуры h , получаемая как разница в координате Z атомов разных треугольных подрешеток

Fig. 1. Projections of the atomic structure of the stanene on the XY , XZ , YZ planes, respectively (a–c). The X axis corresponds to the zigzag structural direction, and the Y axis corresponds to the chair. To demonstrate the two triangular sublattices, the atoms are colored according to their height relative to the plane of the sheet. In figure (a) the primitive cell containing two Si atoms and the corresponding translation vectors a_1 , a_2 are indicated in red. The orthogonal translation cell is indicated in black in figure (a) and contains 4 atoms. Figure (b) shows the structure height h , obtained as the difference in the Z coordinate of atoms of different triangular sublattices

Линейные топологические дефекты внеслись в структуру путем смены высоты в s_2 с h на $-h$ у части структуры так, чтобы граница между структурой с положительной высотой и структурой с отрицательной высотой пролегла по одному из направлений – зигзаг или кресло. Именно данная граница и будет являться рассматриваемым дефектом. В дальнейшем дефекты будут именоваться соответственно направлению, то есть линейный дефект зигзаг или линейный дефект кресло. Также отметим, что дефект не обязательно должен лежать только в направлениях зигзаг или кресло, но в данной работе возможные хиральные линейные дефекты не рассматриваются.

Энергия линейного дефекта подсчитывается как:

$$E_l = \frac{U_d - U_0}{l},$$

где U_d – потенциальная энергия расчетной ячейки с дефектом; U_0 – потенциальная энергия структуры того же размера без дефекта; l – протяженность дефекта.

2. Результаты

Ранее посредством молекулярной динамики было показано [32], что приводимый

в данной работе потенциал воспроизводит линейные топологические дефекты. Однако данные молекулярной динамики в зависимости от выбранного потенциала могут показывать результаты в значительной степени отличающиеся от реальных, в том числе и качественно. В свою очередь, данные *ab-initio* дают качественное, а в некоторых случаях и количественное воспроизведение экспериментальных данных. Потому стоит задача объективизации результатов молекулярной динамики посредством сопоставления с расчетами *ab-initio*.

Полученные равновесные параметры структуры из данных молекулярной динамики: $a=3,84 \text{ \AA}$, $h=0,78 \text{ \AA}$, из данных *ab-initio*: $a=3,86 \text{ \AA}$, $h=0,45 \text{ \AA}$. При этом данные *ab-initio* почти идентичны более ранним результатам первопринципных исследований силицена: $a=3,83 \text{ \AA}$, $h=0,44 \text{ \AA}$ [39] и $a=3,88 \text{ \AA}$, $h=0,43 \text{ \AA}$ [40]. Данные молекулярной динамики в некоторой степени расходятся, но только для высоты структуры.

На рис. 2 продемонстрирована структура рассматриваемых доменных границ зигзаг и кресло из данных молекулярной динамики после релаксации.

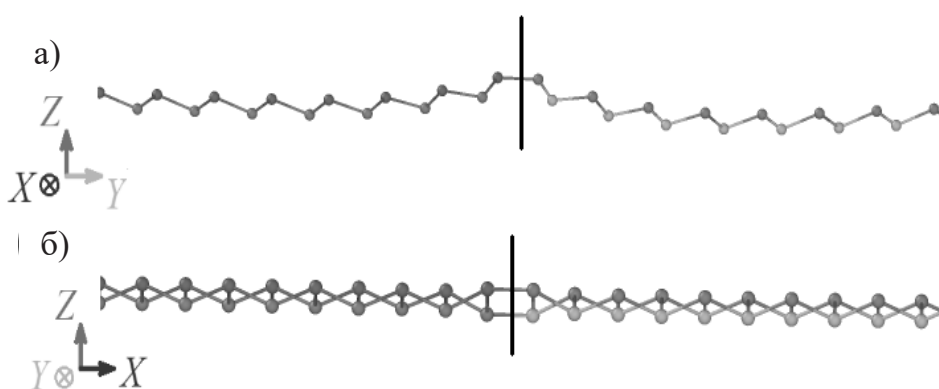


Рис. 2. Линейные топологические дефекты в молекулярной динамике по направлениям зигзаг (а) и кресло (б). Вертикальной линией показана граница доменов

Fig. 2. Linear topological defects in molecular dynamics in the zigzag (a) and armchair (b) directions. Vertical line shows domain boundaries

На рис. 2 можно наблюдать, что дефект зигзаг незначительно искажает структуру по оси Z , в свою очередь, линейный дефект кресло практически не вносит таких искажений. Однако отметим, что в обоих случаях наблюдается выпрямление связей относительно плоскости листа силицена непосредственно в области линейного дефекта. Энергия дефекта зигзаг $0,0054 \text{ эВ/Å}$, а энергия дефекта кресло $0,0245 \text{ эВ/Å}$. То есть, согласно данным молекулярной динамики энергия дефекта кресло почти в 5 раз выше энергии дефекта зигзаг, что отражается наблюдением фасетирования границы кресло на отрезки границы зигзаг при повышении температуры.

