

08

## Электрофизические свойства тонких пленок перфорированного графена, функционализированного карбонильными группами

© П.В. Барков,<sup>1</sup> М.М. Слепченков,<sup>1</sup> О.Е. Глухова<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Саратовский национальный исследовательский государственный университет им. Н.Г. Чернышевского, 410012 Саратов, Россия

<sup>2</sup> Первый Московский государственный медицинский университет им. И.М. Сеченова, 119435 Москва, Россия  
e-mail: barkovssu@mail.ru

Поступило в Редакцию 24 января 2024 г.

В окончательной редакции 24 января 2024 г.

Принято к публикации 24 января 2024 г.

В рамках теории функционала плотности в приближении сильной связи проведено исследование влияния карбонильных групп на электрофизические свойства тонких пленок перфорированного графена с почти круглыми отверстиями диаметром 1.2 nm с шириной шейки, изменяющей в диапазоне 0.7–2 nm. Присоединение функциональных групп осуществлялось на атомы по краям отверстия на основе анализа карты распределений парциальных зарядов по Малликену. Установлено явление перетекания заряда с карбонильных групп на перфорированный графен в процессе их взаимодействия. Выявлены закономерности изменения удельной электропроводности исследуемых пленок с увеличением ширины шейки в направлении „зигзаг“ и в направлении „кресло“ гексагональной решетки графена. Показано, что удельная электропроводность изменяется скачкообразно с увеличением ширины шейки вдоль направления „зигзаг“ и демонстрирует близкий к линейному рост с увеличением ширины шейки вдоль направления „кресло“. Обнаружено наличие анизотропии электропроводности в пленках перфорированного графена при выборе направления квантового транспорта электронов.

**Ключевые слова:** удельная электропроводность, теория функционала плотности в приближении сильной связи, ширина шейки, парциальный заряд, анизотропия.

### Введение

В настоящее время объектом многих теоретических и экспериментальных исследований является новая структурная производная графена, называемая перфорированным графеном [1–7]. Он представляет собой монослой графена с наноразмерными отверстиями, расположенными как регулярно, так и нерегулярно, на некотором расстоянии друг от друга (от  $\sim 1$  nm до нескольких  $\mu$ m). Тонкие пленки перфорированного графена являются полупроводниками с возможностью регулирования шириной запрещенной зоны за счет контроля периодичности и формы отверстий [8]. Выделяют сразу несколько топологических типов структур перфорированного графена: с почти круглыми, треугольными, прямоугольными отверстиями [9–13] и отверстиями произвольной формы [14–17]. Наиболее часто синтезируются пленки перфорированного графена с круглыми отверстиями и отверстиями произвольной формы. В работе [9] с помощью детального исследования методом функционала плотности (DFT) было показано, что пленки перфорированного графена с круглыми отверстиями характеризуются наибольшей энергетической щелью по сравнению с пленками перфорированного графена, отверстия которого имеют треугольную и прямоугольную формы. К числу достоинств пленок перфорированного графена с круглыми отверстиями относится установ-

ленная ранее высокая механическая стабильность [18] и изотропные упругие свойства [19]. Кроме того, на основе структур перфорированного графена с круглыми отверстиями можно выращивать нанотрубки различной хиральности [20,21]. Так, ранее было показано, что в отверстиях круглой формы размером  $\sim 0.8$ – $1.2$  nm энергетически выгоден процесс роста одностенных углеродных нанотрубок (ОУНТ) (6,6) и (9,9) [22,23].

Благодаря своим уникальным свойствам перфорированный графен находит широкое применение в различных прикладных областях. На основе структур перфорированного графена уже изготавливаются полевые транзисторы, обеспечивая ток почти в 100 раз больше по сравнению с аналогичными устройствами на основе графеновых нанолент [24]. Перфорированный графен является перспективным материалом для изготовления электродов суперконденсаторов и ионно-литиевых батарей, поскольку наличие отверстий способствует свободному проникновению ионов лития внутрь электрода [25–27]. Пористая структура перфорированного графена позволяет его использовать в качестве высокоэффективных мембран для разделения различных газов в составе смесей [28] и для очищения воды [29–31]. Кроме уже перечисленных достоинств, перфорированный графен обладает некоторыми уникальными физическими и химическими свойствами, которые ему обеспечивает модификация краевых атомов отверстий посредством

присоединения к ним различных функциональных групп, таких как карбоксильные группы  $\text{COOH}$ , аминные группы  $\text{NH}_2$ , гидроксильные группы  $\text{OH}$ , а также присоединением атомов кислорода, водорода и других. Модификация краев отверстий приводит к значительному расширению спектра функциональных применений перфорированного графена, в связи с чем подобная модификация и называется функционализацией.

