

Оптические свойства ван-дер-ваальсовых гетероструктур на основе 2D-монослоев борофена, нитрида галлия и оксида цинка

© М.М. Слепченков, Д.А. Колосов, О.Е. Глухова

Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского, 410012 Саратов, Россия

e-mail: slepchenkovm@mail.ru

Поступила в редакцию 20.12.2022 г.

В окончательной редакции 19.01.2023 г.

Принята к публикации 06.02.2023 г.

Рассмотрены две новые атомные модели ван-дер-ваальсовых вертикальных гетероструктур типа металл-полупроводник на основе 2D-монослоя гофрированного борофена с треугольной кристаллической решеткой, обладающего металлической проводимостью, и графеноподобных 2D-монослоев нитрида галлия GaN и оксида цинка ZnO, являющихся полупроводниками. С помощью теории функционала плотности найдены равновесные конфигурации суперячеек гетероструктур борофен/GaN и борофен/ZnO и показана их термодинамическая стабильность при комнатной температуре. В рамках нестационарной теории возмущения первого порядка рассчитаны оптические характеристики — комплексная диэлектрическая проницаемость и коэффициент поглощения — в диапазоне длин волн электромагнитного излучения 0.2–2 μm . Установлено наличие анизотропии оптических свойств гетероструктур борофен/GaN и борофен/ZnO при выборе направлении поляризации света, обусловленной различным проявлением оптических свойств составляющих гетероструктуры монослоев. Обнаружен синергетический эффект от сочетания монослоев борофена и ZnO в составе вертикальной гетероструктуры борофен/ZnO, проявляющийся в виде возрастающего участка характеристик действительной и мнимой частей комплексной диэлектрической проницаемости в области инфракрасного излучения для обоих направлений поляризации света. Прогнозируется, что на основе гетероструктур борофен/GaN и борофен/ZnO могут быть созданы детекторы УФ излучения.

Ключевые слова: ван-дер-ваальсовы вертикальные гетероструктуры, комплексная диэлектрическая проницаемость, коэффициент поглощения, анизотропия оптических свойств.

DOI: 10.21883/OS.2023.06.55909.115-23

1. Введение

Укладка 2D-кристаллов атомарной толщины с разными типами проводимости в виде вертикальной гетероструктуры открывает широкие возможности для получения новых наноматериалов с уникальными свойствами [1,2]. Благодаря тому, что 2D-кристаллы в таких слоистых гетероструктурах связаны лишь слабыми силами Ван-дер-Ваальса, появляется возможность сочетать атомарно тонкие мембраны с большими различиями в параметрах решетки и даже с совершенно разными кристаллическими структурами [3]. Для формирования вертикальных гетероструктур широко применяются такие 2D-материалы, как графен, нитрид бора, оксид цинка, а также различные представители групп дихалькогенидов переходных металлов (ДПМ), карбидов и нитридов переходных металлов (максены) и металлоорганических соединений [4–9]. Большое разнообразие электронных и оптических свойств упомянутых выше 2D-материалов обуславливает перспективы использования ван-дер-ваальсовых гетероструктур на их основе при создании различных устройств нано- и оптоэлектроники [10–12]. В частности, собственный ван-дер-ваальсовым гетероструктурам сверхбыстрый трансфер заряда делает их перспективным материалом для фото-

чувствительных элементов оптоэлектронных устройств. Уже разработаны фотоэлементы на основе ДПМ-гетероструктур, преимущественно дисульфида MoS₂ и диселенида MoSe₂ молибдена, а также дисульфида WS₂ и диселенида WSe₂ вольфрама [13–15]. При разработке фотодетекторов УФ излучения используются оксиды металлов, например, оксид цинка ZnO и диоксид титана TiO₂, а также представители нитридов III группы, такие как нитриды галлия GaN, алюминия AlN, индия InN [16]. Наиболее востребованным типом датчика УФ излучения является устройство на основе фотодиода с барьером Шоттки, формирующимся в гетероструктурах типа металл-полупроводник [17–23]. В настоящее время для изготовления контактов металл-полупроводник активно используются ван-дер-ваальсовы гетероструктуры на основе графена, MoS₂, MoSe₂, MoTe₂ [21–23]. С успешным синтезом борофена — 2D-материала, целиком состоящего из атомов бора [24], стала обсуждаться возможность реализации контакта металл-полупроводник на борофеновых гетероструктурах [25–27]. В частности, на основе результатов расчетов из первых принципов прогнозируется, что для создания контактов с барьером Шоттки могут быть использованы ван-дер-ваальсовы гетероструктуры типа борофен β_{12}/MX_2 (M = Mo, W и X = S, Se) [25], борофен/InSe [26], борофен/g-C₂N [27].

Отличительной чертой этих гетероструктур является возможность управления величиной барьера Шоттки за счет деформации растяжения/сжатия [25] и внешнего электрического поля [26,27].

В настоящей работе рассматриваются две новые конфигурации ван-дер-ваальсовых гетероструктур типа металл-полупроводник на основе борофена: борофен/GaN и борофен/ZnO. Целью работы является предварительная оценка оптических свойств ван-дер-ваальсовых гетероструктур борофен/GaN и борофен/ZnO методами из первых принципов.

2. Методы исследования

Исследование *ab initio* ван-дер-ваальсовых гетероструктур проводилось в рамках теории функционала плотности (DFT), реализованной в программном пакете SIESTA 4.1.5 [28]. Для описания обменно-корреляционных эффектов использовалось приближение обобщенного градиента (GGA, generalized gradient approximation) в параметризации PBE (Perdew–Burke–Ernzerhof) [29]. Описание ван-дер-ваальсова взаимодействия между слоями гетероструктуры проводилось с использованием дисперсионных поправок Гримма (силовое поле DFT+D2) [30]. Оптимизация атомной структуры суперячеек проводилась до тех пор, пока изменение силы, действующей на каждый атом, не становилось менее 0.025 eV/Å. При этом использовался базисный набор валентно-расщепленных орбиталей DZ2P (double zeta 2 polarization), включающий в себя поляризационные функции. Минимизация энергии электронной подсистемы осуществлялась с помощью эффективной схемы смешивания Бройдена–Пулая [31]. Для исключения влияния слоев гетероструктуры друг на друга в не периодичном направлении величина вакуумного промежутка составляла не менее 20 Å. Энергия отсечки выбиралась равной 150 Ry. Разбиение зоны Бриллюэна проводилось по методу Монхорст–Пэка [32] с размером сетки k -точек $12 \times 6 \times 1$.

