Влияние ширины шейки на оптические свойства перфорированного графена

© П.В. Барков[1], М.М. Слепченков[1], О.Е. Глухова[1,2]

[1] Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского, Саратов, Россия
[2] Первый Московский государственный медицинский университет имени И.М. Сеченова, Москва, Россия

e-mail: slepchenkovm@mail.ru

Поступила в редакцию 25.12.2026 г.
В окончательной редакции 23.01.2026 г.
Принята к публикации 03.06.2026 г.

Методом функционала плотности в приближении сильной связи проведён прогностический анализ оптических свойств тонких пленок перфорированного графена с отверстиями почти круглой формы диаметром ~ 1 nm. Изучено влияние одного из ключевых геометрических параметров перфорированного графена — ширины шейки — на его оптическую проводимость при поляризации света в направлении „зигзаг“ (ось X) и в направлении „кресло“ (ось Y) гексагональной решетки. Ширина шейки в направлении „зигзаг“ гексагональной решетки графена меняется в диапазоне от 0.74 nm до 2.22 nm с шагом $\Delta W_X = 0.24$ nm, ширина шейки в направлении „кресло“ меняется в диапазоне от 1.01 nm до 2.29 nm с шагом $\Delta W_Y = 0.42$ nm. Для расчета оптической проводимости использована формула Кубо-Гринвуда из теории линейного отклика на внешнее воздействие. Определены значения ширины шейки, при которых пленки перфорированного графена имеют щелевую зонную структуру, и как наличие запрещенной зоны влияет на их оптическую проводимость. На основе полученных результатов обсуждена возможность использования исследуемых пленок перфорированного графена в качестве чувствительного элемента детекторов инфракрасного и ультрафиолетового излучения.

Ключевые слова: перфорированный графен, оптическая проводимость, теория функционала плотности в приближении сильной связи, ширина шейки.

DOI: 10.61011/OS.2026.08.63704.22-26

Введение

Экспериментальное получение монослойного графена в 2004 году [1] стимулировало исследователей к изучению его свойств как методами физического эксперимента, так и методами компьютерного моделирования. Превосходные показатели прочности [2] и электропроводности [3], высокая подвижность носителей заряда [4], а также наличие квантового эффекта Холла при комнатной температуре [5] и амбиполярного эффекта электрического поля, делают графен перспективным материалом для разработки устройств нано- и оптоэлектроники [6]. В то же время главной проблемой на пути широкого использования графена в электронных устройствах является отсутствие запрещенной зоны в его электронной структуре. В связи с этим актуальной задачей материаловедения является разработка полупроводниковых наноматериалов на основе графена. Примерами полупроводниковых графеновых наноструктур, синтезируемых в лабораторных условиях, являются графеновые наноточки [7], наноленты [8] и наносетки [9]. Графеновые наносетки или перфорированный графен, как его называют в литературе [9], появился последним из трех вышеназванных структурных разновидностей графена, но уже успел зарекомендовать себя как перспективный материал для создания элементной базы нано- и оптоэлектронных устройств [10]. Перфорированный графен (ПГ) представляет собой 2D-наноматериал с периодическим массивом отверстий в гексагональной решетке. На практике ПГ получают с помощью нанолитографии [11] или путем электронного облучения слоя графена [12]. Наличие большого количества отверстий в гексагональной решетке графена вызывает эффекты квантового ограничения, обусловливающие изменение электронных свойств ПГ по сравнению с обычным графеном [13–15]. Методами *ab initio* было предсказано, что перфорация гексагональной решетки графена открывает в его электронной структуре запрещенную зону конечной ширины [14,15], которая приводит к увеличению отношения токов включения/выключения, наблюдаемому экспериментально [16,17]. Обладая высокой реакционной способностью, края отверстий ПГ легко декорируются кислород- и водородсодержащими функциональными группами, предоставляя большое число активных центров для адсорбции различных химических и биологических веществ, что предопределяет возможность использования ПГ для создания сенсоров с высокой селективностью [18]. Перфорация графеновой решетки также облегчает процесс протекания поперечной диффузии ионов, делая возможным создание на основе ПГ устройств хранения энергии с высокой скоростью зарядки/разрядки [19].

