

Study on the Stable Existence Criteria of Low-Dimensional Materials Using Matrix Theory

Dongjie Gao*, Lili Li

School of Mathematics and Statistics, Heze University, Heze Shandong
Email: *aizai_2004@126.com, 973406186@qq.com

Received: Feb. 28th, 2020; accepted: Mar. 17th, 2020; published: Mar. 24th, 2020

Abstract

Using matrix theory and atomic potential energy, a criterion for the stable existence of low-dimensional materials is given, which is used to calculate the stable existence conditions of straight single-element one-dimensional materials and flat single-element two-dimensional materials. It is deduced that the monoatomic carbon chain can exist stably, the flat honeycomb structure of carbon can exist stably, and the flat honeycomb structure of silicon and germanium cannot exist stably, which are consistent with the existing conclusions.

Keywords

Low-Dimensional Materials, Positive Definite Matrix, Atomic Potential Energy

利用矩阵理论研究低维材料的稳定存在性准则

高东杰*, 李丽丽

菏泽学院数学与统计学院, 山东 菏泽
Email: *aizai_2004@126.com, 973406186@qq.com

收稿日期: 2020年2月28日; 录用日期: 2020年3月17日; 发布日期: 2020年3月24日

摘要

利用矩阵理论和原子势能, 给出了低维材料稳定存在的准则, 将其用于直单元素一维材料和平单元素二维材料稳定存在条件的计算中, 推导出单原子碳链能稳定存在, 碳的平蜂窝状结构能稳定存在, 硅和锗

*通讯作者。

的平蜂窝状结构不能稳定存在, 这与已有结论一致。

关键词

低维材料, 正定矩阵, 原子势能

Copyright © 2020 by author(s) and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY 4.0).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

1. 引言

低维材料作为一类新型材料, 由于其奇异的电学、力学、光学等物理特征, 以及化学特性, 具有非常好的应用前景, 如: 超高频电子器件, 超导场效应管, 高响应光电探测器等, 所以目前已有许多学者研究了低维材料的性质、制备以及应用前景[1]-[6]。但是对于低维材料的研究只能算刚刚起步, 对于最基本的问题, 低维材料的存在性和稳定性判据尚不明确, 哪些因素决定低维材料的存在? 哪些结构的低维材料是稳定的? 我们急需发展一套理论来阐明低维材料的稳定存在的判据, 为低维材料的制备提供理论依据。

Peierls [7]和 Landau [8]分别于 1935 年和 1937 年给出了低维晶体存在性的经典理论(PLM 理论), 文章指出严格的低维材料在热力学极限下, 不能在有限温度下稳定存在, 后来 Mermin 和 Wangner 也利用 Bogoliubor 不等式证实晶序不能在低维材料中维持[9]。而事实上, 不断有低维材料的成功制备并得到了广泛的应用, 上述理论预测与实验结果之间的矛盾给低维材料的研究造成了一定的困扰, 2017 年王彪等从材料所处空间的维度和尺寸对此困扰给出了解释[10]。

近几年低维材料的存在性和稳定性的研究也有了一定的进展, 2016 年 U Güngördü, Utkan et al. [11]研究了 Skyrmion 晶格的稳定性和准二维手性磁体的对称性, 2016 年 Song, T et al. [12]研究了氧化铝单层的稳定性及其与二维材料的界面, 2019 年 Chen, J. & Wang, B [13]研究了类石墨烯材料平板模型的存在准则和有效性, 2014 年孟繁臣[14]基于第一性原理研究了低维碳材料结构和稳定性, 2008 年欧阳玉等[15]研究了碳纳米管的稳定性, 2005 年张晓宇[16]研究了碳纳米管稳定性, 弹性性质及接触问题, 给出了最小碳纳米管直径为 0.32。Born 等[17]于 1940 年研究了三维材料的存在性准则, 利用形变原子势二次型的正定性推导出来力学存在性准则, 并利用原子势能不等式的形式表达, 一旦原子势的细节被了解, 我们就能确定原子是否能形成稳定的三维结构。2017 年王彪等[10]借鉴[17]研究三维材料存在性的方法研究了低维材料的存在性准则, 文章基于原子势能的能量法则建立了低维材料的存在性准则, 利用此准则推导出单/平单元素低维材料稳定存在的具体条件, 用两种典型的原子势描述了低维材料的存在性准则, 最后讨论了二维屈曲蜂窝状结构的稳定性。