Целью настоящей работы является выявление закономерностей влияния функционализации карбонильными ( $\text{C}=\text{O}$ ) группами на электрофизические свойства тонких пленок перфорированного графена с почти круглыми отверстиями диаметром 1.2 нм с позиции анализа перспектив потенциального использования таких пленок в качестве чувствительного элемента сенсоров. Объектами исследования являются пленки перфорированного графена с почти круглыми отверстиями диаметром 1.2 нм и шириной шейки, изменяющейся в диапазоне 0.7–2 нм.

## 1. Методы исследования

Исследование проводилось в рамках метода функционала плотности в приближении сильной связи с самосогласованным вычислением зарядов (SCC DFTB) [32] с помощью программного пакета DFTB+ [33,34]. Используемый метод и программный пакет ранее прошли широкую апробацию в ходе изучения особенностей атомного строения, электронных и электрофизических свойств углеродных наноматериалов различной топологии [35]. Выбор метода SCC DFTB также обусловлен многоатомностью рассчитываемых суперъячеек, которые содержат несколько сотен атомов. Расчеты электрофизических характеристик исследуемых пленок выполнялись в полном базисе ( $s$ - и  $p$ -электронных орбиталей). Поиск равновесной атомной конфигурации суперъячеек тонких пленок в рамках оптимизации осуществлялся до тех пор, пока значения межатомных сил не становились менее  $10^{-4} \text{ eV} \cdot \text{\AA}^{-1}$ . При оптимизации атомной структуры суперъячеек проводилось разбиение обратного пространства по схеме Монкхорста–Пака [36] с использованием сетки  $k$ -точек размером  $4 \times 4 \times 1$ .

Электропроводность исследуемых структур рассчитывалась в рамках формализма Ландауэра–Буттикера [37] по формуле вида

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

где  $T(E)$  — усредненная функция пропускания электронов,  $E_F$  — уровень Ферми электродов,  $e^2/h$  — квант проводимости,  $F_T$  — функция теплового уширения энергетических уровней, определяемая как

$$F_T = \frac{1}{4k_B T} \operatorname{sech}^2\left(\frac{E - E_F}{2k_B T}\right). \quad (2)$$

Коэффициент 2 перед интегралом учитывает спин. Функция пропускания электронов  $T(E, k)$  определяется выражением вида

$$T(E, k) = \operatorname{Tr}(\Gamma_S(E, k) G_C^A(E, k) \Gamma_D(E, k) G_C^R(E, k)), \quad (3)$$

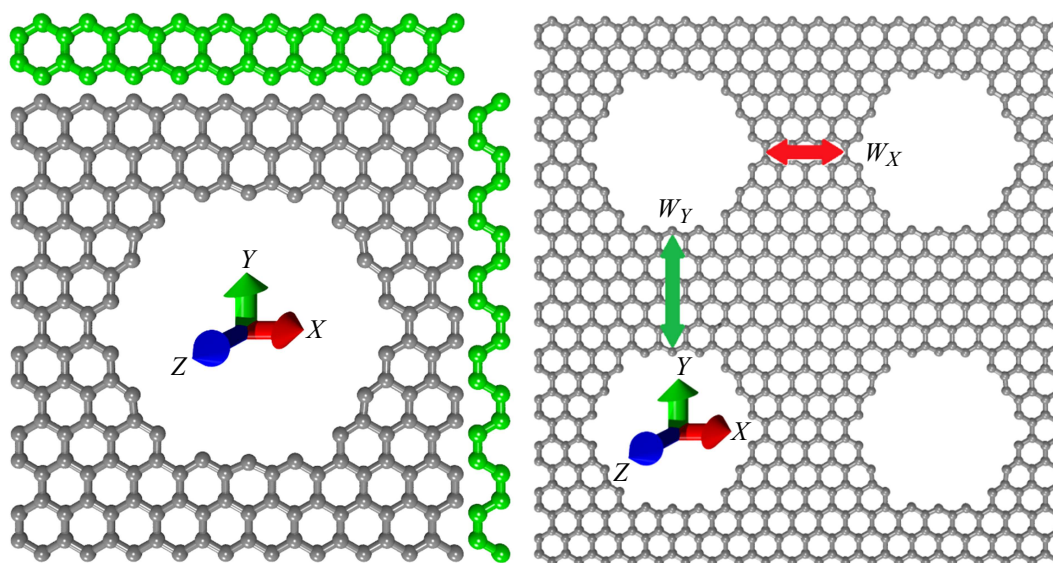
где  $G_C^A(E, k)$  и  $G_C^R(E, k)$  — опережающая и запаздывающая матрицы Грина, описывающие взаимодействие моделируемой системы с электродами, а  $\Gamma_S(E, k)$  и  $\Gamma_D(E, k)$  — матрицы расширения электронных состояний электродов истока и стока. Все расчеты проводились при  $T = 300 \text{ K}$ .

