

08

Влияние деформаций растяжения и сжатия на электропроводные свойства графен-нанотрубных композитов с топологией островкового типа

© М.М. Слепченков, П.В. Барков, О.Е. Глухова

Саратовский национальный исследовательский государственный университет им. Н.Г. Чернышевского,
410012 Саратов, Россия
e-mail: slepchenkovm@mail.ru

Поступило в Редакцию 17 января 2023 г.

В окончательной редакции 17 января 2023 г.

Принято к публикации 17 января 2023 г.

В рамках теории функционала плотности в приближении сильной связи с самосогласованным вычислением заряда проведено исследование особенностей атомного строения и электропроводных свойств гибридной графен-нанотрубной пленки с островковой топологией при деформациях одноосного растяжения и сжатия. Гибридная пленка представляет собой композитную структуру, образованную бислойным графеном с конфигурацией слоев АВ-типа и горизонтально ориентированными хиральными одностенными углеродными нанотрубками диаметром 1.2 нм. Выявлены закономерности деформационного поведения исследуемой гибридной структуры и установлены пределы ее прочности. Показано, как при деформациях растяжения/сжатия изменяются электрическое сопротивление и вольт-амперная характеристика пленки.

Ключевые слова: графен-нанотрубные пленки островкового типа, осевое растяжение/сжатие, сопротивление, вольт-амперная характеристика.

DOI: 10.21883/JTF.2023.04.55035.5-23

Введение

Углеродные нанотрубки (УНТ) и графен на протяжении нескольких десятилетий являются наиболее интенсивно изучаемыми и востребованными представителями семейства наноуглеродных аллотропов [1,2]. В последние годы существенно возросло число фундаментальных и прикладных научных исследований, посвященных гибридным структурам, сочетающим графен и УНТ [3–9]. Графен-нанотрубные гибридные структуры классифицируют по характерным особенностям их атомного строения. В частности, различают гибридные структуры с высоким содержанием УНТ и гибридные структуры с высоким содержанием графена [10]. В гибридных структурах с высоким содержанием УНТ небольшие по размеру листы графена прикреплены к внешним стенкам УНТ. Такие конфигурации графен-нанотрубных гибридов могут служить электрокатализатором восстановления кислорода [11]. Гибридные структуры с высоким содержанием графена подразделяются на два класса: 1) гибриды, в которых УНТ горизонтально ориентированы по отношению к графену [12–14]; 2) гибриды, в которых УНТ вертикально ориентированы по отношению к графену [15–17]. Гибридные структуры с горизонтально ориентированными УНТ являются перспективным материалом для гибкой электроники и полностью углеродных транзисторов [3], в то время как гибридные структуры с вертикально ориентированными УНТ перспективны для хранения водорода, создания электродов

суперконденсаторов, а также в качестве материалов теплового интерфейса [15–17].

Наиболее распространены на практике гибридные структуры с горизонтально ориентированными УНТ. Принимая во внимание различные типы хиральности УНТ и разный характер связи (ковалентный или посредством сил Ван-дер-Ваальса) между графеном и УНТ в составе гибрида, можно говорить о множестве топологических конфигураций гибридных графен–УНТ структур. В связи с этим особую ценность приобретают исследования методами компьютерными моделирования, позволяющие прогнозировать, какие конфигурации гибридной структуры характеризуются более выгодными свойствами [18–23]. Наиболее обсуждаемым вопросом в научной литературе последних лет является квантовый транспорт в гибридных структурах графен–УНТ с горизонтально ориентированными нанотрубками. Рассматривались как ковалентно связанные [18,19], так и удерживаемые силами Ван-дер-Ваальса графен–УНТ структуры [20,21]. Выявлены закономерности транспортных свойств графен–УНТ структур в зависимости от типа проводимости УНТ [18], расстояния между УНТ [19] и расстояния между графеном и УНТ [20], ширины и формы края графеновой наноленты [21].

В то же время в отмеченных выше работах при построении топологических моделей графен–УНТ гибридных структур использовались нехиральные одностенные углеродные нанотрубки (ОУНТ), тогда как большинство синтезируемых ОУНТ являются хиральными трубками диаметром ~ 1.2 нм [24]. Кроме того, при синтезе