Для исследования оптических свойств ван-дер-ваальсовых гетероструктур в программном пакете SIESTA рассчитывалась комплексная частотно-зависимая диэлектрическая проницаемость в рамках нестационарной теории возмущений первого порядка [33]. Мнимая часть диэлектрической проницаемости определяет оптическое поглощение, которое рассчитывается по скорости перехода между занятыми состояниями валентной зоны и свободными состояниями зоны проводимости. Формула для вычисления коэффициента поглощения A имеет следующий вид:

$$A(\omega) = \frac{\omega}{cn(\omega)} \epsilon_2(\omega), \quad (1)$$

где $\epsilon_2(\omega)$ — мнимая часть комплексной диэлектрической проницаемости, $n(\omega)$ — показатель преломления,

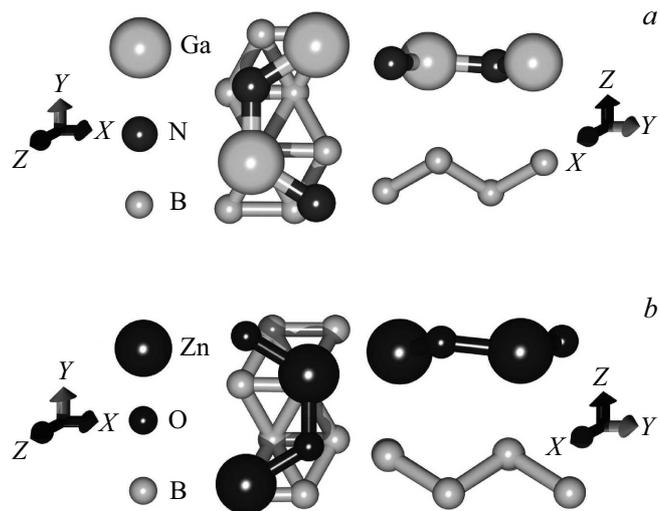


Рис. 1. Атомная структура суперячеек ван-дер-ваальсовых гетероструктур борофен/GaN (a) и борофен/ZnO (b).

c — скорость света. Расчет $\epsilon_2(\omega)$ проводится по формуле вида

$$\epsilon_2(\omega) = \frac{e^2}{\pi m^2 \omega^2} \sum_{v,c} \int_{BZ} dk \times |\langle \psi_{ck} | \hat{\mathbf{e}} \cdot \mathbf{p} | \psi_{vk} \rangle|^2 \delta(E_c(k) - E_v(k) - \hbar\omega), \quad (2)$$

где суммирование проводится по каждой паре состояний валентной (заполненной) зоны и зоны проводимости (незанятой), а интегрирование — по всем k -точкам в зоне Бриллюэна, индексы c и v относятся к электронным состояниям в зоне проводимости и валентной зоне соответственно, $E_{c,v}(k)$ и $\phi_{(c,v),k}$ — энергии и собственные функции этих состояний. Матричный элемент электронного дипольного перехода находится между занятым и незанятым состояниями, где $\hat{\mathbf{e}}$ — вектор поляризации, а \mathbf{p} — оператор импульса. Оптические параметры исследуемых ван-дер-ваальсовых гетероструктур рассчитывались для двух разных направлений поляризации света (вектор \mathbf{E} параллелен оси X и параллелен оси Y) для диапазона энергий от 0.6 до 20 eV с использованием оптического уширения 0.05 eV. Расчет оптических характеристик исследуемых гетероструктур проводился при разбиении зоны Бриллюэна с размером сетки k -точек $114 \times 65 \times 1$.

3. Атомное строение ван-дер-ваальсовых гетероструктур борофен/GaN и борофен/ZnO

Для построения суперячеек исследуемых ван-дер-ваальсовых гетероструктур были использованы графеноподобные листы GaN и ZnO, а также 2D-лист гофрированного борофена с треугольной кристаллической решеткой. Элементарные ячейки монослоев GaN и

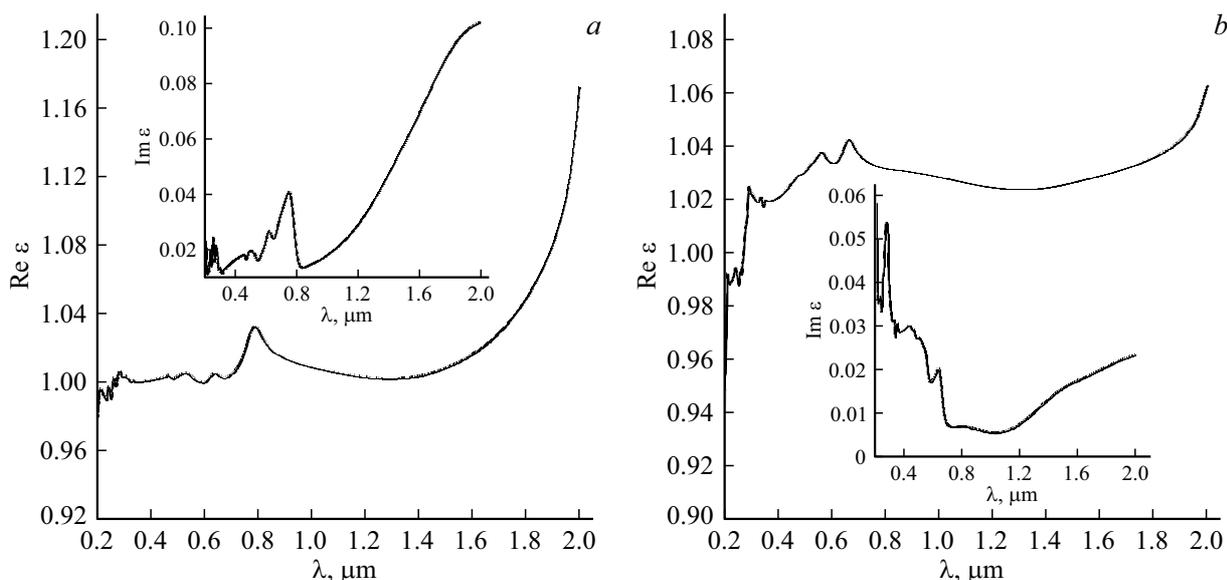


Рис. 2. Зависимости действительной Re и мнимой Im частей комплексной диэлектрической проницаемости ϵ гетероструктуры борофен/GaN от длины волны λ для двух направлений поляризации света: (а) вдоль оси X ; (б) вдоль оси Y .