## 2. Атомная структура суперъячеек пленок перфорированного графена

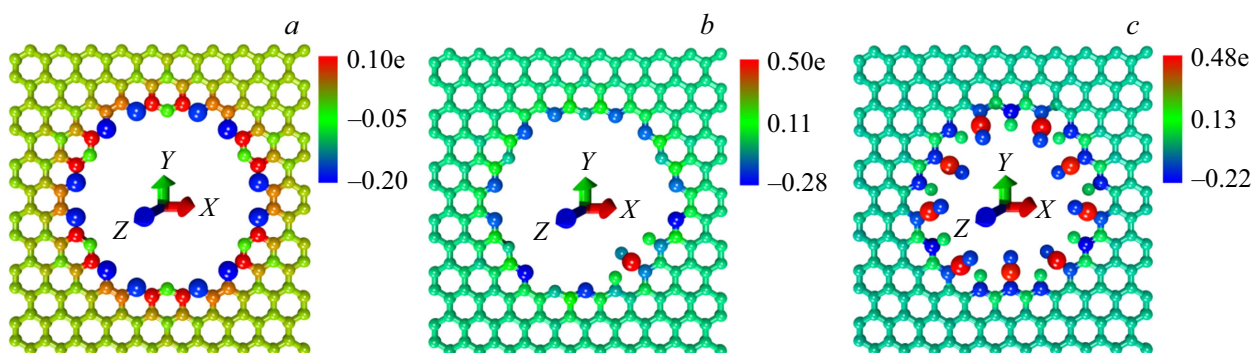
Исходная суперъячейка пленки перфорированного графена имела размеры  $2.46 \times 2.55 \text{ nm}$  (по осям  $X$  и  $Y$ ) и насчитывала 186 атомов углерода (рис. 1, *a*). Диаметр почти круглого отверстия в центре суперъячейки  $\sim 1.2 \text{ nm}$ . Минимальное расстояние между двумя соседними отверстиями в периодической структуре пленки, называемое шириной шейки, составляло  $0.74 \text{ nm}$  в направлении „зигзаг“ (оси  $X$ ) и  $0.99 \text{ nm}$  в направлении „кресло“ (ось  $Y$ ). Выбор указанных метрических параметров проводился с учетом экспериментальных данных по синтезу перфорированного графена, согласно которым наиболее часто синтезируемые структуры перфорированного графена имеют диаметр отверстия в диапазоне 1–5 нм [38] и ширину шейки 0.6–1.2 нм [39]. Для установления взаимосвязи между особенностями атомного строения и электрофизическими свойствами исследуемого наноматериала был необходим определенный набор статистических расчетных данных, в связи с чем было построено 10 суперъячеек пленок перфорированного графена, различающихся шириной шейки вдоль направления „зигзаг“ ( $W_X$ ) и вдоль направления „кресло“ ( $W_Y$ ) (рис. 1, *b*). Суперъячейки строились по следующему принципу: 1) изменялась ширина шейки  $W_X$  от 0.74 до 2.22 нм с шагом  $\Delta W_X = 0.24 \text{ nm}$ , при этом ширина шейки  $W_Y$  оставалась равной 0.99 нм; 2) изменялась ширина шейки  $W_Y$  от 0.99 до 2.27 нм с шагом  $\Delta W_Y = 0.42 \text{ nm}$ , при этом ширина шейки  $W_X$  оставалась равной 0.74 нм.