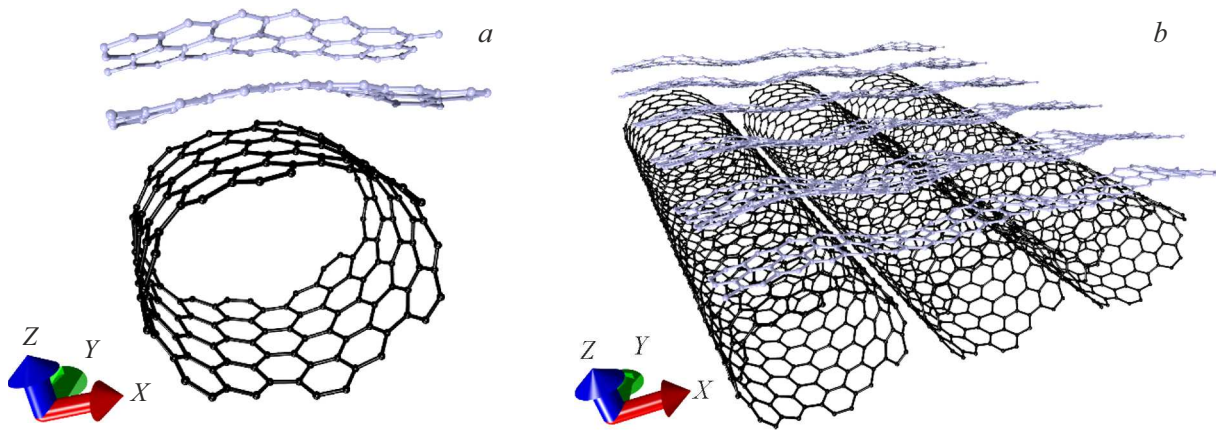


Рис. 1. Атомная структура гибридной пленки бислойный графен–ОУНТ (12,6) с островковой топологией: *a* — суперячейка; *b* — расширенный фрагмент.

графен–УНТ гибридов с горизонтально ориентированными нанотрубками не редко получают структуры с участками повышенной плотности атомов углерода, где УНТ и графен заходят внахлест друг на друга [25,26]. В связи с этим в настоящей работе рассматривается гибридная графен–нанотрубная структура с хиральными ОУНТ (12,6) субнанометрового диаметра и бислойным графеном, которые формируют локальные „островки“ с повышенным содержанием углерода. Целью настоящей работы является прогностическое исследование поведения такой структуры под действием деформации растяжения/сжатия и анализ изменений ее электропроводных свойств.

1. Методы исследования

Расчеты атомной конфигурации и энергетических параметров исследуемой графен-нанотрубной гибридной структуры проводились в рамках метода функционала плотности в схеме сильной связи с самосогласованным вычислением заряда SCC-DFTB, реализованного в программном пакете DFTB+ 20.2 [27]. В модели SCC-DFTB используется валентное приближение, согласно которому наибольший вклад в полную энергию системы вносят валентные орбитали, описываемые в рамках базиса орбиталей слейтеровского типа с параметрами Слэтера–Костера $rcs-0-3$ [27]. Приближение сильной связи включается в модель функционала плотности DFT с помощью теории возмущений. Распределение электронной плотности заряда по атомам и соответственно избыточного/недостаточного заряда на атомах, определяется из анализа заселенностей по схеме Малликена [28].

Статическая электропроводность G и вольт-амперная характеристика (ВАХ) исследуемой структуры рассчитывались в рамках формализма

Ландауэра–Буттикера [29] по формуле вида

$$G = \frac{I}{V} = \frac{2e^2}{h} \int_{-\infty}^{\infty} T(E) F_T(E - E_F) dE, \quad (1)$$

где $T(E)$ — функция пропускания электронов, F_T — функция теплового уширения энергетических уровней, E_F — энергия Ферми материала электродов, к которым подсоединен исследуемый объект, e — заряд электрона, h — постоянная Планка, $2e^2/h$ — удвоенное для учета спина значение кванта проводимости. Функция пропускания электронов $T(E)$ определяется выражением

$$T(E) = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \text{Tr}(\Gamma_S(E) G_C^A(E) \Gamma_D(E) G_C^R(E)), \quad (2)$$

где $G_C^A(E)$, $G_C^R(E)$ — опережающая и запаздывающая матрицы Грина, описывающие контакт с электродами, $\Gamma_S(E)$, $\Gamma_D(E)$ — матрицы уширения уровней для истока и стока. Все расчеты выполнялись при температуре 300 К.