В последние годы интенсивно развиваются исследования, направленные на выявление характерных особенностей оптических свойств ПГ [20–23]. В рамках модели сильной связи в π-электронном приближении был проведен анализ оптических свойств решеток ПГ с отверстиями почти круглой и треугольной форм [20], по итогам которого установлено, что исследуемые материалы являются прямозонными полупроводниками с разрешенными в дипольном приближении переходами и с ярко выраженным оптическим краем поглощения. В том же исследовании выявлен убывающий по степенному закону характер коэффициента отражения ПГ с увеличением размера его энергетической щели, контролируемого с помощью периодичности и размера отверстия. Методом функционала плотности (DFT) с использованием формализма Кубо-Гринвуда исследовалось влияние пассивации краевых участков отверстий атомами водорода, фтора и азота на спектры поглощения ПГ с отверстиями гексагональной формы и зигзагообразными краями [21]. Моделирование *ab initio* показало, что поглощение света наносетками ПГ с пассивированными краевыми участками при высоких энергиях фотонов уменьшается с увеличением размера отверстий, в то время как при низких энергиях фотонов поглощение графеновых наносеток увеличивается. При этом в случае низких энергий фотонов поглощение света в пассивированных структурах ПГ в два раза выше, чем у непассивированных. Возможность настройки оптических свойств двухслойных структур ПГ с периодически расположенными отверстиями гексагональной формы фиксированного диаметра с помощью механических деформаций исследуется в работе [22] с применением методов *ab intio*. Проведенные DFT-расчеты показали, что деформации сжатия и растяжения вдоль направлений „кресло“ и „зигзаг“ решетки графена вызывает сильный сдвиг пиков поглощения диэлектрической проницаемости в видимой области спектра света.

В рамках настоящей работы исследуется влияние одного из ключевых метрических параметров ПГ — ширины шейки — на его оптические свойства. Под шириной шейки понимается наименьшее расстояние между краями двух соседних отверстий. Объектом исследования являются тонкие пленки ПГ с отверстиями почти круглой формы диаметром ~ 1 nm. Ранее было показано, что пленки ПГ с такой формой отверстий обладают высокой механической стабильностью [24] и изотропными упругими свойствами [25], а также характеризуется наибольшей шириной запрещенной зоны по сравнению с ПГ с отверстиями треугольной и прямоугольной форм [26], что важно для работы потенциальных широкополосных фотодетекторов на их основе.

Методы исследования

Исследование проводилось с использованием теории функционала плотности в приближении сильной связи с самосогласованным вычислением зарядов (*SCC DFTB*) [27] в программном пакете открытого доступа *DFTB+* [28]. Релаксация атомной структуры исследуемых пленок ПГ выполнялась до тех пор, пока силы, действующие на каждый атом, не становились менее 10^{-4} eV·Å^{-1}. Расчеты зонной структуры осуществлялись в приближении π-электронов. Для расчета элементов тензора комплексной оптической проводимости $\sigma_{\alpha\beta}(\Omega)$ применялась формула Кубо-Гринвуда [29], определяющая проводимость как функцию энергии фотона Ω и которая может быть записана в виде [30]:

$$\sigma_{\alpha\beta}(\Omega) = \frac{2e^2\hbar}{im_e^2 S_{cell}} \frac{1}{N_k} \times \sum_{k\in BZ}^{N_k} \sum_{m,n} \frac{\hat{P}_\alpha^{nm}(\mathbf{k}) \cdot \hat{P}_\beta^{mn}(\mathbf{k})}{E_n(\mathbf{k}) - E_m(\mathbf{k}) + \Omega + i\eta} \times \frac{f_\beta[E_n(\mathbf{k}) - \mu] - f_\beta[E_m(\mathbf{k}) - \mu]}{E_n(\mathbf{k}) - E_m(\mathbf{k})}, \quad (1)$$

где $f_\beta(x)$ — функция Ферми-Дирака, μ — химический потенциал, $\beta = 1/k_B T$ — величина, обратная тепловой энергии; S_{cell} — площадь суперячейки, $N_\mathbf{k}$ — число k-точек, используемых для обхода зоны Бриллюэна (BZ), $\hat{P}_\alpha^{nm}(\mathbf{k})$ — матричные элементы, соответствующие α-компоненте вектора оператора момента импульса; m_e и e — масса свободного электрона и заряд электрона соответственно; $E_{n/m}(\mathbf{k})$ — энергия подзон для валентной зоны/зоны проводимости; η — феноменологический параметр, характеризующий процессы рассеяния электронов. Множитель 2 в формуле (1) учитывает спиновое вырождение. Для расчета элементов матрицы импульсов $\hat{P}_\alpha^{nm}(\mathbf{k})$ проводилась замена $\hat{P}(\mathbf{k}) \to (m_e/\hbar)\nabla_\mathbf{k}\hat{H}(\mathbf{k})$, где $\hat{H}(\mathbf{k})$ — гамильтониан. Гамильтониан строился в рамках метода *SCC DFTB*. Все расчеты проводились при температуре 300 K.