## 3. Пошаговая функционализация пленок перфорированного графена карбонильными группами

Моделирование процесса пошаговой функционализации пленок перфорированного графена группами  $\text{C}=\text{O}$  проводилось с помощью оригинального алгоритма присоединения функциональных групп на краевые атомы отверстия [40]. Присоединение проводилось именно по краям отверстия, поскольку в этой области присутствуют ненасыщенные углеродные связи, а значит, краевые атомы обладают большей реактивностью. Выбор



**Рис. 1.** Суперячейка перфорированного графена с минимально-возможным шагом увеличения ширины шейки в направлениях „зигзаг“ ( $\Delta W_X$ ) и „кресло“ ( $\Delta W_Y$ ) (a); ширина шейки вдоль направления „зигзаг“ ( $W_X$ ) и вдоль направления „кресло“ ( $W_Y$ ) (b).

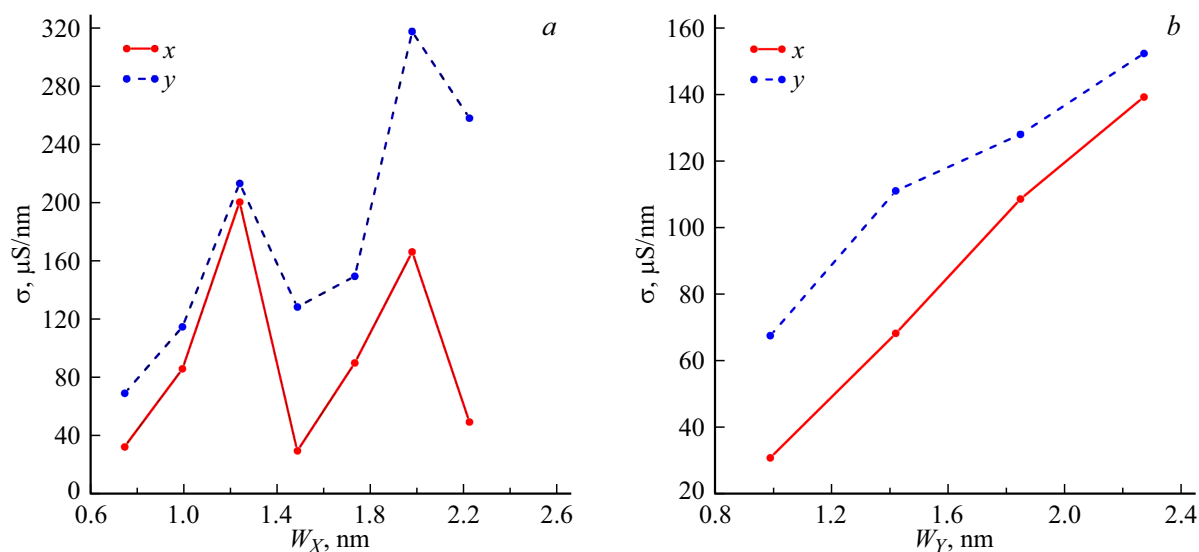


**Рис. 2.** Карты распределений парциальных зарядов по Малликену для атомов суперячейки перфорированного графена в ходе пошаговой функционализации С=О-группами: в отсутствие С=О-групп (a); с одной С=О-группой (b); с девятью С=О-группами (c). Цветная шкала показывает величину парциального заряда.