本文在[10]的基础上, 充分利用矩阵理论来探讨低维材料的稳定存在性, 由矩阵的正定性推导低维材料可以稳定存在的条件, 从而建立低维材料的稳定存在性准则, 然后具体讨论直单元素一维材料和平单元素二维材料的稳定存在性条件。

2. 理论基础

2.1. 低维材料稳定存在性准则

设 Φ 为晶体的总原子势能, k 和 T 分别为波尔兹曼常数以及热力学温度, Z_i 是与晶格震动有关的配

分函数, 则晶格自由能可表示为:

$$F = \Phi - kT \ln Z_v.$$

要使体系稳定, 我们需要 F 处于极小值, 当 T 足够小时, 只需 Φ 取得极小值, 而

$$\Phi = \frac{1}{2} \sum_i^N \phi_i(\{r\}, \{\cos \theta\}, \{\cos \varphi\}),$$

$$\text{其中 } \phi_i = \sum_s \sum_{k, l \neq i, j} \phi_i^s(r_s, \cos \theta_{ijk}, \cos \varphi_{ijkl}) + \sum_{L=2}^m \sum_L \phi_i^L(r_L).$$

由原子势函数极值条件, 可得原子势函数关于结构变量偏导的限制条件:

$$\left(\frac{\partial \Phi}{\partial r}\right)_0 = 0, \left(\frac{\partial \Phi}{\partial \theta_{ijk}}\right)_0 = \cos st, \left(\frac{\partial \Phi}{\partial \varphi_{ijkl}}\right)_0 = \cos st,$$

下标“0”表示偏导的取值是在平衡态。晶体结构图和字母表示意义如图 1。

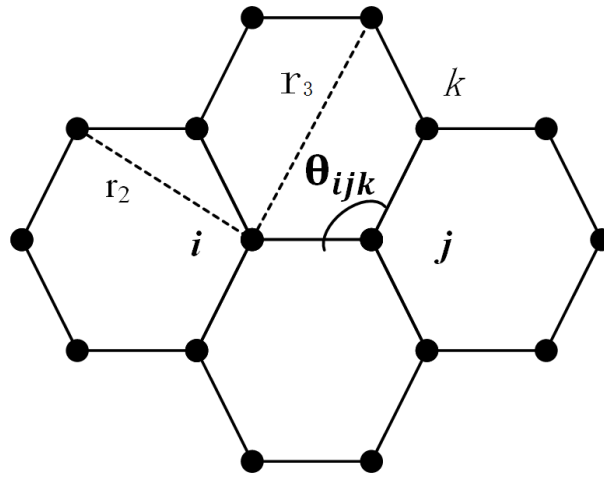


Figure 1. Crystal structure diagram
图 1. 晶体结构示意图

N : 总原子数;

Φ_i : 原子 i 具有的势能;

$\{r\}$: 所有键长的集合;

$\{\cos \theta\}$: 所有键角的集合;

$\{\cos \varphi\}$: 所有扭转角的集合;

$\{\phi_i^s\}$: 最近邻相互作用;

$\{\phi_i^L\}$: 第 L 近邻相互作用;

r_s : 最近邻原子间距;

r_L : 第 L 近邻原子间距;

θ_{ijk} : 两相邻键 r_{ik} 和 r_{jk} 的夹角;

φ_{ijkl} : 原子平面 ijk 和平面 ijl 的二面角;

m : 表示第 m 近邻为最大作用距离。

根据以上条件, 我们可以求得允许存在的低维结构。

接下来, 确定所允许的低维结构的力学稳定性条件。Born 在文[17]中指出, 晶格的不稳定(熔化)主要是由宏观(力学)不稳定造成的, 对于低维材料, 通过应变 ε 和曲率 κ 可以确定形变原子势能。

文[10]中指出, 根据低维材料的力学稳定性条件, 可得低维材料稳定存在的条件是形变原子势二次型的是正定的, 从而二次型的矩阵 M 是正定的, 矩阵 M 的元素具体表达式为:

$$\Phi_{e_{\alpha\beta}, e_{\gamma\delta}} = \left(\frac{\partial^2 \Phi}{\partial e_{\alpha\beta} \partial e_{\gamma\delta}} \right)_0,$$