Атомное и электронное строение пленок перфорированного графена

Исходная суперячейка пленки ПГ с диаметром отверстия ~ 1 nm имела размеры $2.46\,\text{nm} \times 2.55\,\text{nm}$ (по осям X и Y) и состояла из 136 атомов (рис. 1, *a*). Ширина шейки ПГ составляла 0.74 nm в направлении „зигзаг“ (ось X) и 1.01 nm в направлении „кресло“ (ось Y) гексагональной решетки. Выбранные метрические параметры соответствуют известным экспериментальным данным по синтезу ПГ [31,32]. Супер-ячейки ПГ с возрастающей шириной шейки в направлении осей X и Y (W_X и W_Y) строились на основе исходной ячейки следующим образом: 1) изменялась ширина шейки W_X от 0.74 nm до 2.22 nm с шагом $\Delta W_X = 0.24\,\text{nm}$, при этом ширина шейки W_Y оставалась равной 1.01 nm; 2) изменялась ширина шейки W_Y от 1.01 nm до 2.29 nm с шагом $\Delta W_Y = 0.42\,\text{nm}$, при этом ширина шейки W_X оставалась равной 0.74 nm (рис. 1, *b*). Всего для проведения исследований нами использовалось 10 различных

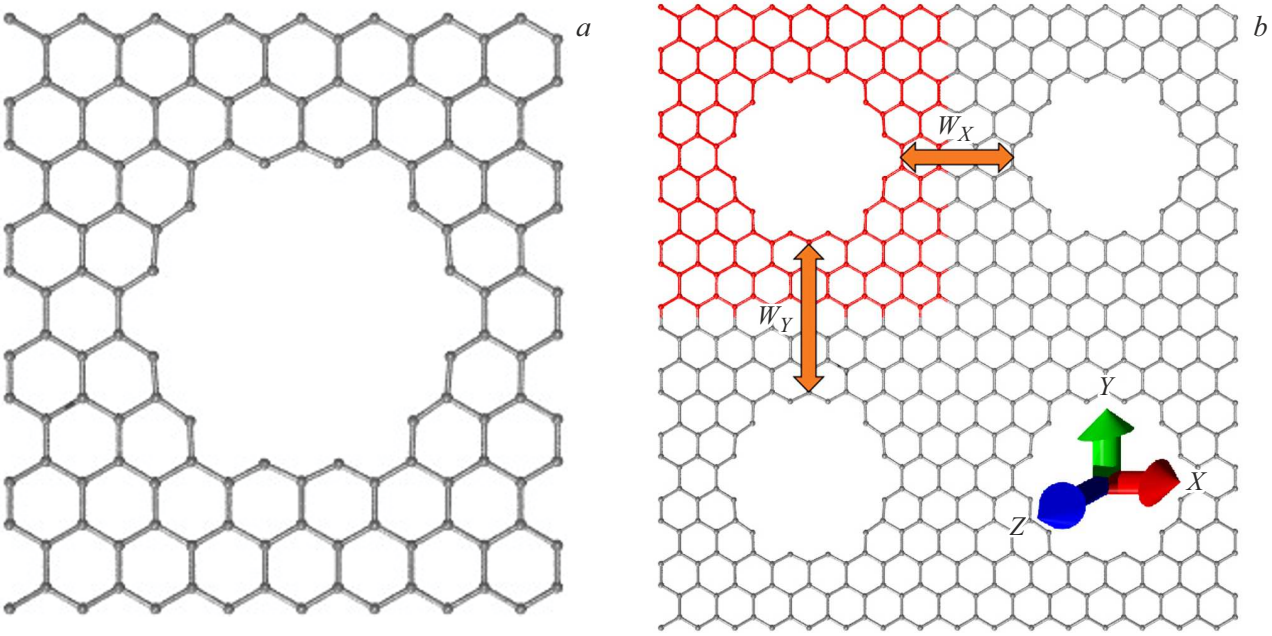


Рис. 1. Исходная суперячейка перфорированного графена (a) и его расширенный фрагмент с обозначением ширины шейки вдоль направления „зигзаг“ ($W_X = 0.74\,\text{nm}$) и вдоль направления „кресло“ ($W_Y = 1.01\,\text{nm}$) (b).

Некоторые метрические и электронно-энергетические параметры суперячеек пленок перфорированного графена

Ширина шейки		Уровень Ферми	Энергетическая
W_X, nm	W_Y, nm	E_F, eV	щель E_{gap}, eV
0.741	1.010	−4.738	0.133
0.989	1.010	−4.726	0.572
1.236	1.010	−4.727	0.057
1.484	1.010	−4.726	0.082
1.732	1.010	−4.719	0.428
1.979	1.010	−4.720	0.045
2.228	1.010	−4.719	0.061
0.741	1.438	−4.734	0.037
0.741	1.867	−4.730	0.000
0.741	2.296	−4.726	0.000

суперячеек ПГ. Для выявления энергетически выгодной атомной структуры суперячеек исследуемых пленок ПГ использовался метод сопряженных градиентов [33]. Критерием энергетически выгодной конфигурации суперячейки являлось достижение глобального минимума полной энергии (потенциальной энергии). Варьируемыми параметрами при этом выступали все координаты всех атомов и длины векторов трансляции суперячеек. Основные метрические (ширина шейки W_X и W_Y) и электронно-энергетические параметры (уровень Ферми E_F и размер энергетической щели E_{gap}) рассчитываемых суперячеек приведены в таблице.