ZnO были взяты из базы данных открытого доступа Materials Project [34]. Их векторы трансляции составляют $L_x = 3.204 \text{ \AA}$, $L_y = 5.55 \text{ \AA}$ для GaN и $L_x = 3.205 \text{ \AA}$, $L_y = 5.551 \text{ \AA}$ для ZnO. Выбор 2D-структур ZnO и GaN объясняется близким соответствием параметров их кристаллической решетки с кристаллической решеткой гофрированного борофена, что позволяет существенно уменьшить размеры рассчитываемых атомарных структур. Кроме того, и GaN, и ZnO ранее успешно использовались при построении вертикальных гетероструктур на основе графена, продемонстрировавших многообещающие оптоэлектронные свойства [35,36]. Элементарная ячейка гофрированного борофена была построена с учетом данных работы [37]. Векторы трансляции этой ячейки составляют $L_x = 1.613 \text{ \AA}$, $L_y = 2.864 \text{ \AA}$. Выбор гофрированного борофена с треугольной кристаллической решеткой среди существующих аллотропных форм борофена объясняется его высокой энергетической стабильностью [38]. На рис. 1 изображены суперячейки ван-дер-ваальсовых гетероструктур борофен/GaN и борофен/ZnO (вид сверху и вид сбоку). Векторы трансляции оптимизированной суперячейки для гетероструктуры борофен/GaN составили $L_x = 3.35 \text{ \AA}$, $L_y = 6.10 \text{ \AA}$, для гетероструктуры борофен/ZnO — $L_x = 3.28 \text{ \AA}$, $L_y = 5.83 \text{ \AA}$. Расстояние между монослоями борофена и GaN по оси Z составляет 2.91 \AA , между слоями борофена и ZnO — 2.51 \AA .

Для построенных суперячеек гетероструктур борофен/GaN и борофен/ZnO проведена оценка термодинамической стабильности при комнатной температуре. Термодинамическая стабильность оценивалась по величине энергии связи, которая рассчитывалась как разность полной энергии гетероструктуры и полной энергии изолированных монослоев, деленная на число

атомов в составе суперячейки. Согласно полученным результатам расчетов, энергия связи для суперячейки гетероструктуры борофен/GaN составляет $\sim -50 \text{ meV/atom}$, для суперячейки борофен/ZnO $\sim -80 \text{ meV/atom}$. Отрицательная величина энергии связи свидетельствует о том, что структуры являются стабильными по энергии, а значит, могут быть реализованы на практике. Кроме того, по величине энергии связи гетероструктуры борофен/GaN и борофен/ZnO превосходят ряд других гетероструктур на основе монослоев GaN и ZnO, например, гетероструктуры MoSSe-*g*-GaN и WSSe-*g*-GaN — почти в 2 раза [39], а гетероструктуру ZnO/*g*-GeC — более чем в 6 раз [40].

4. Оптические свойства ван-дер-ваальсовых гетероструктур борофен/GaN и борофен/ZnO

Анализ оптических свойств исследуемых ван-дер-ваальсовых гетероструктур борофен/GaN и борофен/ZnO проводился по результатам рассчитанных спектров диэлектрической проницаемости и поглощения в диапазоне длин волн $0.2\text{--}2 \mu\text{m}$ (диапазоны УФ, оптического и ближнего ИК излучения). Расчеты проводились для двух направлений поляризации света (вдоль осей X и Y). На рис. 2 изображены графики действительной (Re) и мнимой (Im) частей комплексной диэлектрической проницаемости ϵ гетероструктуры борофен/GaN в зависимости от длины волны электромагнитного излучения λ . Из представленных зависимостей видно, что при поляризации света и вдоль оси X , и вдоль оси Y $Re \epsilon$ превышает $Im \epsilon$ в десятки раз. Следовательно, в рассматриваемом диапазоне длин волн гетероструктура

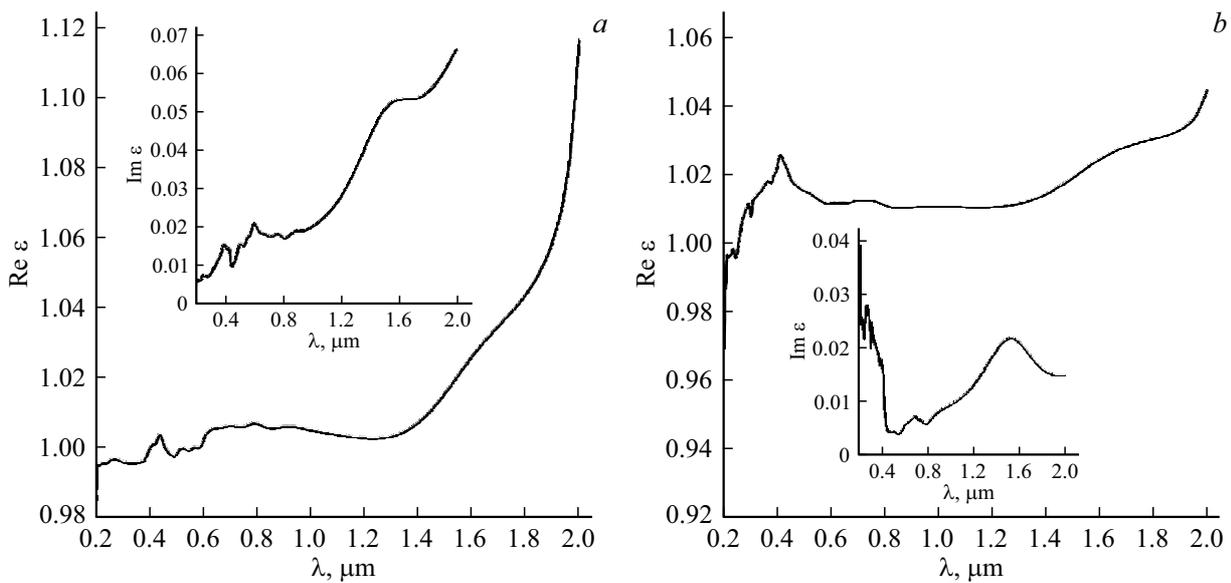


Рис. 3. Зависимости действительной $Re \epsilon$ и мнимой $Im \epsilon$ частей комплексной диэлектрической проницаемости ϵ гетероструктуры борофен/ZnO от длины волны λ для двух направлений поляризации света: (a) вдоль оси X; (b) вдоль оси Y.