其中 $e_{\alpha\beta}, e_{\gamma\delta}$ 均表示为 ε 和 κ 的任意分量, 具体地

$$\begin{aligned} \Phi_{e_{\alpha\beta}, e_{\gamma\delta}} = & \frac{1}{2} \left[\sum_{l=1}^m \sum_l \frac{\partial \phi_l^l}{\partial r_l} \frac{\partial^2 r_l}{\partial e_{\alpha\beta} \partial e_{\gamma\delta}} + \sum_{s,\theta} \frac{\partial \phi_s^s}{\partial \cos \theta} \frac{\partial^2 \cos \theta}{\partial e_{\alpha\beta} \partial e_{\gamma\delta}} + \sum_{s,\varphi} \frac{\partial \phi_s^s}{\partial \cos \varphi} \frac{\partial^2 \cos \varphi}{\partial e_{\alpha\beta} \partial e_{\gamma\delta}} \right. \\ & + \sum_{l=1}^m \sum_l \frac{\partial^2 \phi_l^l}{\partial r_l^2} \frac{\partial r_l}{\partial e_{\alpha\beta}} \frac{\partial r_l}{\partial e_{\gamma\delta}} + \sum_s \sum_{\theta, \theta' \neq \theta} \frac{\partial^2 \phi_s^s}{\partial \cos \theta \partial \cos \theta'} \frac{\partial \cos \theta}{\partial e_{\alpha\beta}} \frac{\partial \cos \theta'}{\partial e_{\gamma\delta}} \\ & + \sum_s \sum_{\varphi, \varphi' \neq \varphi} \frac{\partial^2 \phi_s^s}{\partial \cos \varphi \partial \cos \varphi'} \frac{\partial \cos \varphi}{\partial e_{\alpha\beta}} \frac{\partial \cos \varphi'}{\partial e_{\gamma\delta}} + \sum_{s,\theta} \frac{\partial^2 \phi_s^s}{\partial r_s \partial \cos \theta} \left(\frac{\partial r_s}{\partial e_{\alpha\beta}} \frac{\partial \cos \theta}{\partial e_{\gamma\delta}} + \frac{\partial r_s}{\partial e_{\gamma\delta}} \frac{\partial \cos \theta}{\partial e_{\alpha\beta}} \right) \\ & + \sum_{s,\varphi} \frac{\partial^2 \phi_s^s}{\partial r_s \partial \cos \varphi} \left(\frac{\partial r_s}{\partial e_{\alpha\beta}} \frac{\partial \cos \varphi}{\partial e_{\gamma\delta}} + \frac{\partial r_s}{\partial e_{\gamma\delta}} \frac{\partial \cos \varphi}{\partial e_{\alpha\beta}} \right) \\ & \left. + \sum_{s,\theta,\varphi} \frac{\partial^2 \phi_s^s}{\partial \cos \theta \partial \cos \varphi} \left(\frac{\partial \cos \theta}{\partial e_{\alpha\beta}} \frac{\partial \cos \varphi}{\partial e_{\gamma\delta}} + \frac{\partial \cos \theta}{\partial e_{\gamma\delta}} \frac{\partial \cos \varphi}{\partial e_{\alpha\beta}} \right) \right]_0. \end{aligned}$$

2.2. 矩阵理论

定义 1 [18]: 若实数域上的 n 元二次型 $f(x_1, x_2, \dots, x_n) = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n a_{ij} x_i x_j (a_{ij} = a_{ji}) = X^T A X$ 是正定二次型, 则称 A 为正定矩阵. 其中

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{pmatrix}, X = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \dots \\ x_n \end{pmatrix}.$$

定义 2 [18]: 子式

$$P_i = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1i} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2i} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{i1} & a_{i2} & \dots & a_{ii} \end{vmatrix} (i=1, 2, \dots, n)$$

称为矩阵 $A = (a_{ij})_m$ 的 i 阶顺序主子式。

定理 1 [18]: 设 A 是 n 阶实对称矩阵, 则 A 是正定矩阵的充要条件是 A 的顺序主子式全大于零。

推论 1 [18]: 实对角矩阵 $\begin{pmatrix} d_1 & & \\ & \dots & \\ & & d_n \end{pmatrix}$ 是正定矩阵的充分必要条件是 $d_i > 0 (i=1, 2, \dots, n)$ 。