2. Результаты и дискуссия

Исследования проводились для суперячейки гибридной графен-нанотрубной пленки островкового типа, образованной бислойной графеновой нанолентой zigzag шириной 2 гексагона (0.5 nm) с типом упаковки слоев АВ и ОУНТ с индексами хиральности (12,6). Бислойная графеновая нанолента располагалась над поверхностью УНТ перпендикулярно ее оси, формируя в составе гибридной структуры так называемые „островки“ повышенной плотности углерода. На рис. 1 показаны суперячейка гибридной пленки бислойный графен–ОУНТ (12,6) и ее расширенный фрагмент, полученный путем многократной трансляции в двух направлениях (вдоль осей X и Y). Величина сдвига между слоями графена вдоль оси Y (вдоль оси нанотрубки) составила 0.48 nm,

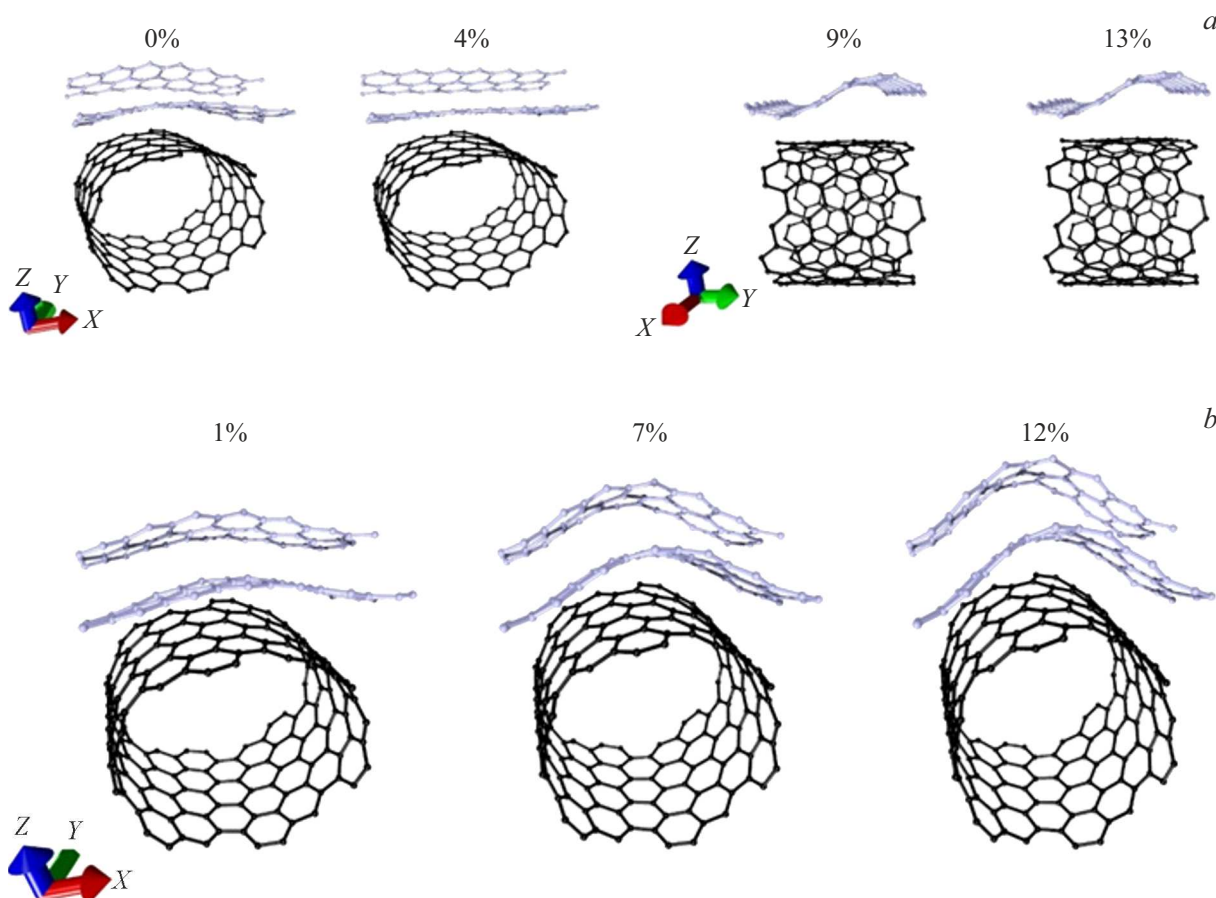


Рис. 2. Изменения атомного строения гибридной пленки бислоиный графен–ОУНТ (12,6) при деформации вдоль оси X : a — растяжение; b — сжатие.

а расстояние между ними вдоль оси Z (перпендикулярно оси нанотрубки) — 0.34 nm . Векторы трансляции суперъячейки по осям X и Y составляют $L_x = 1.71 \text{ nm}$ и $L_y = 1.13 \text{ nm}$. Термодинамическая стабильность построенной суперъячейки оценивалась по величине энтальпии формирования, которая рассчитывалась согласно следующей формуле:

$$\Delta H_f = (E_{\text{film}} - E_{\text{gr}} - E_{\text{tube}})/N, \quad (3)$$

где E_{film} — энергия гибридной пленки бислоиный графен–ОУНТ (12,6), E_{gr} — энергия бислоиного графена, E_{tube} — энергия нанотрубки (12,6), N — количество атомов в суперъячейке. Атомная структура суперъячейки гибридной графен-нанотрубной пленки конфигурировалась таким образом, чтобы ее суммарная энергия по абсолютной величине была меньше, чем для отдельных ее составляющих. Рассчитанная величина ΔH_f составила -0.17 eV/at , следовательно, рассматриваемая атомная конфигурация суперъячейки является энергетически устойчивой.