Из данных таблицы можно проследить, как изменение ширины шейки сказывается на особенностях электронного строения тонких пленок ПГ. Видно, что положение уровня Ферми мало меняется как с ростом ширины шейки W_X ($-4.71 \div -4.73\,\text{eV}$), так и с ростом ширины шейки W_Y ($-4.72 \div -4.73\,\text{eV}$), в то время как энергетическая щель E_{gap} между валентной зоной и зоной проводимости демонстрирует высокую чувствительность к размеру ширины шейки в направлении „зигзаг“ гексагональной решетки. При значениях ширины шейки $W_X = 0.98\,\text{nm}$ и $W_X = 1.73\,\text{nm}$ пленка ПГ характеризуется самой заметной энергетической щелью, размер которой составляет $E_{gap} = 0.57\,\text{eV}$ и $E_{gap} = 0.42\,\text{eV}$ соответственно, что делает ее материалом с ярко выраженными полупроводниковыми свойствами. Энергетические зонные диаграммы для этих двух случаев представлены на рис. 2. С увеличением ширины шейки W_Y энергетическая щель исчезает.

Отметим, что для эффективного применения ПГ в оптических и оптоэлектронных устройствах, в том числе фотодетекторах и солнечных батареях, важно наличие у них энергетической щели между валентной зоной и зоной проводимости.

Оптические свойства пленок перфорированного графена с изменяющейся шириной шейки

Анализ оптических свойств исследуемых пленок ПГ с различными значениями ширины шейки проводился по результатам рассчитанных спектров действительной части оптической проводимости в диапазоне длин волн $0.2-2\,\mu\text{m}$ (диапазоны УФ-, оптического и ближнего

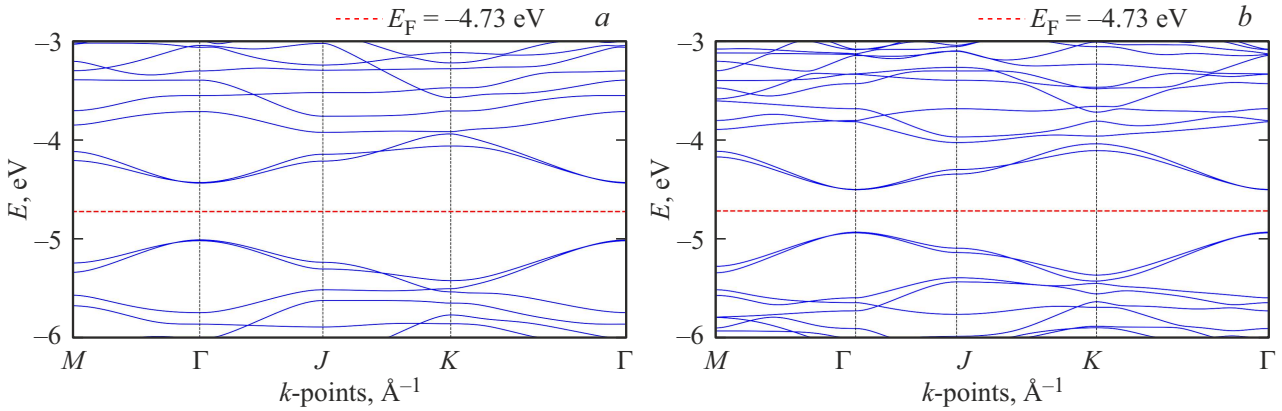


Рис. 2. Энергетические зонные диаграммы пленок перфорированного графена вблизи уровня Ферми (отмечен красной горизонтальной пунктирной линией) при значениях ширины шейки $W_X = 0.98$ nm (a) и $W_X = 1.73$ nm (b).

и коротковолнового ИК-излучения). Расчеты проводились для двух направлений поляризации света (вдоль осей X и Y). Интерес к изучению действительной части проводимости обусловлен тем, что именно она определяет способность материала к поглощению электромагнитного излучения в заданном диапазоне частот. Рассчитанные спектры действительной части оптической проводимости $\mathrm{Re}\sigma_{xx}$ и $\mathrm{Re}\sigma_{yy}$ с изменяющейся шириной шейки W_X (от 0.74 nm до 2.22 nm) и постоянной шириной шейки $W_Y = 1.01$ nm представлены на рис. 3. Видно, что в обоих рассматриваемых случаях поляризации света пик оптической проводимости наибольшей интенсивности приходится на область среднего УФ-диапазона, что также свойственно графену без перфорации [34]. В то же время высота этого пика при поляризации света вдоль оси X в 1.5 раза выше, чем вдоль оси Y, что указывает на наличие анизотропии оптической проводимости. Подтверждением анизотропии также является отсутствие характерного пика высотой порядка $2.4\pi e^2/2h$ на границе видимого и ближнего ИК-диапазонов при $W_X = 0.74$ nm в случае поляризации света вдоль оси X, который присутствует в спектре оптической проводимости при поляризации света вдоль оси Y. Эффект увеличивающейся ширины шейки W_X сказывается главным образом на картине спектра в области ИК-диапазона при поляризации света вдоль оси Y. В частности, при значениях ширины шейки $W_X = 0.98$ nm и $W_X = 1.73$ nm, для которых была достигнута наибольшая величина энергетической щели E_{gap}, в ИК-диапазоне появляется пик высотой $\sim 2\pi e^2/2h$, однако в случае $W_X = 0.98$ nm он приходится на область ближнего ИК-излучения ($\sim 1.2\,\mu$m), в то время как в случае $W_X = 1.73$ nm — на область коротковолнового ИК-излучения ($\sim 1.7\,\mu$m). Таким образом, можно отметить, что наличие заметной энергетической щели в зонной структуре пленок ПГ с увеличивающейся шириной шейки W_X и постоянной шириной шейки W_Y приводит к улучшению их способности к поглощению ИК-излучения в ближнем и коротковолновом диапазоне. При поляризации света вдоль оси X пик в ИК-диапазоне находится в самом начале области ближнего ИК-излучения и с увеличением ширины шейки W_X его положение ($1-1.1\,\mu$m), как и высота ($1.7-2\pi e^2/2h$) меняются в небольших пределах.