推论 2: 实分块对角矩阵 $\begin{pmatrix} D_1 & 0 \\ 0 & D_2 \end{pmatrix}$ 是正定矩阵的充分必要条件是矩阵 D_1, D_2 正定。

3. 主要结论

利用上述方法结论, 我们分别讨论直单元素一维材料和平单元素二维材料的稳定存在性准则, 以下总假设所有的键长都相等, 并且不考虑边界效应。

此时应变和曲率在能量上是解耦的, 则矩阵 M 为分块对角阵, 设为

$$M = N \begin{bmatrix} C & 0 \\ 0 & D \end{bmatrix},$$

其中矩阵 C 和 D 的元素分别为 $\Phi_{\varepsilon_{\alpha\beta}, \varepsilon_{\gamma\delta}}$ 和 $\Phi_{\kappa_{\alpha\beta}, \kappa_{\gamma\delta}}$ 。

3.1. 直单元素一维材料的稳定存在条件

由于直链状态下扭转项可忽略, 如图2, 根据总原子势能的极值条件有

$$\left(\frac{\partial \Phi}{\partial r} \right)_0 = 0,$$

$\left(\frac{\partial \Phi}{\partial \theta} \right)_0 = \left(\frac{\partial \Phi}{\partial \cos \theta} \right)_0 (-\sin \theta)_{\theta=\pi} = 0$ 恒成立, 所以 $\left(\frac{\partial \Phi}{\partial \cos \theta} \right)_0$ 取值无限制。

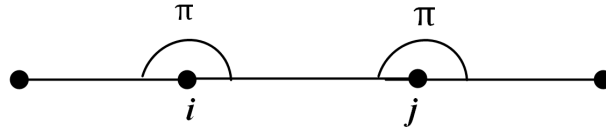


Figure 2. Diagram of straight chain structure

图 2. 直链结构示意图

形变原子势二次型的矩阵 $M = N \begin{bmatrix} C & 0 \\ 0 & D \end{bmatrix}$, 此时 C 和 D 退化为标量,

根据推论1, M 正定只需要 $C > 0, D > 0$, 所以直单元素一维材料稳定存在的条件为:

$$C > 0, D > 0.$$

根据碳原子的REBO势函数[19] [20], 有

$$\left[\sum_{l=1}^m \sum_l \frac{\partial^2 \Phi_l^i}{\partial r_l^2} r_l^2 \right]_0 = 54.34 \text{ eV}/\text{\AA}^2 > 0, \left[\frac{\partial \phi_i^s}{\partial \cos \theta} r_0^3 - \frac{1}{48} \sum_{l=1}^m \sum_l \frac{\partial \phi_l^i}{\partial r_l} r_l^3 \right]_0 = 1.14 \text{ eV} \cdot \text{\AA}^2 > 0,$$

所以单原子碳链能稳定存在。

3.2. 平单元素二维材料的稳定存在条件

根据总原子势能的极值条件, 考虑到晶格结构的平移对称性, 平单元素二维材料有三种可能的结构, 包括蜂窝结构, 正方结构, 三角结构。我们只考虑蜂窝结构, 如图3, 其他两种结构可以类似讨论。

形变原子势二次型的矩阵 $M = N \begin{bmatrix} C & 0 \\ 0 & D \end{bmatrix}$, 此时 M 是分块对角阵, 由推论2可知 M 正定等价于 C 和 D 都正定。

设

$$C = \begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & 0 \\ C_{21} & C_{22} & 0 \\ 0 & 0 & C_{33} \end{bmatrix}, D = \begin{bmatrix} D_{11} & D_{12} & 0 \\ D_{21} & D_{22} & 0 \\ 0 & 0 & D_{33} \end{bmatrix},$$