Перейдем к изучению влияния деформации осевого растяжения/сжатия на атомное строение и электропроводные свойства исследуемой графен-нанотрубной пленки. В ходе проводимых численных экспериментов рас-

сматривалось растяжение/сжатие суперъячейки вдоль оси X , т.е. вдоль направления zigzag бислоиного графена. Такой вариант приложения деформации обусловлен двумя причинами: 1) бислоиный графен и нанотрубка (12,6) в составе суперъячейки гибридной структуры не связаны ковалентными связями, а взаимодействуют посредством сил Ван-дер-Ваальса; 2) бислоиный графен в составе суперъячейки имеет форму наноленты. На каждом шаге деформации длина вектора трансляции L_x суперъячейки изменялась на 1% (увеличивалась в случае растяжения и уменьшалась в случае сжатия). Затем проводилась оптимизация атомной структуры суперъячейки путем минимизации ее полной энергии по координатам всех атомов. Рис. 2 демонстрирует изменения атомного строения гибридной пленки бислоиный графен–ОУНТ (12,6) с увеличением деформации растяжения (рис. 2, a) и сжатия (рис. 2, b). Из рис. 2, a видно, что по мере растяжения пленки сначала наблюдается тенденция к распрямлению графенового бислоя, а при растяжении на 9% его атомная сетка трансформируется из плоской в волнообразную с двумя полуволнами, т.е. происходит переход структуры в новое фазовое состояние. Подобные изменения можно объяснить малой шириной графеновой наноленты в составе суперъячейки, а также

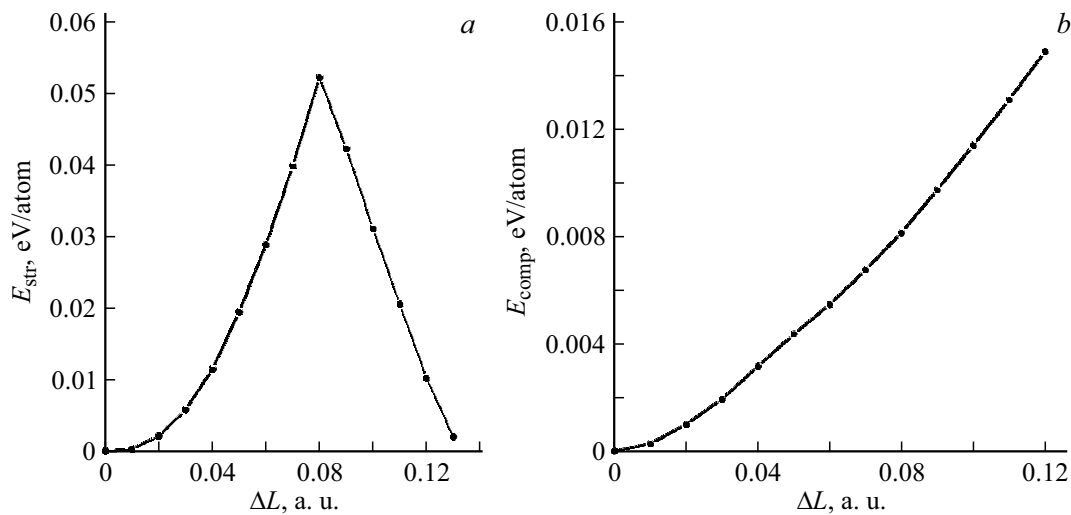


Рис. 3. Графики энергии деформации гибридной пленки бислоиный графен–ОУНТ (12,6) при растяжении (а) и сжатии (b). Величина деформации по оси X приведена в относительных единицах ΔL .

тем, что при такой величине деформации расстояние между деформированными слоями графена вдоль оси Y становится достаточным для образования ковалентных связей. По мере сжатия, как видно из рис. 2, b , графеновый бислой принимает форму дуги с равномерно увеличивающейся амплитудой на каждом шаге деформации, а нанотрубка принимает форму вытянутого эллипсоида. При этом исследуемая структура демонстрирует почти одинаковые пределы прочности в обоих случаях деформации: разрушение ковалентных связей атомной сетки наступает при растяжении на 14% и при сжатии на 13%.