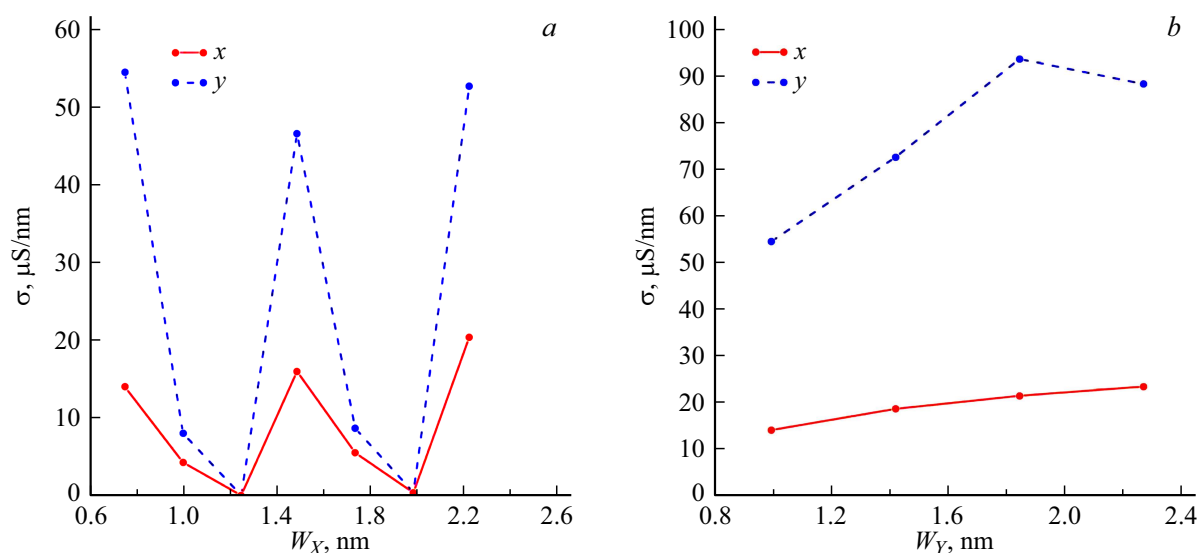
места присоединения каждой следующей С=О-группы осуществлялся исходя из анализа распределения электронной плотности по атомам суперячейки перфорированного графена. Известно, что именно атомы с наибольшей величиной избыточного заряда выступают в качестве активных центров при формировании ковалентных связей с абсорбирующими химическими соединениями. Поэтому на каждом шаге функционализации С=О-группа присоединялась к атому с наибольшим избыточным отрицательным зарядом. Для присоединения первой функциональной группы рассчитывалась карта распределений парциальных зарядов по Малликену для атомов исходной суперячейки (рис. 2, a), по которой определялся крайовой атом отверстия с наибольшей величиной избыточного заряда. Для того чтобы избежать образования ненужных ковалентных связей между С=О-группой и углеродными атомами, являющимися ближайшими соседями атома, на который села функциональная

группа, эти соседние атомы насыщались атомами водорода. После этого выполнялся поиск равновесной атомной конфигурации суперячейки путем варьирования координат всех атомов суперячейки, а затем рассчитывалась новая карта парциальных зарядов по Малликену (рис. 2, b). Далее, согласно описанному выше алгоритму, осуществлялось пошаговое присоединение следующих С=О-групп. Полное насыщение крайевых атомов отверстия рассматриваемой суперячейки перфорированного графена достигнуто при присоединении девяти С=О-групп. Картина распределения парциального заряда для этого случая показана на рис. 2, c. Анализ рассчитанных распределений показал, что присоединяемые С=О-группы отдают заряд атомам перфорированного графена, причем суммарная величина отданного заряда составила 2.51 e.

В ходе проведения пошаговой функционализации перфорированного графена важно было убедиться в том,



**Рис. 3.** Графики зависимости удельной электропроводности перфорированного графена, функционализированного карбонильными группами, от ширины шейки при ее увеличении вдоль направления „зигзаг“ (a) и „кресло“ (b).



**Рис. 4.** Графики зависимости удельной электропроводности нефункциализированного перфорированного графена от ширины шейки при ее увеличении вдоль направления „зигзаг“ (a) и „кресло“ (b).

что процесс присоединения каждой следующей С=О-группы является выгодным по энергии, а значит, исследуемый объект сохраняет свою структурную стабильность. В связи с этим на каждом шаге функционализации рассчитывалась величина энергии формирования  $\Delta H_f$  с использованием следующей формулы:

$$\Delta H_f = E_{G+n\text{C=O}+m\text{H}} - E_G - E_{n\text{C=O}} - E_{m\text{H}}, \quad (4)$$

где  $E_{G+n\text{C=O}+m\text{H}}$  — энергия суперъчейки перфорированного графена с посаженными группами С=О ( $n$  — число С=О-групп) и присоединенными атомами водорода ( $m$  — число посаженных атомов водорода),  $E_G$  — энергия перфорированного графена в отсутствие функциональных групп,  $E_{n\text{C=O}}$  — энергия С=О-групп,  $E_{m\text{H}}$  —

атомов водорода. Согласно расчетным данным,  $\Delta H_f$  на разных этапах функционализации принимает значения в интервале от  $-1.6$  до  $-12.8$  eV. Отрицательные значения величины  $\Delta H_f$  свидетельствуют об энергетической устойчивости рассматриваемой конфигурации атомной структуры.