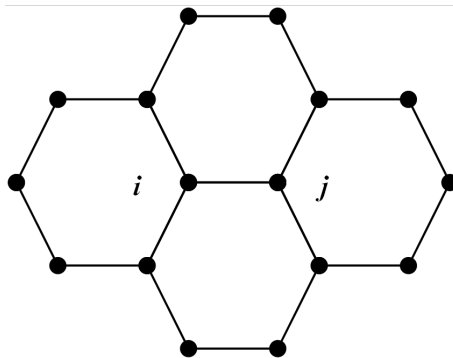


Figure 3. Honeycomb structure

图 3. 蜂窝结构

其中 $C_{11} = C_{22}$, $C_{12} = C_{21}$,

根据定理1, C 正定需要其顺序主子式都大于0, 可得

$$C_{11} > 0; C_{11}C_{22} - C_{12}C_{21} = C_{11}^2 - C_{12}^2 = (C_{11} + C_{12})(C_{11} - C_{12}) > 0; C_{33} > 0.$$

从而只需满足

$$C_{11} + C_{12} > 0, C_{11} - C_{12} > 0, C_{33} > 0.$$

根据文[10]可得

$$C_{11} = C_{22} = \frac{9}{16} \left(\frac{\partial^2 \Phi_i^S}{\partial r_s^2} \right)_0 r_0^2 + \frac{1}{32} B, C_{12} = C_{21} = \frac{3}{16} \left(\frac{\partial^2 \Phi_i^S}{\partial r_s^2} \right)_0 r_0^2 - \frac{1}{32} B, C_{33} = \frac{3}{4} \left(\frac{\partial^2 \Phi_i^S}{\partial r_s^2} \right)_0 r_0^2 + \frac{1}{8} B.$$

其中

$$A = \frac{36 \left(\frac{\partial \phi_i^S}{\partial \cos \theta} \right)_{\theta=\frac{2\pi}{3}} + 54 \left(\frac{\partial^2 \phi_i^S}{\partial \cos^2 \theta} \right)_{\theta=\frac{2\pi}{3}} - 27 \left(\frac{\partial^2 \phi_i^S}{\partial \cos \theta \partial \cos \theta'} \right)_{\theta, \theta'=\frac{2\pi}{3}} - 8 \sum_S \left(\frac{\partial^2 \phi_i^S}{\partial r_s^2} r_0 \right)_0 r_s (n_x^S)^3}{36 \left(\frac{\partial \phi_i^S}{\partial \cos \theta} \right)_{\theta=\frac{2\pi}{3}} + 54 \left(\frac{\partial^2 \phi_i^S}{\partial \cos^2 \theta} \right)_{\theta=\frac{2\pi}{3}} + 36 r_0 \left(\frac{\partial^2 \phi_i^S}{\partial r_s \partial \cos \theta} \right)_{\theta=\frac{2\pi}{3}} - 27 \left(\frac{\partial^2 \phi_i^S}{\partial \cos \theta \partial \cos \theta'} \right)_{\theta, \theta'=\frac{2\pi}{3}} + 4 \sum_l \left(\frac{\partial^2 \phi_i^S}{\partial r_s^2} \right)_0 r_s^2 (n_x^S)^2}$$

$$B = 9(1-A)^2 \left[4 \left(\frac{\partial \phi_i^S}{\partial \cos \theta} \right)_{\theta=\frac{2\pi}{3}} + 6 \left(\frac{\partial^2 \phi_i^S}{\partial \cos^2 \theta} \right)_{\theta=\frac{2\pi}{3}} - 3 \left(\frac{\partial^2 \phi_i^S}{\partial \cos \theta \partial \cos \theta'} \right)_{\theta, \theta'=\frac{2\pi}{3}} \right]$$

$$- 36 r_0 (1-A^2) \left(\frac{\partial^2 \phi_i^S}{\partial r_s \partial \cos \theta} \right)_{\theta=\frac{2\pi}{3}} + 4 \left[A^2 \sum_l \left(\frac{\partial^2 \phi_i^S}{\partial r_s^2} \right)_0 r_s^2 (n_x^S)^2 \right]_0$$

$$- 16 \left[A \sum_{l=\text{odd}}^m \sum_S \left(\frac{\partial \phi_i^l}{\partial r_l} - \frac{\partial^2 \phi_i^l}{\partial r_l^2} r_l \right)_0 r_l (n_x^l)^3 \right]_0,$$

$$D_{11} = D_{22} = \frac{3}{8} r_0^2 \left[3 \left(\frac{\partial \phi_i^S}{\partial \cos \theta} \right)_{\theta=\frac{2\pi}{3}} - 14 \left(\frac{\partial \phi_i^S}{\partial \cos \varphi} \right)_{\varphi=0} \right], \quad D_{12} = D_{21} = \frac{3}{8} r_0^2 \left[3 \left(\frac{\partial \phi_i^S}{\partial \cos \theta} \right)_{\theta=\frac{2\pi}{3}} + 2 \left(\frac{\partial \phi_i^S}{\partial \cos \varphi} \right)_{\varphi=0} \right],$$