борофен/GaN проявляет себя как среда с диэлектрическими свойствами. Закономерности изменения $Re \epsilon$ с увеличением длины волны для обоих направлений поляризации света схожи в отличие от поведения $Im \epsilon$. Вдоль оси X значения $Im \epsilon$ возрастают при переходе между диапазонами УФ, видимого и ИК излучения, в то время как вдоль оси Y в диапазонах УФ и видимого излучения $Im \epsilon$ немонотонно убывает, а в диапазоне ИК излучения наблюдается её плавный рост. Соответственно максимум $Im \epsilon$ при поляризации света вдоль оси X приходится на область ближнего ИК излучения, вдоль оси Y на область УФ излучения. Наблюдаемые различия свидетельствуют о наличии анизотропии диэлектрической проницаемости для данной структуры, которая должна отразиться и на способности гетероструктуры борофен/GaN к поглощению электромагнитного излучения, учитывая прямую взаимосвязь между $Im \epsilon$ и коэффициентом поглощения согласно формуле (1).

Зависимости $Re \epsilon$ и $Im \epsilon$ от длины волны λ для гетероструктуры борофен/ZnO представлены на рис. 3. Как и в случае гетероструктуры борофен/GaN, $Re \epsilon$ отличается от $Im \epsilon$ в десятки раз для обоих направлений поляризации света, следовательно, гетероструктуру борофен/ZnO можно считать средой с диэлектрическими свойствами в рассматриваемом диапазоне длин волн. Сходство между гетероструктурами борофен/GaN и борофен/ZnO распространяется и на характер изменения величин $Re \epsilon$ и $Im \epsilon$ в разных направлениях поляризации света. Следовательно, применительно к гетероструктуре борофен/ZnO также можно говорить об анизотропии диэлектрической проницаемости.

Для объяснения особенностей изменения диэлектрической проницаемости гетероструктур борофен/GaN и борофен/ZnO в рассматриваемом диапазоне длин волн,

в том числе установления причин анизотропии, были изучены закономерности формирования спектрального профиля $Re \epsilon$ и $Im \epsilon$ обеих структур. На рис. 4 и 5 показаны профили $Re \epsilon$ и $Im \epsilon$ гетероструктуры борофен/GaN и составляющих ее 2D-монослоев для случаев поляризации вдоль осей X и Y соответственно. Из рис. 4 следует, что в направлении оси X определяющий вклад в формирование профиля диэлектрической проницаемости вносит монослой GaN. В то же время характерный пик, присутствующий на графиках $Re \epsilon$ и $Im \epsilon$ монослоя GaN в области УФ излучения, у гетероструктуры борофен/GaN смещается к границе областей видимого и ИК диапазонов, что может быть объяснено влиянием монослоя борофена, выступающего в роли подложки для GaN. В направлении оси Y (рис. 5) роль монослоя борофена в формировании профилей $Re \epsilon$ и $Im \epsilon$ гетероструктуры борофен/GaN становится более заметной, но только в пределах УФ и видимого диапазонов. В частности, его влиянием объясняется пик в области среднего УФ излучения и убывающий характер зависимостей $Re \epsilon$ и $Im \epsilon$ в области видимого излучения.

Спектральные профили $Re \epsilon$ и $Im \epsilon$ гетероструктуры борофен/ZnO и составляющих ее 2D-монослоев для случаев поляризации вдоль осей X и Y показаны на рис. 6 и 7 соответственно. Анализ представленных на рисунках расчетных данных показывает, что проявлением синергетического эффекта от сочетания монослоев борофена и ZnO в составе вертикальной гетероструктуры является наличие возрастающего участка характеристик $Re \epsilon$ и $Im \epsilon$ в области ИК диапазона для обоих направлений поляризации света. На характеристиках монослоев борофена и ZnO в области ИК диапазона значения $Re \epsilon$ и $Im \epsilon$ почти не изменяются, причем $Im \epsilon$ принимает

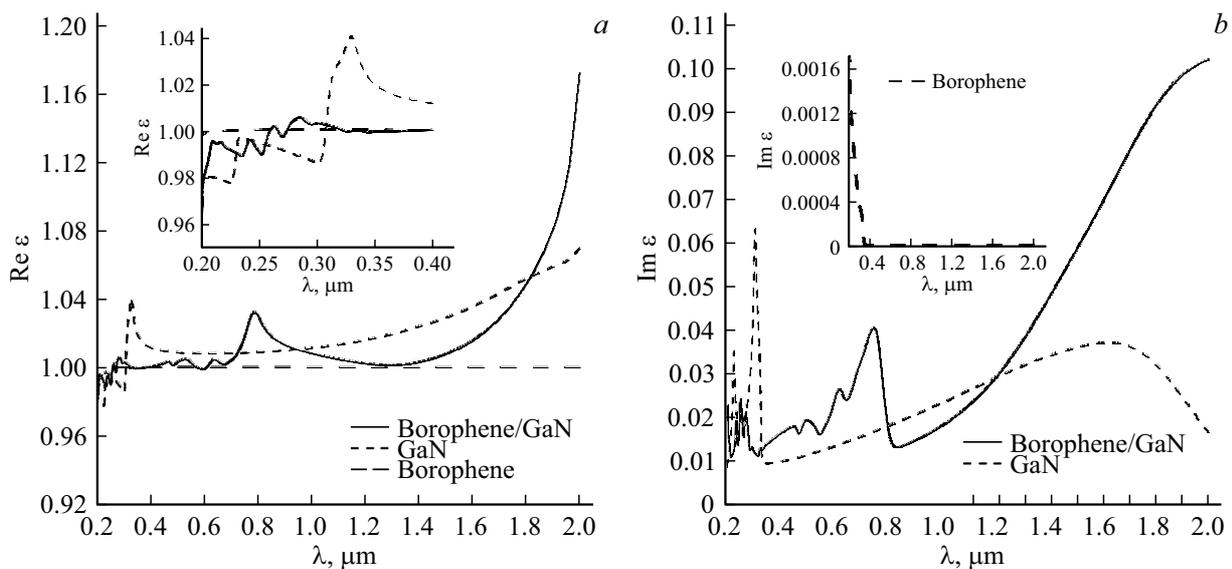


Рис. 4. Спектральный профиль комплексной диэлектрической проницаемости ϵ гетероструктуры борофен/GaN при поляризации света вдоль оси X : (a) $\text{Re } \epsilon$; (b) $\text{Im } \epsilon$.