Рассчитанные спектры действительной части оптической проводимости $\mathrm{Re}\sigma_{xx}$ и $\mathrm{Re}\sigma_{yy}$ с изменяющейся шириной шейки W_Y (от 1.01 nm до 2.29 nm) и постоянной шириной шейки $W_X = 0.74$ nm представлены на рис. 4. Увеличение ширины шейки в направлении „кресло“ приводит к росту пика проводимости в области среднего УФ-диапазона, максимум которого наблюдается при значении $W_Y = 2.29$ nm для обоих направлений поляризации света ($5.5\pi e^2/2h$ для поляризации света вдоль оси X и $2.8\pi e^2/2h$ для поляризации света вдоль оси Y). Важно отметить, что при поляризации света вдоль оси X пик проводимости в ИК-диапазоне смещается по длинам волн из области ближнего ИК-излучения ($1.05\,\mu$m) в область коротковолнового ИК-излучения ($1.7\,\mu$m) с сохранением своей высоты ($2.1-2.2\pi e^2/2h$). В случае поляризации света вдоль оси Y пик проводимости также смещается из области ближнего ИК-излучения ($0.9\,\mu$m) в область коротковолнового ИК-излучения ($1.45\,\mu$m), но при этом наблюдается и рост высоты пика с 0.85 до $1.3\pi e^2/2h$.

Причиной наблюдаемых различий в поведении оптической проводимости с увеличением ширины шейки в направлении „зигзаг“ (W_X) и в направлении „кресло“ (W_Y) являются особенности атомного строения ПГ. Как было показано в работе [35], решетку ПГ можно рассматривать как структуру с множеством графеновых нанолент. Известно, что электронное строение нанолент с конфигурациями края „зигзаг“ и „кресло“ сильно различаются, что сказывается и на их оптических свойствах. В частности, наноленты „зигзаг“ имеют пик плотности электронных состояний, обусловленный вкладом локализированных краевых состояний, в то время как наноленты „кресло“ на уровне Ферми обладают нулевой