Рассмотрим отрелаксированные структуры линейных топологических дефектов, полученных методом *ab-initio* на рис. 3.

На рис. 3 можно наблюдать, что связь на границе, так же, как и в МД, в большей степени выпрямляется относительно плоскости листа. Другими словами, можно говорить что в области линейного дефекта наблюдается плоский силицен в окружении доменов выпученного силицена. Энергия дефекта зигзаг $0,0147 \text{ эВ/Å}$, энергия дефекта кресло $0,0150 \text{ эВ/Å}$. Так как энергии дефектов практически одинаковы, то можно предположить, что, в отличие от данных МД [32], фасетирования границы наблюдаться не должно.

Для удобства все приводимые данные представлены в табл. 1.

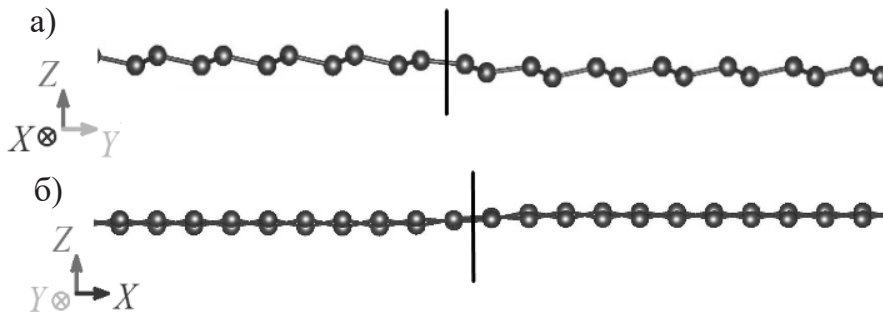


Рис. 3. Линейные топологические дефекты в *ab-initio* по направлениям зигзаг (а) и кресло (б). Вертикальной линией показана граница доменов

Fig. 3. Linear topological defects in *ab-initio* in the zigzag (a) and armchair (b) directions. Vertical line shows domain boundaries

Таблица 1. Обобщение полученных данных для силицена

Table 1. Generalization of the obtained data for silicene

Параметр / Parameter	МД / MD	<i>ab-initio</i>
Параметр решетки a (Å) / Lattice parameter a (Å)	3,84	3,86
Высота структуры h (Å) / Structure height h (Å)	0,78	0,45
Энергия линейного дефекта зигзаг (эВ/Å) / Energy of zigzag linear defect (eV/Å)	0,0054	0,0147
Энергия линейного дефекта кресло (эВ/Å) / Energy of armchair linear defect (eV/Å)	0,0245	0,0150

Вывод

Продемонстрированы линейные топологические дефекты в силицине в МД и *ab-initio*. Получены энергии дефектов, в частности, в отличие от прошлых данных МД, данные *ab-initio* не подтверждают возможность фасетирования границы с ростом температуры, ввиду практически идентичной энергии линейных дефектов зигзаг и кресло, разница между которыми составляет 2%.

Как в МД, так и в *ab-initio* продемонстрировано выпрямление связей в области дефекта относительно плоскости листа силицина. Сопоставим эти данные с тем фактом, что ксены, имеющие структуру выдвинутых сот, ввиду усиления спин-орбитального взаимодействия могут демонстрировать квантовый спиновый эффект Холла в отличие от плоского графена, а также данные свойства проявляются в краевых состояниях. Из этого можно предположить наличие особых состояний электронов в области линейного дефекта, что требует дальнейшего исследования.

Благодарности / Acknowledgments

Работа была поддержана Министерством науки и высшего образования Российской Федерации в рамках государственного задания Уфимского университета науки и технологий (№ 075-03-2024-123/1) молодежной исследовательской лаборатории «Металлы и сплавы в условиях экстремальных воздействий».

The work was supported by the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation within the framework of the state task of Ufa University of Science and Technology (No. 075-03-2024-123/1) of the Youth Research Laboratory “Metals and Alloys under Extreme Impacts”.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Novoselov K.S., Geim A. K., Morozov S. V., Jiang D., Zhang Y., Dubonos S. V., Grigorieva I. V.,

Firsov A. A. Electric field effect in atomically thin carbon films // *Science*. 2004. V. 306, Iss. 5696. P. 666–669. DOI: 10.1126/science.1102896.

2. Butler S.Z. et al. Progress, challenges, and opportunities in two-dimensional materials beyond graphene // *ACS Nano*. 2013. V. 7, Iss. 4. P. 2898–2926. DOI: 10.1021/nn400280c.