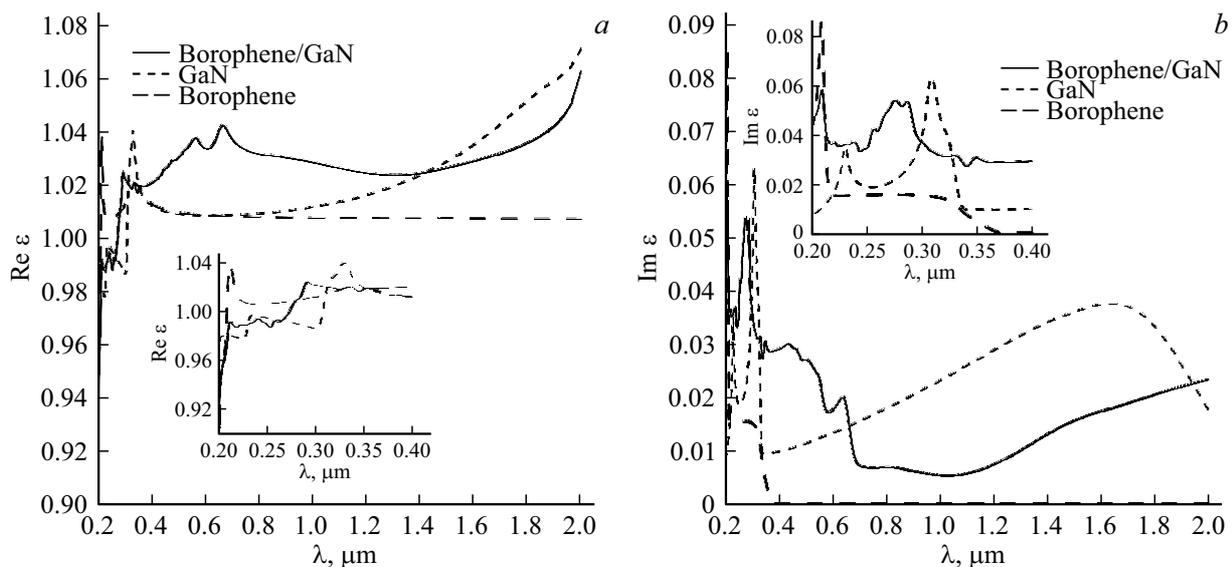


Рис. 5. Спектральный профиль комплексной диэлектрической проницаемости ϵ гетероструктуры борофен/GaN при поляризации света вдоль оси Y : (a) $\text{Re } \epsilon$; (b) $\text{Im } \epsilon$.

близкие к нулю значения. В области УФ и видимого диапазонов основной вклад в формирование профилей $\text{Re } \epsilon$ и $\text{Im } \epsilon$ в направлении оси X вносит ZnO, в направлении оси Y — борофен. Появление синергетического эффекта именно в случае гетероструктуры борофен/ZnO можно объяснить следующими причинами.

1) Монослои борофена и ZnO расположены ближе друг к другу (2.51 \AA) в направлении оси Z (не периодическом) в составе суперячейки по сравнению с величиной расстояния между монослоями борофена и GaN (2.91 \AA). Различия между расстояниями вдоль оси Z приводят к заметной разнице в величинах двугранных углов — у

монослоя GaN она отрицательная и составляет -7.21° , а у монослоя ZnO она положительная и составляет 19.18° . За счет указанных различий взаимодействие между слоями в составе гетероструктуры борофен/ZnO будет более ощутимым, что приведет к более заметным изменениям свойств гетероструктуры по сравнению со свойствами составляющих ее монослоев.

2) Монослои GaN и ZnO имеют различия на уровне зонной структуры: GaN имеет непрямую запрещенную зону [41], а ZnO — прямую запрещенную зону [42]. Также между ними имеются различия и в величине запрещенной зоны [43–45].

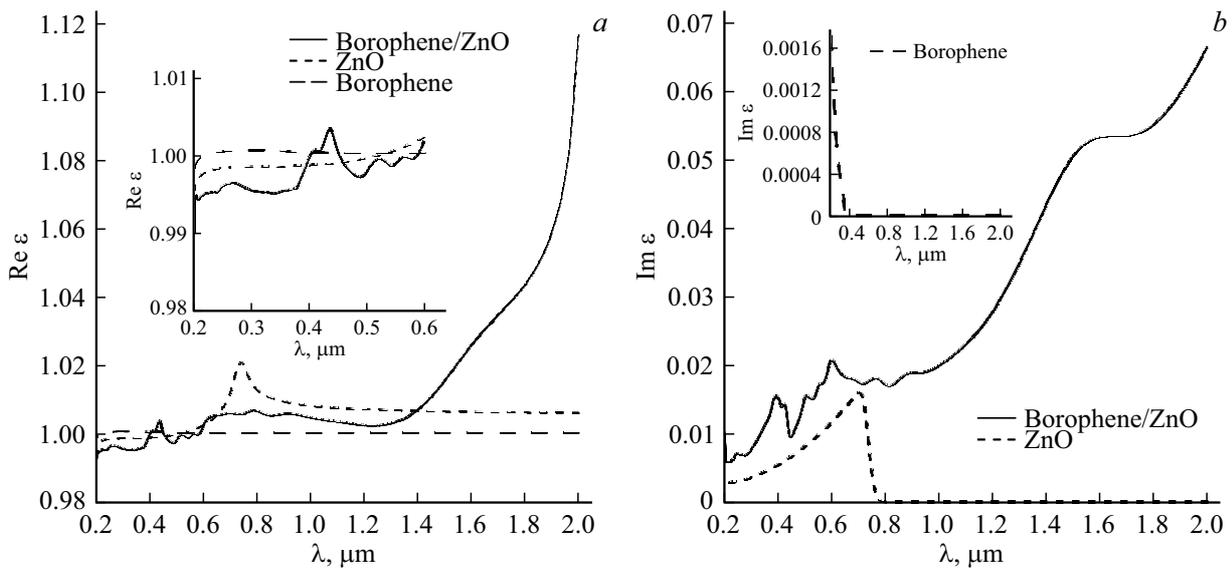


Рис. 6. Спектральный профиль комплексной диэлектрической проницаемости ϵ гетероструктуры борофен/ZnO при поляризации света вдоль оси X: (a) $\text{Re } \epsilon$; (b) $\text{Im } \epsilon$.