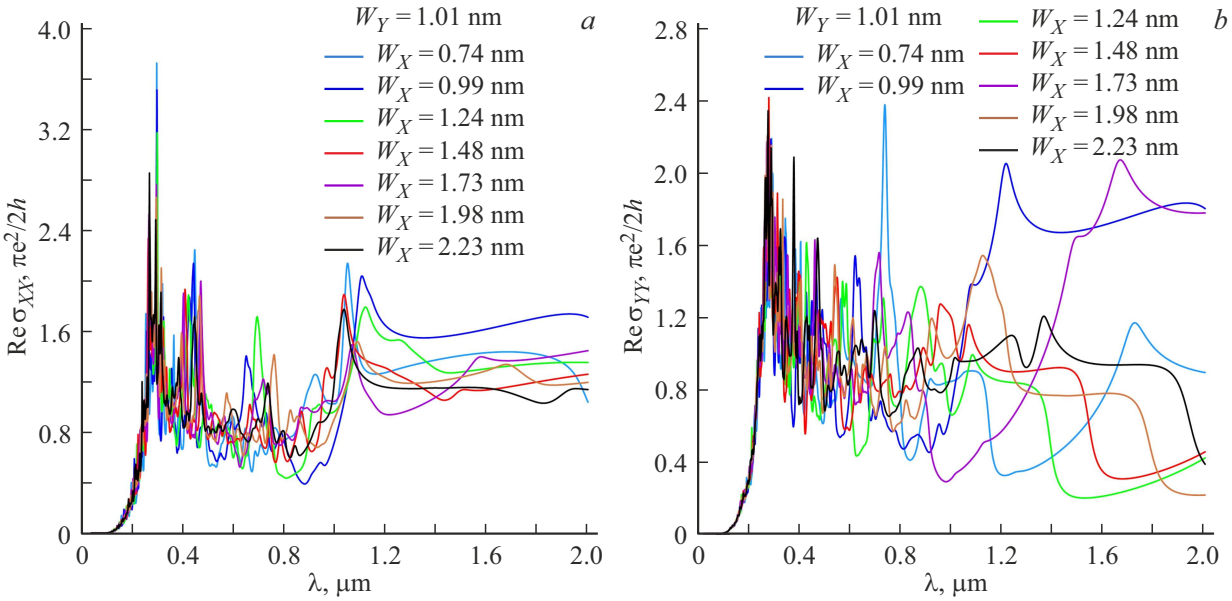


Рис. 3. Действительная часть оптической проводимости пленок перфорированного графена с увеличивающейся шириной шейки W_X (от 0.74 nm до 2.22 nm) и постоянной шириной шейки W_Y (1.01 nm) при поляризации света вдоль осей X (a) и Y (b).

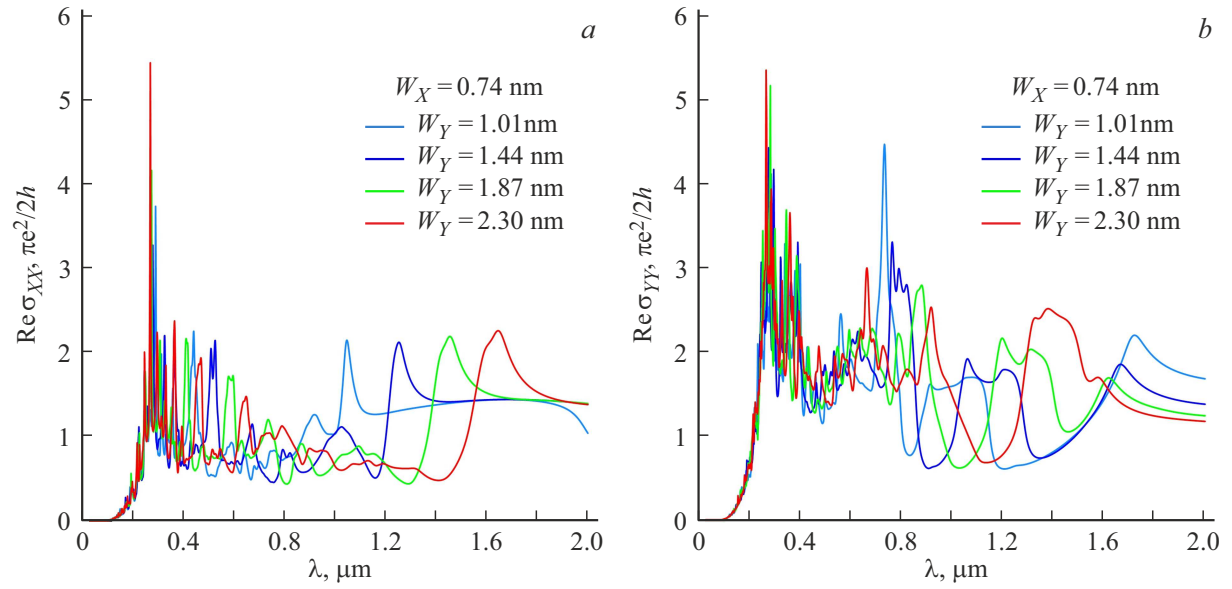


Рис. 4. Действительная часть оптической проводимости пленок перфорированного графена с увеличивающей шириной шейки W_Y (от 1.01 nm до 2.29 nm) и постоянной шириной шейки W_X (0.74 nm) при поляризации света вдоль осей X (a) и Y (b).

плотностью состояний [36]. Следовательно, увеличение ширины шейки ПГ в направлении „зигзаг“ и в направлении „кресло“ можно рассматривать как увеличение протяженности графеновых нанолент в соответствующих направлениях („зигзаг“ и „кресло“) гексагональной решетки графена. Таким образом, с учетом контролируемого изменения ширины шейки ПГ в ходе синтеза можно говорить о существовании эффективного способа управления оптической проводимостью, в частности высотой и расположением ее пиков в области УФ- и ИК-диапазонов.

Заключение

На основании проведенных *SCC DFTB*-расчетов для тонких пленок ПГ с отверстиями почти круглой формы диаметром ~ 1 nm были установлены закономерности изменения спектров действительности части оптической проводимости с увеличением ширины шейки в направлении „зигзаг“ (ось X) гексагональной решетки при сохранении постоянного значения ширины шейки в направлении „кресло“ (ось Y) и с увеличением ширины шейки в направлении „кресло“ при сохранении