3. Choi W. et al. Recent development of two-dimensional transition metal dichalcogenides and their applications // *Materials Today*. 2017. V. 20, Iss. 3. P. 116–130. DOI: 10.1016/j.mattod.2016.10.002.

4. Rohaizad N. et al. Two-dimensional materials in biomedical, biosensing and sensing applications // *Chemical Society Reviews*. 2021. V. 50, Iss. 1. P. 619–657. DOI: 10.1039/D0CS00150C.

5. Yankovskaya U.I., Sharapova Yu.R., Zakharov P.V. Effect of carbon nanotubes on the mechanical properties of Ni3Al polycrystal // *Materials. Technologies. Design*. 2022. V. 4, No. 4 (10). P. 76–81. DOI: 10.54708/26587572_2022_441076.

6. Zhu F. et al. Epitaxial growth of two-dimensional stanene // *Nature Materials*. – 2015. V. 14, Iss. 10. P. 1020–1025. DOI: 10.1038/nmat4384.

7. Balendhran S. et al. Elemental analogues of graphene: silicene, germanene, stanene, and phosphorene // *Small*. 2015. V. 11, Iss. 6. P. 640–652. DOI: 10.1002/sml.201402041.

8. Molle A. et al. Buckled two-dimensional Xene sheets // *Nature Materials*. 2017. V. 16, Iss. 2. P. 163–169. DOI: 10.1038/nmat4802.

9. Tao W. et al. Emerging two-dimensional monoelemental materials (Xenes) for biomedical applications // *Chemical Society Reviews*. 2019. V. 48, Iss. 11. P. 2891–2912. DOI: 10.1039/C8CS00823J.

10. Yuhara J. et al. Graphene’s latest cousin: Plumbene epitaxial growth on a “nano WaterCube” // *Advanced Materials*. 2019. V. 31, Iss. 27. Article number 1901017. DOI: 10.1002/adma.201901017.

11. Yuhara J., Le Lay G. Beyond silicene: synthesis of germanene, stanene and plumbene // *Japanese Journal of Applied Physics*. – 2020. – T. 59. – №. SN. – C. SN0801. DOI: 10.35848/1347-4065/ab8410.

12. Chowdhury S., Jana D. A theoretical review on electronic, magnetic and optical properties of silicene // *Reports on Progress in Physics*. 2016. V. 79, No. 12. Article number 126501. DOI: 10.1088/0034-4885/79/12/126501.

13. Oughaddou H. et al. Silicene, a promising new 2D material // *Progress in Surface Science*. 2015. V. 90, Iss. 1. P. 46–83. DOI: 10.1016/j.progsurf.2014.12.003.

14. Molle A. et al. Silicene, silicene derivatives, and their device applications // *Chemical Society Reviews*. 2018. V. 47, Iss. 16. P. 6370–6387. DOI: 10.1039/C8CS00338F.