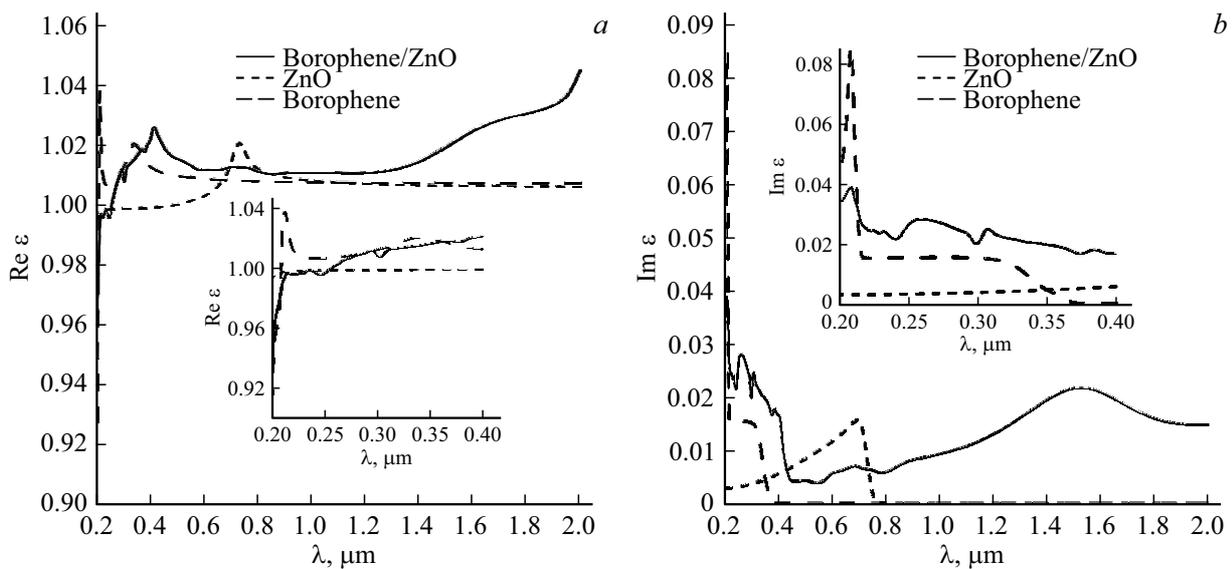


Рис. 7. Спектральный профиль комплексной диэлектрической проницаемости ϵ гетероструктуры борофен/ZnO при поляризации света вдоль оси Y: (a) $\text{Re } \epsilon$; (b) $\text{Im } \epsilon$.

Обратимся к анализу спектров поглощения гетероструктур борофен/GaN и борофен/ZnO, представленных на рис. 8. Видно, что обеим гетероструктурам свойственна анизотропия коэффициента поглощения при выборе направления поляризации света, проявившаяся ранее на графиках $\text{Im } \epsilon$. Можно отметить, что пик поглощения для обеих гетероструктур приходится на область УФ диапазона, что объясняется весомым вкладом борофена в случае поляризации света вдоль оси Y и вкладом монослоя ZnO в случае поляризации света вдоль оси X. В области ИК диапазона коэффициент поглощения мал и составляет не более 3–4% в обоих направлениях

поляризации света, что объясняется малой величиной $\text{Im } \epsilon$ монослоев борофена, GaN и ZnO в этом интервале длин волн. Разница в значениях коэффициента поглощения гетероструктуры борофен/GaN между УФ и видимым диапазонами может достигать ~ 7 раз, между УФ и ближним ИК диапазонами — ~ 14 раз. Для гетероструктуры борофен/ZnO эта разница может составлять соответственно до ~ 6 раз и до ~ 18 раз. Высокая чувствительность к электромагнитному излучению в УФ диапазоне по сравнению с чувствительностью в видимом и ближнем ИК диапазонах позволяет предположить, что на основе вертикальных гетероструктур борофен/GaN и