На рис. 3 представлены графики изменения энергии деформации растяжения E_{str} (рис. 3, a) и сжатия E_{com} (рис. 3, b) по мере изменения длины вектора трансляции ΔL суперъчейки гибридной пленки вдоль оси X (в относительных единицах). Энергия деформации рассчитывалась как разность значений полной энергии структуры до и после растяжения/сжатия, деленная на число атомов в суперъчейке. Из графика на рис. 3, a видно, что вплоть до случая растяжения на 8% наблюдается возрастание функции $E_{str}(\Delta L)$ по квадратичному закону, характерное для упругой деформации. При растяжении на 9% и более квадратичный рост $E_{str}(\Delta L)$ сменяется убыванием, что говорит о переходе упругой деформации в пластическую. Это объясняет описанную выше трансформацию атомной структуры гибридной графен-нанотрубной пленки из плоской в волнообразную. Зависимость $E_{com}(\Delta L)$, представленная на рис. 3, b , демонстрирует близкий к квадратичному рост энергии деформации по мере сжатия, что свидетельствует об упругой деформации гибридной пленки графен–ОУНТ (12,6) в этом случае.

Для оценки влияния осевой деформации на электропроводные свойства гибридной пленки бислоиный графен–ОУНТ (12,6) рассчитывались электрическое сопротивление и ВАХ. Графики на рис. 4 показывают,

как изменяется сопротивление пленки по мере растяжения (рис. 4, a) и сжатия (рис. 4, b). Из рис. 4, a видно, что трансформация плоской структуры графенового бислоя в волнообразную при растяжении на 9% вызывает увеличение сопротивления пленки в 40 раз ($\sim 236 \text{ k}\Omega$) по сравнению со значением в отсутствие деформации ($\sim 7.5 \text{ k}\Omega$). В интервале растяжения 1–7% значение сопротивления мало изменяется (~ 6.8 – $\sim 7.2 \text{ k}\Omega$) по сравнению с исходным значением для недеформированной структуры. Довольно стабильно себя ведет сопротивление при осевом сжатии. Из графика на рис. 4, b можно увидеть, что в исследуемом интервале деформации значение сопротивления изменяется в диапазоне ~ 7.5 – $\sim 6.9 \text{ k}\Omega$. Выявленные особенности поведения электрического сопротивления гибридной пленки при осевом растяжении/сжатии объясняются закономерностями изменения уровня Ферми в каждом из рассмотренных случаев деформации. При растяжении на 1–7% уровень Ферми пленки меняется в незначительных пределах (-4.97 – -4.90 eV), в то время как после трансформации атомной сетки графенового бислоя из плоской в волнообразную уровень Ферми сразу смещается вверх по оси энергий на 0.2 eV , что свидетельствует о перестройке электронной структуры материала. В частности, при растяжении на 9% в зонной структуре гибридной пленки появляется энергетическая щель величиной 0.004 eV . Установившееся положение уровня Ферми гибридной пленки (-4.70 eV) является близким к уровню Ферми обычного листа графена (-4.67 eV). Рассчитанное сопротивление волнообразного графенового бислоя составляет $\sim 236 \text{ k}\Omega$, что подтверждает определяющее влияние графенового бислоя на электропроводные свойства гибридной пленки бислоиный графен–ОУНТ (12,6). При сжатии уровень Ферми гибридной пленки практически не изменяется, оставаясь в пределах -4.88 – -4.87 eV . Энергетическая