15. Gablech I. et al. Monoelemental 2D materials-based field effect transistors for sensing and biosensing: phosphorene, antimonene, arsenene, silicene, and germanene go beyond graphene // *TrAC Trends in Analytical Chemistry*. 2018. V. 105. P. 251–262. DOI: 10.1016/j.trac.2018.05.008.
16. Venkateshalu S. et al. Phosphorene, antimonene, silicene and siloxene based novel 2D electrode materials for supercapacitors-A brief review // *Journal of Energy Storage*. 2022. V. 48. Article number 104027. DOI: 10.1016/j.est.2022.104027.
17. You Y. et al. Emerging two-dimensional silicene nanosheets for biomedical applications // *Materials Today Nano*. 2021. V. 16. Article number 100132. DOI: 10.1016/j.mtnano.2021.100132.
18. Valiev R.Z., Khafizova E.D. Nanometals for next-generation medical implants // *Materials Technologies. Design*. 2021. V. 3, No. 3 (5). P. 6–10. DOI: 10.54708/26587572_2021_3356.
19. Kistanov A. A. Characterization of Monovacancy Defects in Vanadium Diselenide Monolayer: A DFT Study // *Applied Sciences*. 2024. V. 14, Iss. 3. Article number 1205. DOI: 10.3390/app14031205.
20. Kistanov A.A. et al. Family of two-dimensional transition metal dichlorides: Fundamental properties, structural defects, and environmental stability // *The Journal of Physical Chemistry Letters*. 2022. V. 13, Iss. 9. P. 2165–2172. DOI: 10.1021/acs.jpcclett.2c00367.
21. Ustuzhanina S.V., Kistanov A.A. Ab Initio Study of the Adsorption of Li and Na on the Surface of a MgCl₂ Monolayer // *JETP Letters*. 2023. V. 118, Iss. 9. P. 670–675. DOI: 10.1134/S0021364023602592.
22. Zhao Q. et al. The role of traps in the photocurrent generation mechanism in thin InSe photodetectors // *Materials Horizons*. 2020. V. 7, Iss. 1. P. 252–262. DOI: 10.1039/C9MH01020C.
23. Kistanov A.A., Nikitenko V.R., Prezhdov O.V. Point defects in two-dimensional γ -phosphorus carbide // *The Journal of Physical Chemistry Letters*. 2020. V. 12, Iss. 1. P. 620–626. DOI: 10.1021/acs.jpcclett.0c03608.
24. Baimova J.A. et al. Mechanical properties of crumpled graphene under hydrostatic and uniaxial compression // *Journal of Physics D: Applied Physics*. 2015. V. 48, Iss. 9. Article number 095302. DOI: 10.1088/0022-3727/48/9/095302.
25. Zhao J. et al. Rise of silicene: A competitive 2D material // *Progress in Materials Science*. 2016. V. 83. P. 24–151. DOI: 10.1016/j.pmatsci.2016.04.001.1.
26. Roman R. E., Cranford S. W. Defect sensitivity and Weibull strength analysis of monolayer silicene // *Mechanics of Materials*. 2019. V. 133. P. 13–25. DOI: 10.1016/j.mechmat.2019.01.014.
27. Ding N., Wang H., Chen X., Wu Ch.-M. L. Defect-sensitive performance of silicene sheets tension: mechanical properties, electronic structures and failure behavior // *RSC Advances*. 2017. V. 7, Iss. 17. P. 10306–10315. DOI: 10.1039/C6RA27291F.
28. Shodja H.M. et al. Elastic moduli tensors, ideal strength, and morphology of stanene based on an enhanced continuum model and first principles // *Mechanics of Materials*. 2017. V. 110. P. 1–15. DOI: 10.1016/j.mechmat.2017.04.001
29. Hess P. Thickness of elemental and binary single atomic monolayers // *Nanoscale Horizons*. 2020. V. 5, Iss. 3. P. 385–399. DOI: 10.1039/C9NH00658C.
30. Pawlak R., Drechsel C., D'Astolfo P., Kisiel M., Meyer E., Cerda J.I. Quantitative determination of atomic buckling of silicene by atomic force microscopy // *Proceedings of the National Academy of Sciences*. 2020. V. 117, No. 1. P. 228–237. DOI: 10.1073/pnas.1913489117.
31. Kosarev I.V., Dmitriev S.V., Semenov A.S., Korznikova E.A. Stability of strained stanene compared to that of graphene // *Materials*. 2022. V. 15, Iss. 17. Article number 5900. DOI: 10.3390/ma15175900.
32. Kosarev I.V., Kistanov A.A., Babicheva R.I., Korznikova E.A., Baimova J.A., Dmitriev S.V. Topological defects in silicene // *Europhysics Letters*. 2023. V. 141, No. 6. Article number 66001. DOI: 10.1209/0295-5075/acbfda.
33. Thompson A.P. et al. LAMMPS - a flexible simulation tool for particle-based materials modeling at the atomic, meso, and continuum scales // *Computer Physics Communications*. 2022. V. 271. Article number 108171. DOI: 10.1016/j.cpc.2021.108171.
34. Baskes M.I. Modified embedded-atom potentials for cubic materials and impurities // *Physical Review B*. 1992. V. 46, No. 5. Article number 2727. DOI: 10.1103/PhysRevB.46.2727.
35. Stillinger F.H., Weber T.A. Computer simulation of local order in condensed phases of silicon // *Physical Review B*. 1985. V. 31, No. 8. Article number 5262. DOI: 10.1103/PhysRevB.31.5262.
36. Balamane H., Halicioglu T., Tiller W.A. Comparative study of silicon empirical interatomic potentials // *Physical Review B*. 1992. V. 46, No. 4. Article number 2250. DOI: 10.1103/PhysRevB.46.2250.
37. Kresse G., Furthmüller J. Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set // *Physical review B*. 1996. V. 54, No. 16. Article number 11169. DOI: 10.1103/PhysRevB.54.11169.
38. Perdew J.P., Burke K., Ernzerhof M. Generalized gradient approximation made simple // *Physical Review Letters*. 1996. V. 77, No. 18. Article number 3865. DOI: 10.1103/PhysRevLett.77.3865.

39. Cahangirov S., Topsakal M., Arturk E., Sahin H., Ciraci S. Two-and one-dimensional honeycomb structures of silicon and germanium // *Physical Review Letters*. 2009. V. 102, No. 23. Article number 236804. DOI: 10.1103/PhysRevLett.102.236804.

40. Wella S. A., Syaputra M., Wungu T.D.K., Suprijadi. The study of electronic structure and properties of silicene for gas sensor application // *AIP Conference Proceedings*. 2016. V. 1719, No. 1. Article number 030039. DOI: 10.1063/1.4943734.