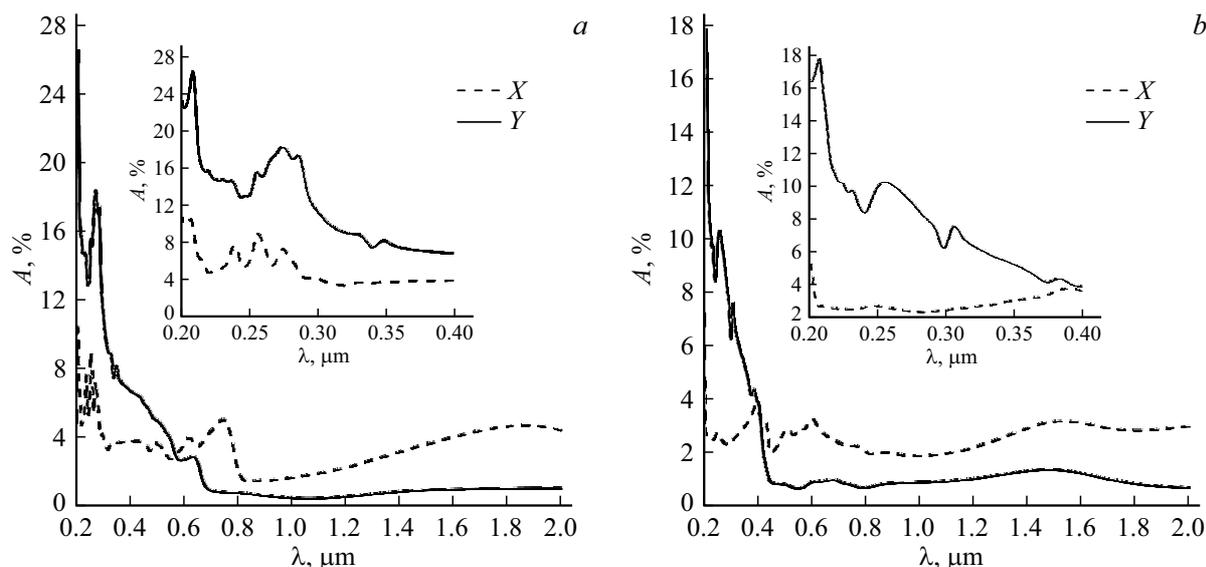


Рис. 8. Коэффициент поглощения гетероструктур борофен/GaN (a) и борофен/ZnO (b) при поляризации света вдоль осей X и Y.

борофен/ZnO могут быть созданы детекторы излучения в УФ диапазоне.

5. Заключение

По итогам проведенного исследования методами *ab initio* можно сделать следующие выводы. Рассмотренные атомные конфигурации ван-дер-ваальсовых гетероструктур борофен/GaN и борофен/ZnO в диапазоне длин волн 0.2–2 μm проявляют себя как среды с диэлектрическими свойствами. Для каждой из гетероструктур при выборе направления поляризации света (вдоль края зигзагообразной формы монослоев GaN/ZnO — оси X, вдоль края зигзагообразной формы монослоя борофена — оси Y) характерна анизотропия диэлектрической проницаемости и коэффициента поглощения, обусловленная разной степенью влияния составляющих гетероструктуру монослоев: при поляризации света в направлении оси X определяющий вклад в оптические свойства гетероструктур вносят полупроводниковые монослои GaN и ZnO, а в направлении оси Y — монослой борофена, обладающий металлической проводимостью. Обе гетероструктуры демонстрируют высокую чувствительность к излучению УФ диапазона, что делает их потенциально перспективными материалами для разработки детекторов УФ излучения в среднем и дальнем диапазонах. Прогнозируется, что эффективность таких детекторов будет высока, поскольку обе гетероструктуры мало чувствительны к другим длинам волн.

Финансирование работы

Работа выполнена при поддержке гранта Российского научного фонда (проект № 21-72-00082), <https://rscf.ru/project/21-72-00082/>.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] A.K. Geim, I.V. Grigorieva. *Nature*, **499**, 419 (2013). DOI: 10.1038/nature12385
- [2] K.S. Novoselov, A. Mishchenko, A. Carvalho, A.H. Castro Neto. *Science*, **353**, aac9439 (2016). DOI: 10.1126/science.aac94
- [3] J. Yao, G. Yanga. *J. Appl. Phys.*, **131**, 161101 (2022). DOI: 10.1063/5.0087503
- [4] L. Britnell, R.V. Gorbachev, R. Jalil, B.D. Belle, F. Schedin, A. Mishchenko, T. Georgiou, M.I. Katsnelson, L. Eaves, S.V. Morozov, N.M. Peres, J. Leist, A.K. Geim, K.S. Novoselov, L.A. Ponomarenko. *Science*, **335**, 947 (2012). DOI: 10.1126/science.1218461
- [5] C.C. Chen, Z. Li, L. Shi, S.B. Cronin. *Nano Res.*, **8**, 666 (2015). DOI: 10.1007/s12274-014-0550-8
- [6] C.E. Ekuma, S. Najmaei. *ACS Appl. Nano Mater.*, **3**, 7136 (2020). DOI: 10.1021/acsnm.0c01465
- [7] W. Choi, N. Choudhary, G.H. Han, J. Park, D. Akinwande, Y.H. Lee. *Mater. Today*, **20**, 116 (2017). DOI: 10.1016/j.mattod.2016.10.002
- [8] Z. Kang, Y. Ma, X. Tan, M. Zhu, Z. Zheng, N. Liu, L. Li, Z. Zou, X. Jiang, T. Zhai, Y. Gao. *Adv. Electron. Mater.*, **3**, 1700165 (2017). DOI: 10.1002/aelm.201700165
- [9] X. Kong, Q. Liu, C. Zhang, Z. Peng, Q. Chen. *Chem. Soc. Rev.*, **46**, 2127 (2017). DOI: 10.1039/C6CS00937A
- [10] Y. Liu, N.O. Weiss, X. Duan, H.-C. Cheng, Y. Huang, X. Duan. *Nat. Rev. Mater.*, **1**, 16042 (2016). DOI: 10.1038/natrevmats.2016.42
- [11] X. Zhou, X. Hu, J. Yu, S. Liu, Z. Shu, Q. Zhang, H. Li, Y. Ma, H. Xu, T. Zhai. *Adv. Funct. Mater.*, **28**, 1706587 (2018). DOI: 10.1002/adfm.201706587
- [12] S. Liang, B. Cheng, X. Cui, F. Miao. *Adv. Mater.*, **32**, 1903800 (2019). DOI: 10.1002/adma.201903800