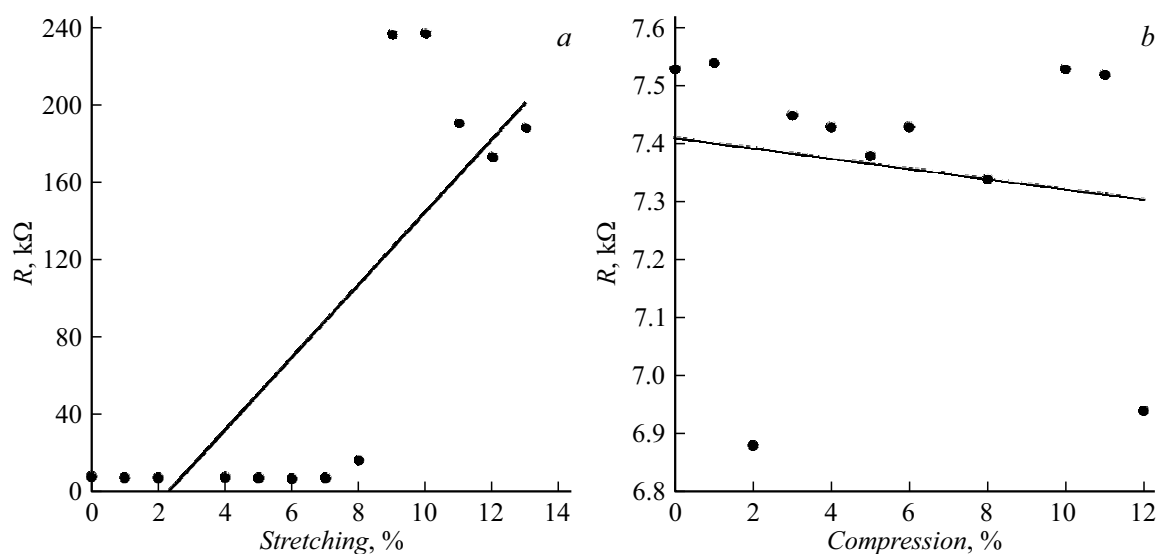


Рис. 4. Изменение электрического сопротивления гибридной пленки бислоиный графен–ОУНТ (12,6) с островковой топологией при осевых деформациях: *a* — растяжение; *b* — сжатие.

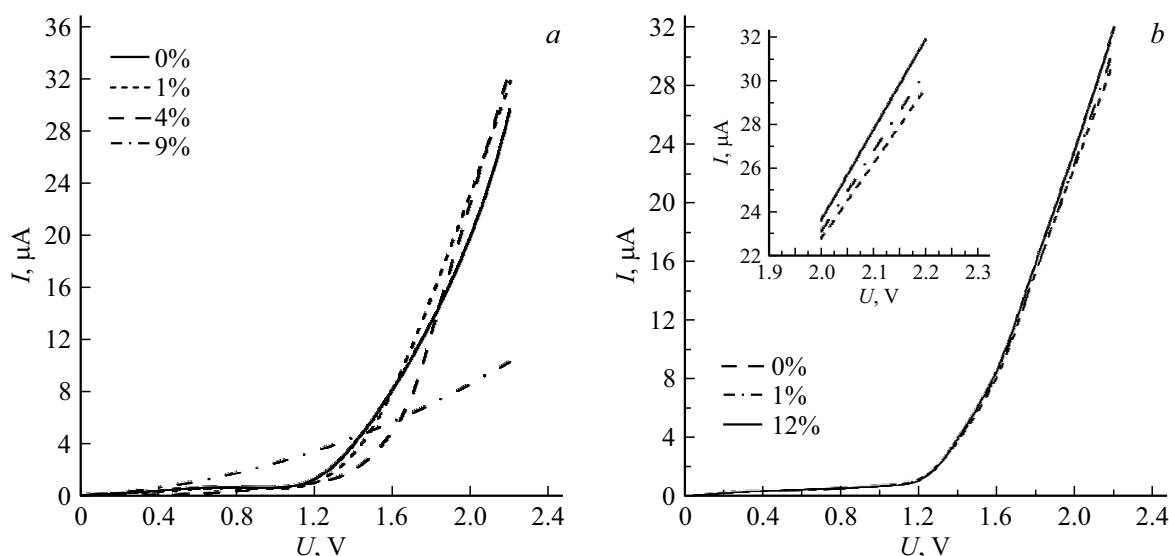


Рис. 5. ВАХ гибридной пленки бислоиный графен–ОУНТ (12,6) с островковой топологией для различных случаев осевых деформаций: *a* — растяжение; *b* — сжатие.

щель между валентной зоной и зоной проводимости в этом случае отсутствует, как и для недеформированной структуры гибридной пленки бислоиный графен–ОУНТ (12,6).

На рис. 5 представлены рассчитанные ВАХ при растяжении (рис. 5, *a*) и сжатии (рис. 5, *b*) гибридной пленки бислоиный графен–ОУНТ (12,6) на различное число процентов. Выявленные закономерности изменения атомного строения пленки при осевом растяжении/сжатии отражаются и на поведении ВАХ. Рис. 5, *a* наглядно демонстрирует, что при растяжении на 1 и 4% крутизна ВАХ и максимальное значение тока при напряжении 2.2 V мало изменяются по сравнению со

значениями для недеформированной пленки, как было выше установлено и для сопротивления. При переходе гибридной пленки в новое фазовое состояние с волнообразной атомной сеткой графенового бислоя (растяжение на 9%) происходит снижение и крутизны ВАХ, и максимума тока (примерно в 4 раза). Напротив, равномерное увеличение амплитуды дуги графенового бислоя по мере сжатия и незначительные изменения сопротивления при этом приводят к стабильному поведению ВАХ на рис. 5, *b*. В целом можно отметить, что электропроводные свойства исследуемой гибридной пленки бислоиный графен–ОУНТ (12,6) с островковой топологией малочувствительны к осевому сжатию.