постоянного значения ширины шейки в направлении „зигзаг“. Показано наличие анизотропии оптической проводимости пленок ПГ в зависимости от направления поляризации света („зигзаг“ или „кресло“). Выявлено, что появление заметной энергетической щели в зонной структуре пленок ПГ (0.57 eV и 0.43 eV) с увеличением ширины шейки в направлении „зигзаг“ приводит к улучшению их способности поглощать ИК-излучение в ближнем и коротковолновом диапазоне при поляризации света вдоль оси Y. При поляризации света вдоль оси X положение и высота пика в ИК-диапазоне меняются в небольших пределах. Увеличение ширины шейки в направлении „кресло“ приводит к росту пика проводимости в области среднего УФ-диапазона для обоих направлений поляризации света. Пик проводимости в ИК-диапазоне смещается по длинам волн из области ближнего ИК-излучения в область коротковолнового ИК-излучения также для обоих направлений поляризации света, однако в случае поляризации света вдоль оси X сохраняется высота пика, а в случае поляризации света вдоль оси Y наблюдается рост высоты пика. Выявленные закономерности управления оптической проводимостью тонких пленок ПГ с отверстиями почти круглой формы позволяют прогнозировать возможность их применения в качестве чувствительного элемента устройств детектирования ИК- и УФ-излучения. Управление высотой и расположением пиков оптической проводимости за счет подбора ширины шейки в ходе контролируемого синтеза дает определенные преимущества пленкам ПГ по сравнению с другими графеновыми материалами, в частности графеновым аэрогелем в виде пористой 3D-структуры, построенной из хаотично собранных листов восстановленного оксида графена [37], и лазерно индуцированным графеном в виде электрически связанной пористой многослойной чешуйчатой 3D-структуры [38].

Финансирование работы

Работа выполнена при поддержке гранта Российского научного фонда (проект № 25-72-00202), https://rscf.ru/project/25-72-00202/.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

[1] K.S. Novoselov, A.K. Geim, S.V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S.V. Dubonos, I.V. Grigorieva, A.A. Firsov. Science, **306**, 666 (2004). DOI: 10.1126/science.110289

[2] A.C. Neto, F. Guinea, N.M. Peres, K.S. Novoselov, A.K. Geim., Rev. Mod. Phys., **81**, 109 (2009). DOI: 10.1103/RevModPhys.81.109

[3] G. Liu, W. Jin, N. Xu. Chem. Soc. Rev., **44**, 5016 (2015). DOI: 10.1039/C4CS00423J

[4] K.S. Novoselov, A. Geim. Nat. Mater, **6**, 183 (2007). DOI: 10.1038/nmat1849

[5] K.S. Novoselov, A.K. Geim, S.V. Morozov, D. Jiang, M.I. Katsnelson, I. Grigorieva, S. Dubonos, A. Firsov. Nature, **438**, 197 (2005). DOI: 10.1038/nature04233

[6] B. Liu, K. Zhou. Prog. Mater. Sci., **100**, 99 (2019). DOI: 10.1016/j.pmatsci.2018.09.004

[7] H. Terrones, R. Lv., M. Terrones, M.S. Dresselhaus. Rep. Prog. Phys., **75** (2012). DOI: 10.1088/0034-4885/75/6/062501

[8] A.R. Botello-Méndez, A. Lherbier, J.C. Charlier. Solid State Commun., **175** (2013). DOI: 10.1016/j.ssc.2013.08.029

[9] R. Ma, Y. Zhou, H. Bi, M. Yang, J. Wang, Q. Liu, F. Huang. Prog. Mater. Sci., **113**, 100665 (2020). DOI: 10.1016/j.pmatsci.2020.100665

[10] T. Liu, L. Zhang, B. Cheng, X. Hu, J. Yu. Cell Rep. Phys. Sci., **1**, 100215 (2020). DOI: 10.1016/j.xcrp.2020.100215

[11] Y. Lin, Y. Liao, Z. Chen, J.W. Connell. Mater. Res. Lett., **5**, 209 (2017). DOI: 10.1080/21663831.2016.1271047

[12] C. Gomez-Navarro, J.C. Meyer, R.S. Sundaram, A. Chuvilin, S. Kurasch, M. Burghard, K. Kern, U. Kaiser. Nano Lett., **10**, 1144 (2010). DOI: 10.1021/nl9031617

[13] D. Singh, V. Shukla, R. Ahuja. Phys. Rev. B, **102**, 075444 (2020). DOI: 10.1103/PhysRevB.102.075444

[14] A. Zhang, H.F. Teoh, Z. Dai, Y.P. Feng, C. Zhang. Appl. Phys. Lett., **98**, 023105 (2011). DOI: 10.1063/1.3536517

[15] V.H. Nguyen, M.C. Nguyen, H.-V. Nguyen, P. Dollfus. J. Appl. Phys., **113**, 013702 (2013). DOI: 10.1063/1.4772609

[16] J. Bai, X. Zhong, S. Jiang, Y. Huang, X. Duan. Nat. Nanotechnol., **5**, 190 (2010). DOI: 10.1038/nnano.2010.8

[17] M. Kim, N.S. Safron, E. Han, M.S. Arnold, P. Gopalan. Nano Lett., **10**, 1125 (2010). DOI: 10.1021/nl9032318