- [13] M.Z. Bellus, M. Li, S.D. Lane, F. Ceballos, Q. Cui, X.C. Zeng, H. Zhao. *Nanoscale Horiz.*, **2**, 31 (2017). DOI: 10.1039/C6NH00144K
- [14] X. Hong, J. Kim, S.-F. Shi, Y. Zhang, C. Jin, Y. Sun, S. Tongay, J. Wu, Y. Zhang, F. Wang. *Nature Nanotech.*, **9**, 682 (2014). DOI: 10.1038/nnano.2014.167
- [15] K. Zhang, T. Zhang, G. Cheng, T. Li, S. Wang, W. Wei, X. Zhou, W. Yu, Y. Sun, P. Wang, D. Zhang, C. Zeng, X. Wang, W. Hu, H.J. Fan, G. Shen, X. Chen, X. Duan, K. Chang, N. Dai. *ACS Nano*, **10**, 3852 (2016). DOI: 10.1021/acsnano.6b00980
- [16] Y. Zou, Y. Zhang, Y. Hu, H. Gu. *Sensors*, **18**, 2072 (2018). DOI: 10.3390/s18072072
- [17] L. Peng, Y. Cui, L. Sun, J. Du, S. Wang, S. Zhang, Y. Huang. *Nanoscale Horiz.*, **4**, 480 (2019). DOI: 10.1039/C8NH00413G
- [18] W.X. Zhang, Y. Yina, C. He. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **22**, 26231 (2020). DOI: 10.1039/D0CP04474A
- [19] Y. Zhu, K. Liu, Q. Ai, Q. Hou, X. Chen, Z. Zhang, X. Xie, B. Lia, D. Shen. *J. Mater. Chem. C*, **8**, 2719 (2020). DOI: 10.1039/C9TC06416H
- [20] Z. Liu, X. Wang, Y. Liu, D. Guo, S. Li, Z. Yan, C.-K. Tan, W. Li, P. Li, W. Tang. *J. Mater. Chem. C*, **7**, 13920 (2019). DOI: 10.1039/C9TC04912F
- [21] L. Yu, Y.H. Lee, X. Ling, E.J. Santos, Y.C. Shin, Y. Lin, M. Dubey, E. Kaxiras, J. Kong, H. Wang, T. Palacios. *Nano Lett.*, **14**, 3055 (2014). DOI: 10.1021/nl404795z
- [22] K. Zhang, T. Zhang, G. Cheng, T. Li, S. Wang, W. Wei, X. Zhou, W. Yu, Y. Sun, P. Wang, D. Zhang, C. Zeng, X. Wang, W. Hu, H.J. Fan, G. Shen, X. Chen, X. Duan, K. Chang, N. Dai. *ACS Nano*, **10**, 3852 (2016). DOI: 10.1021/acsnano.6b00980
- [23] S. Kaur, A. Kumar, S. Srivastava, K. Tankeshwar. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **19**, 22023 (2017). DOI: 10.1039/C7CP03960C
- [24] A.J. Mannix, X.-F. Zhou, B. Kiraly, J.D. Wood, D. Alducin, B.D. Myers, X. Liu, B.L. Fisher, U. Santiago, J.R. Guest, M.J. Yacaman, A. Ponce, A.R. Oganov, M.C. Hersam, N.P. Guisinger. *Science*, **350**, 1513 (2015). DOI: 10.1126/science.aad1080
- [25] N. Katoch, A. Kumar, R. Sharma, P.K. Ahluwalia, J. Kumar. *Phys. E: Low-Dimens. Syst. Nanostructures*, **120**, 113842, (2020). DOI: 10.1016/j.physe.2019.113842
- [26] S. Jing, W. Chen, J. Pan, W. Li, B. Bian, B. Liao, G. Wang. *Mater. Sci. Semicond. Process.*, **146**, 106673 (2022). DOI: 10.1016/j.mssp.2022.106673
- [27] J.W. Jiang, X.C. Wang, Y. Song, W.B. Mi. *Appl. Surf. Sci.*, **440**, 42 (2018). DOI: 10.1016/j.apsusc.2018.01.140
- [28] J.M. Soler, E. Artacho, J.D. Gale, A. García, J. Junquera, P. Ordejón, D. Sánchez-Portal. *J. Phys.: Condens. Matt.*, **14**, 2745 (2002). DOI: 10.1088/0953-8984/14/11/302
- [29] J.P. Perdew, J.A. Chevary, S.H. Vosko, K.A. Jackson, M.R. Pederson, D.J. Singh, C. Fiolhais. *Phys. Rev. B*, **46**, 6671 (1992). DOI: 10.1103/PhysRevB.46.6671
- [30] S. Grimme. *J. Comput. Chem.*, **27**, 1787 (2006). DOI: 10.1002/jcc.20495
- [31] H.J. Monkhorst, J.D. Pack. *Phys. Rev. B*, **13**, 5188 (1976). DOI: 10.1103/PhysRevB.13.5188
- [32] P. Pulay. *Chem. Phys. Lett.*, **73**, 393 (1980). DOI: 10.1016/0009-2614(80)80396-4
- [33] E.N. Economou. *Green's Functions in Quantum Physics*, 3rd ed. (Springer, Berlin, 1983), p. 55–75. DOI: 10.1007/3-540-28841-4_4
- [34] *The Materials Project*. [Электронный ресурс]. URL: <https://materialsproject.org/>.
- [35] Z. Deng, X. Wang, J. Cui. *RSC Adv.*, **9**, 13418 (2019). DOI: 10.1039/C9RA01576K
- [36] J. Wu, M. Gong. *J. Appl. Phys.*, **130**, 070905 (2021). DOI: 10.1063/5.0060255
- [37] Z. Luo, X. Fan, Y. An. *Nanoscale Res. Lett.*, **12**, 514 (2017). DOI: 10.1186/s11671-017-2282-7
- [38] Z. Zhang, E.S. Penev, B.I. Yakobson. *Chem. Soc. Rev.*, **46**, 6746 (2017). DOI: 10.1039/C7CS00261K
- [39] M. Idrees, C.V. Nguyen, H.D. Bui, I. Ahmad, B. Amin. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **22**, 20704 (2020). DOI: 10.1039/D0CP03434G
- [40] X. Gao, Y. Shen, Y. Ma, S. Wu, Z. Zhou. *J. Mater. Chem. C*, **7**, 4791 (2019). DOI: 10.1039/C9TC00423H
- [41] H. Xiang, H. Quan, Y. Hu, W. Zhao. *J. Inorg. Mater.*, **36**, 492 (2021). DOI: 10.15541/jim20200346
- [42] K. Ren, J. Yu, W. Tang. *J. Alloys Compd.*, **812**, 152049 (2020). DOI: 10.1016/j.jallcom.2019.152049
- [43] S. Xia, Y. Diao, C. Kan. *J. Colloid Interface Sci.*, **607**, 913 (2022). DOI: 10.1016/j.jcis.2021.09.050
- [44] G. Wang, W. Tang, L. Geng, Y. Li, B. Wang, J. Chang, H. Yuan. *Phys. Status Solidi B*, **257**, 1900663 (2019). DOI: 10.1002/pssb.201900663
- [45] Y. Zhang, M. Zhang, Y. Zhou, J. Zhao, S. Fang, F. Li. *J. Mater. Chem. A*, **2**, 13129 (2014). DOI: 10.1039/C4TA01874E