Заключение

Таким образом, в работе впервые проведено исследование деформационного поведения гибридных пленок бислойный графен–ОУНТ (12,6) с островковой топологией при осевом растяжении/сжатии и выявлены закономерности изменения их электропроводных свойств под действием деформации обоих видов. Показано, что в случае осевого растяжения на 9% происходит переход гибридной пленки в новое фазовое состояние с волнообразной структурой графенового бислоя. Этот переход сопровождается появлением энергетической щели в электронном строении, увеличением в десятки раз сопротивления и снижением в несколько раз крутизны ВАХ. При осевом сжатии значения сопротивления и тока мало изменяются по сравнению со значениями для недеформированной пленки. По значениям тока гибридные пленки бислойный графен–ОУНТ (12,6) превосходят различные структурные модификации графена, в частности, гибридные пленки на основе графена и органических молекул на 2 порядка [30] и графеновые наноленты на 3 порядка [31]. На основе полученных результатов можно прогнозировать, что подобные графен-нанотрубные пленки с островковой топологией могут быть перспективны для последующего применения в устройствах гибкой и растяжимой электроники, в частности, в качестве проводящих электродов.

Финансирование работы

Работы по изучению деформационного поведения графен-нанотрубных пленок выполнены в рамках гранта Президента РФ для молодых кандидатов наук (проект МК-2289.2021.1.2). Работы по изучению электропроводных характеристик графен-нанотрубных пленок выполнены в рамках гранта государственного задания Минобрнауки РФ (проект FSRR-2023-0008).

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] S. Rathinavel, K. Priyadharshini, D. Panda. *Mater. Sci. Eng. B*, **268**, 115095 (2021). DOI: 10.1016/j.mseb.2021.115095
- [2] F. Zhang, K. Yang, G. Liu, Y. Chen, M. Wang, S. Li, R. Li. *Compos. Part A Appl. Sci. Manuf.*, **160**, 107051 (2022). DOI: 10.1016/j.compositesa.2022.107051
- [3] B. Cai, H. Yin, T. Huo, J. Ma, Z. Di, M. Li, N. Hu, Z. Yang, Y. Zhang, Y. Su. *J. Mater. Chem. C*, **8** (10), 3386 (2020). DOI: 10.1039/C9TC06586E
- [4] Y. Han, Y. Jiang, C. Gao. *ACS Appl. Mater. Interfaces*, **7** (15), 8147 (2015). DOI: 10.1021/acsami.5b00986
- [5] Y. Li, Q. Ai, L. Mao, J. Guo, T. Gong, Y. Lin, G. Wu, W. Huang, X. Zhang. *Sci. Rep.*, **11**, 21006 (2021). DOI: 10.1038/s41598-021-00307-5
- [6] W. Du, Z. Ahmed, Q. Wang, C. Yu, Z. Feng, G. Li, M. Zhang, C. Zhou, R. Senegor, C.Y. Yang. *2D Mater.*, **6** (4), 042005 (2019). DOI: 10.1088/2053-1583/ab41d3
- [7] S. Lepak-Kuc, K.Z. Milowska, S. Boncel, M. Szybowicz, A. Dychalska, I. Jozwik, K.K. Koziol, M. Jakubowska, A. Lekawa-Raus. *ACS Appl. Mater. Interfaces*, **11** (36), 33207 (2019). DOI: 10.1021/acsami.9b08198
- [8] H. Kim, J. Kim, H.S. Jeong, H. Kim, H. Lee, J.M. Ha, S.M. Choi, T.H. Kim, Y.C. Nah, T.J. Shin, J. Bang, S.K. Satijag, J. Koo. *Chem. Commun.*, **54** (41), 5229 (2018). DOI: 10.1039/C8CC02148A
- [9] K. Yousefi, *J. Environ. Treat. Tech.*, **9** (1), 224 (2021). DOI: 10.47277/JETT/9(1)232
- [10] R.T. Lv, E. Cruz-Silva, M. Terrones. *ACS Nano*, **8** (5), 4061 (2014). DOI: 10.1021/nn502426c
- [11] J. Zhou, Y. Zheng, D. Chen. *Nanomaterials*, **12** (4), 620 (2022). DOI: 10.3390/nano12040620
- [12] L. Cai, X. Xue, M. Liu, H. Li, X. Zhou, G. Yu. *APL Mater.*, **9** (4), 041110 (2021). DOI: 10.1063/5.0045100
- [13] B. Abreu, M. Rocha, M. Nunes, C. Freire, E.F. Marques. *J. Mater. Sci.*, **56**, 19512 (2021). DOI: 10.1007/s10853-021-06463-3
- [14] T. Xu, D. Yang, Z. Fan, X. Li, Y. Liu, C. Guo, M. Zhang, Z.-Z. Yu. *Carbon*, **152** (134) (2019). DOI: 10.1016/j.carbon.2019.06.005
- [15] A. Abdollahi, A. Abnavi, S. Ghasemi, S. Mohajezadeh, Z. Sanace. *Electrochim. Acta*, **320**, 134598 (2019). DOI: 10.1016/j.electacta.2019.134598
- [16] Y. Li, Z. Li, L. Lei, T. Lan, Y. Li, P. Li, X. Lin, R. Liu, Z. Huang, X. Fen, Y. Ma. *Flat. Chem.*, **15**, 100091 (2019). DOI: 10.1016/j.flatc.2019.100091
- [17] Y. Zhou, W. Qian, W. Huang, B. Liu, H. Lin, C. Dong. *Nanomaterials*, **9** (10), 1450 (2019). DOI: 10.3390/nano9101450
- [18] Б.Ю. Валеев, А.Н. Токсумаков, Д.Г. Квашнин, Л.А. Чернозатонский. *Письма в ЖЭТФ*, **115** (2), 103 (2022). [B.Yu. Valeev, A.N. Toksumakov, D.G. Kvashnin, L.A. Chernozatonskii. *JETP Lett.*, **115** (2), 93 (2022). DOI: 10.1134/S0021364022020114]
- [19] О.Е. Глухова, М.М. Слепченков, В.В. Митрофанов, П.В. Барков. *ФТП*, **53** (12), 1686 (2019). [O.E. Glukhova, M.M. Slepchenkov, V.V. Mitrofanov, P.V. Barkov, *Semiconductors*, **53** (12), 1677 (2019). DOI: 10.1134/S1063782619160097]
- [20] J. Srivastava, A. Gaur. *J. Chem. Phys.*, **155** (24), 244104 (2021). DOI: 10.1063/5.0077099
- [21] A.B. Felix, M. Pacheco, P. Orellana, A. Latgé. *Nanomaterials*, **12** (19), 3475 (2022). DOI: 10.3390/nano12193475
- [22] J. Srivastava, A. Gaur. *Nanoscale Adv.*, **3** (7), 2030 (2021). DOI: 10.1039/D0NA00881H
- [23] E.F. Sheka, L.A. Chernozatonskii. *J. Comput. Theor. Nanosci.*, **7** (9), 1814 (2010). DOI: 10.1166/jctn.2010.1546.
- [24] S. Zhang, L. Tong, J. Zhang. *Natl. Sci. Rev.*, **5** (3), 310 (2018). DOI: 10.1093/nsr/nwx080
- [25] E. Zhou, J. Xi, Y. Guo, Y. Liu, Z. Xu, L. Peng, W. Gao, J. Ying, Z. Chen, C. Gao. *Carbon*, **133**, 316 (2018). DOI: 10.1016/j.carbon.2018.03.023
- [26] J. Kuang, Z. Dai, L. Liu, Z. Yang, M. Jin, Z. Zhang. *Nanoscale*, **7** (20), 9252 (2015). DOI: 10.1039/C5NR00841G