[18] K.A. Sammed, L. Pan, M. Asif, M. Usman, T. Cong, F. Amjad, M.A. Imran, Sci. Rep., **10**, 2315 (2020). DOI: 10.1038/s41598-020-58162-9

[19] Z. Chena, Y. Zhanga, Y. Yang, X. Shia, L. Zhanga, G. Jia. Sens. Actuators B Chem., **336**, 129721 (2021). DOI: 10.1002/cssc.201501169

[20] T.G. Pedersen, C. Flindt, J. Pedersen, N.A. Mortensen, A.-P. Jauho, K. Pedersen. Phys. Rev. Lett., **100**, 136804 (2008). DOI: 10.1103/PhysRevLett.100.136804

[21] B. Sakkaki, H.R. Saghai, G. Darvish, M. Khatir. Opt. Mater., **122**, 111707 (2021). DOI: 10.1016/j.optmat.2021.111707

[22] L.A. Chernozatonskii, A.A. Artyukh, A.G. Kvashnin, D.G. Kvashnin. ACS Appl. Mater. Interfaces, **12**, 55189 (2020). DOI: 10.1021/acsami.0c17060

[23] O.V. Sedelnikova, S.G. Stolyarova, A.L. Chuvilin, A.V. Okotrub, L.G. Bulusheva. Appl. Phys. Lett., **114**, 091901 (2019). DOI: 10.1063/1.5080617

[24] A. Winter, Y. Ekinci, A. Gölzhäuser, A. Turchanin. 2D Materials., **6**, 021002 (2019). DOI: 10.10588/203-1583/ab0014

[25] C. Carpenter, A.M. Christmann, L. Hu, I. Fampiou, A.R. Muniz, A. Ramasubramaniam, D. Maroudas. Appl. Phys. Lett., **104** (14), 141911 (2014). DOI: 10.1063/1.4871304

[26] G. Tang, Z. Zhang, X. Deng, Z. Fan, Y. Zeng, J. Zhou. Carbon, **76**, 348 (2014). DOI: 10.1016/j.carbon.2014.04.086

[27] M. Elstner, D. Porezag, G. Jungnickel, J. Elsner, M. Haugk, Th. Frauenheim, S. Suhai, G. Seifert. Phys. Rev. B, **58**, 7260 (1998). DOI: 10.1103/PhysRevB.58.7260

[28] B. Aradi, B. Hourahine, Th. Frauenheim. J. Phys. Chem. A, **111**, 5678 (2007). DOI: 10.1021/jp070186p

[29] M.P. Marder. *Condensed Matter Physics*, 2th ed. (Wiley, New York, 2011).

[30] H.A. Le, S.T. Ho, D.C. Nguyen, V.N. Do. J. Phys. Condens Matter, **26**, 405304e1-10 (2014). DOI: 10.1088/0953-8984/26/40/405304
[31] M.K. Rabchinskii, S.D. Saveliev, D.Yu. Stolyarova, M. Brzhezinskaya, D.A. Kirilenko, M.V. Baidakova, S.A. Ryzhkov, V.V. Shnitov, V.V. Sysoev, P.N. Brunkov. Carbon, **182**, 593 (2021). DOI: 10.1016/j.carbon.2021.06.057
[32] M.K. Rabchinskii, V.V. Shnitov, A.T. Dideikin, A.E. Aleksenskii, S.P. Vul', M.V. Baidakova, I.I. Pronin, D.A. Kirilenko, P.N. Brunkov, J. Weise, S.L. Molodtsov. J. Phys Chem C, **120**, 28261 (2016). DOI: 10.1021/acs.jpcc.6b08758
[33] F. Jensen. *Introduction to computational chemistry*, 2nd ed. (Wiley, New York, 2007).
[34] K.F. Maka, L. Ju, F. Wang, T.F. Heinz. Solid State Commun., **152**, 1341 (2012). DOI: 10.1016/j.ssc.2012.04.064
[35] V.H. Nguyen, F. Mazzamuto, J. Saint-Martin, A. Bournel, P. Dollfus. Nanotechnology, **23**, 065201 (2012). DOI: 10.1088/0957-4484/23/6/065201
[36] Y. Kobayashi, K. Kusakabe, K. Fukui, T. Enoki. Physica E: Low-dim. Syst. Nanostruct., **34**, 678 (2006). DOI: 10.1016/j.physe.2006.03.058
[37] Y. Xie, M. Han, R. Wang, H. Zobeiri, X. Deng, P. Zhang, X. Wang. ACS Nano, **13** (5), 5385 (2019). DOI: 10.1021/acsnano.9b00031
[38] Y.P. Suhorukov, A.V. Telegin, K.G. Mikheev, R.G. Zonov, L.I. Naumova, G.M. Mikheev. Opt. Mater., **133**, 112957 (2022). DOI: 10.1016/j.optmat.2022.112957