$$D_{33} = -12 r_0^2 \left(\frac{\partial^2 \phi_i^S}{\partial \cos \varphi} \right)_{\varphi=0}.$$

$$\text{带入得 } C_{11} + C_{22} = \left(\frac{\partial^2 \phi_i^S}{\partial r_s^2} \right)_0, \quad C_{12} - C_{21} = \frac{3}{8} \left(\frac{\partial^2 \phi_i^S}{\partial r_s^2} \right)_0 r_0^2 + \frac{1}{16} B, \quad C_{33} = \frac{3}{4} \left(\frac{\partial^2 \Phi_i^S}{\partial r_s^2} \right)_0 r_0^2 + \frac{1}{8} B,$$

所以矩阵C正定需要满足的条件为:

$$\left(\frac{\partial^2 \phi_i^S}{\partial r_s^2} \right)_0 > 0, \quad 6 \left(\frac{\partial^2 \phi_i^S}{\partial r_s^2} \right)_0 r_0^2 + B > 0.$$

同理矩阵D正定需要满足的条件为:

$$\left(\frac{\partial \phi_i^S}{\partial \cos \theta} \right)_{\theta=\frac{2\pi}{3}} - 2 \left(\frac{\partial \phi_i^S}{\partial \cos \varphi} \right)_{\varphi=0} > 0, \quad \left(\frac{\partial \phi_i^S}{\partial \cos \varphi} \right)_{\varphi=0} < 0.$$

所以平单元素二维材料稳定存在的条件为:

$$\left(\frac{\partial^2 \phi_i^S}{\partial r_s^2} \right)_0 > 0, \quad 6 \left(\frac{\partial^2 \phi_i^S}{\partial r_s^2} \right)_0 r_0^2 + B > 0,$$

$$\left(\frac{\partial \phi_i^S}{\partial \cos \theta} \right)_{\theta=\frac{2\pi}{3}} - 2 \left(\frac{\partial \phi_i^S}{\partial \cos \varphi} \right)_{\varphi=0} > 0, \quad \left(\frac{\partial \phi_i^S}{\partial \cos \varphi} \right)_{\varphi=0} < 0.$$

利用碳原子REBO势, 硅和锗的Tersoff势的结论[21]可知碳元素的平面蜂窝结构满足上述条件, 所以是稳定存在的, 比如众所周知的石墨烯。而硅和锗的平面蜂窝结构不满足上述条件, 所以是不能稳定存在的。

4. 结语

本文建立了一种基于矩阵理论的低维材料稳定存在性准则, 利用这个准则推导出直单元素一维材料和平单元素二维材料稳定存在的条件, 与现有结果一致。利用这个准则可以继续进行低维材料的结构预测和分子设计, 预测具有独特结构与性能的新型低维材料, 为新材料的研发提供新的思路。结构预测与设计作为材料研究与发展的重要内容之一, 对低维纳米材料的研究具有重要的意义, 通过从结构预测到目标设计, 可以揭示低维纳米材料中“结构”与“性能”之间的关系, 寻找具有特定结构、特殊功能的新颖低维纳米材料。

基金项目

山东省自然科学基金项目(ZR201702220205, ZR201709250116)。

参考文献

- [1] Zhu, X., Tian, C., Dothanh, C.L., *et al.* (2017) Two-Dimensional Materials as Prospective Scaffolds for Mixed-Matrix Membrane-Based CO₂ Separation. *ChemSusChem*, **10**, 3304-3316. <https://doi.org/10.1002/cssc.201700801>
- [2] Li, D., Wei, Y., Li, L., *et al.* (2018) Mxene Molecular Sieving Membranes for Highly Efficient Gas Separation. *Nature Communications*, **9**, 155-162. <https://doi.org/10.1038/s41467-017-02529-6>
- [3] Ding, Y., Chen, Y.P., Zhang, X., *et al.* (2017) Controlled Intercalation and Chemical Exfoliation of Layered Metal-Organic Frameworks Using a Chemically Labile Intercalating Agent. *Journal of the American Chemical Society*, **139**, 23852-23858. <https://doi.org/10.1021/jacs.7b04829>
- [4] 林良侃, 郑文涛, 马福坤, 邢闯, 谭文杰. 新型相变材料十二水磷酸氢二钠/石墨烯微片在相变墙体中的应用[J]. *材料科学*, 2020, 10(1): 17-23.
- [5] Safari, A., Saidur, R., Sulaiman, F.A., Xu, Y. and Dong, J. (2017) A Review on Supercooling of Phase Change Materials in Thermal Energy Storage Systems. *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, **70**, 905-919.