- [27] B. Hourahine, B. Aradi, V. Blum, F. Bonafé, A. Buccheri, C. Camacho, C. Cevallos, M.Y. Deshayé, T. Dumitrică, A. Dominguez, S. Ehlert, M. Elstner, T. van der Heide, J. Hermann, S. Irle, J.J. Kranz, C. Köhler, T. Kowalczyk, T. Kubař, I.S. Lee, V. Lutsker, R.J. Maurer, S.K. Min, I. Mitchell, C. Negre, T.A. Niehaus, A.M.N. Niklasson, A.J. Page, A. Pecchia, G. Penazzi, M.P. Persson, J. Řezáč, C.G. Sanchez, M. Sternberg, M. Stöhr, F. Stuckenberg, A. Tkatchenko, V.W.Z. Yu, T. Frauenheim. *J. Chem. Phys.*, **152** (12), 124101 (2020). DOI: 10.1063/1.5143190
- [28] R.S. Mulliken. *J. Chem. Phys.*, **23**, 1833 (1955). DOI: 10.1063/1.1740588
- [29] S. Datta. *Quantum Transport: Atom to Transistor* (Cambridge University Press, NY, 2005), p. 285–308.
- [30] J. Liu, Q. Liang, R. Zhao, S. Lei, W. Hu. *Mater. Chem. Front.*, **4** (2), 354 (2020). DOI: 10.1039/C9QM00517J
- [31] O. Braun, J. Overbeck, M.E. Abbassi, S. Kaser, R. Furrer, A. Olziersky, A. Flasby, G.B. Barin, R. Darawish, K. Mullen, P. Ruffieux, R. Fasel, I. Shorubalko, M.L. Perrin, M. Calame. *Carbon*, **184**, 331 (2021). DOI: 10.1016/j.carbon.2021.08.001