- <https://doi.org/10.1016/j.rser.2016.11.272>
- [6] Wang, C., Feng, L., Li, W., Zheng, J., Tian, W. and Li, X. (2012). Shape-Stabilized Phase Change Materials Based on Polyethylene Glycol/Porous Carbon Composite: The Influence of the Pore Structure of the Carbon Materials. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, **105**, 21-26. <https://doi.org/10.1016/j.solmat.2012.05.031>
- [7] Peierls, R. (1935) Quelques propriétés typiques des corps solides. *Annales de l'Institut Henri Poincaré*, **3**, 177-222. http://www.numdam.org/item?id=AIHP_1935__5_3_177_0
- [8] Landau, L.D. (1937) Zur Theorie der phasenumwandlungen II. *Physikalische zeitschrift der Sowjetunion*, **11**, 26-35.
- [9] Mermin, N.D. and Wagner, H. (1966) Absence of Ferromagnetism or Antiferromagnetism in One- or Two-Dimensional Isotropic Heisenberg Models. *Physical Review Letters*, **17**, 1133-1136. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.17.1133>
- [10] Chen, J., Wang, B. and Hu, Y. (2017) An Existence Criterion for Low-Dimensional Materials. *Journal of the Mechanics and Physics of Solids*, **107**, 451-468. <https://doi.org/10.1016/j.jmps.2017.07.017>
- [11] Güngördü, U., Utkan, N.R., Tretiakov, O.A., *et al.* (2016) Stability of Skyrmion Lattices and Symmetries of Quasi-Two-Dimensional Chiral Magnets. *Physical Review B*, **93**, Article ID: 064428. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.93.064428>
- [12] Song, T., Yang, M., Chai, J., *et al.* (2016) The Stability of Aluminium Oxide Monolayer and Its Interface with Two-Dimensional Materials. *Scientific Reports*, **6**, Article No. 29221. <https://doi.org/10.1038/srep29221>
- [13] Chen, J. and Wang, B. (2019) Existence Criteria and Validity of Plate Models for Graphene-Like Materials. *Science China Physics, Mechanics & Astronomy*, **62**, 954611. <https://doi.org/10.1007/s11433-018-9332-2>
- [14] 孟繁臣. 低维碳材料结构和稳定性的第一性原理计算[D]: [硕士学位论文]. 成都: 西南交通大学, 2014.
- [15] 张晓宇. 碳纳米管稳定性、弹性性质及接触问题的研究[D]: [硕士学位论文]. 南京: 南京航空航天大学, 2005.
- [16] 欧阳玉, 彭景翠, 王慧, 等. 碳纳米管的稳定性研究[J]. *物理学报*, 2008, 57(1): 615-620.
- [17] Born, M. and Misra, R.D. (1940) On the Stability of Crystal Lattices. IV. *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, **36**, 466-478. http://journals.cambridge.org/abstract_S0305004100017515
<https://doi.org/10.1017/S0305004100017515>
- [18] 王萼芳, 石生明. 高等代数(第五版)[M]. 北京: 高等教育出版社, 2019.
- [19] Jin, C.H., *et al.* (2009) Deriving Carbon Atomic Chains from Grapheme. *Physical Review Letters*, **102**, Article ID: 205501. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.102.205501>
- [20] Cretu, O., Botello-Mendez, A.R., Janowska, I., Pham-Huu, C., Charlier, J.-C. and Banhart, F. (2013) Electrical Transport Measured in Atomic Carbon Chains. *Nano Letters*, **13**, 3487-3493. <https://doi.org/10.1021/nl4018918>
- [21] Cahangirov, S., Topsakal, M., Aktürk, E., Şahin, H. and Ciraci, S. (2009) Two- and One-Dimensional Honeycomb Structures of Silicon and Germanium. *Physical Review Letters*, **102**, Article ID: 236804. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.102.236804>