#### 4. Электрофизические свойства пленок перфорированного графена с карбонильными группами

Влияние карбонильных групп на электрофизические свойства пленок перфорированного графена оценивалось по величине удельной электропроводности. Расчет

электропроводности проводился для двух направлений квантового транспорта электронов в исследуемых пленках: вдоль направления „зигзаг“ (ось  $X$ ) и вдоль направления „кресло“ (ось  $Y$ ) гексагональной решетки графена. Рассчитанные для двух направлений транспорта электронов значения удельной электропроводности  $\sigma$  пленок перфорированного графена с полностью насыщенными  $C=O$ -группами атомами по краям отверстия приведены на рис. 3 для различных значений ширины шейки  $W_X$  и  $W_Y$ . Для сравнения на рис. 4 показаны зависимости удельной электропроводности  $\sigma$  от ширины шейки ( $W_X$  и  $W_Y$ ) для пленок нефункционализированного перфорированного графена. Анализ графиков на рис. 3,  $a$  показывает, с увеличением ширины шейки вдоль направления „зигзаг“ гексагональной решетки графена удельная электропроводность меняется скачкообразно в обоих направлениях транспорта электронов. Шаг скачков равен трем, т. е. при значениях ширины шейки  $W_X = 1.23$  и  $1.97$  nm наблюдаются максимальные значения удельной электропроводности. Для одних и тех же значений ширины шейки удельная электропроводность при токопереносе вдоль направления „кресло“ больше, чем вдоль направления „зигзаг“, причем с ростом  $W_X$  различия в значениях  $\sigma$  достигают 2–3 раз. Из рис. 3,  $b$  следует, что с увеличением ширины шейки вдоль направления „кресло“ удельная электропроводность изменяется не скачком, а демонстрирует рост, близкий к линейному, в обоих направлениях транспорта электронов. В направлении „кресло“ значения  $\sigma$  больше, чем в направлении „зигзаг“, причем при значениях  $W_Y = 0.99$  и  $1.42$  nm разница составляет 2 раза, а при  $W_Y = 2.22$  nm — 0.93 раза. В целом можно говорить о наличии анизотропии электропроводности в пленках перфорированного графена, функционализированного карбонильными группами. Сравнивая графики удельной электропроводности на рис. 3 и 4, можно прийти к следующим заключениям:

1) Анизотропия электропроводности перфорированного графена свойственна и функционализированному, и нефункционализированному перфорированному графену.

2) Скачкообразное поведение величины  $\sigma$  с увеличением ширины шейки  $W_X$  имеет место независимо от того, функционализирован ли перфорированный графен  $C=O$ -группами, или нет. В то же время при присоединении карбонильных групп меняется порядок чередования максимумов и минимумов величины  $\sigma$ .

3) Закономерности изменения величины  $\sigma$  с увеличением ширины шейки  $W_Y$  нефункционализированного и функционализированного перфорированного графена схожи. При этом разница в значениях  $\sigma$  между направлениями транспорта электронов в присутствии  $C=O$ -групп становится меньше.

4) Функционализация  $C=O$ -группами приводит к увеличению удельной электропроводности перфорированного графена в несколько раз по сравнению с исходной нефункционализированной конфигурацией.

Отмеченные выше изменения электропроводности перфорированного графена при присоединении  $C=O$ -

Значения уровня Ферми пленки перфорированного графена (ПГ), функционализированного группами  $C=O$

Этапы функционализации перфорированного графена	$E_F$ , eV
0: нефункционализированный перфорированный графен	-5.25
1: ПГ + 1C=O + 2H	-5.04
2: ПГ + 2C=O + 4H	-4.98
3: ПГ + 3C=O + 4H	-4.91
4: ПГ + 4C=O + 5H	-4.68
5: ПГ + 5C=O + 7H	-4.46
6: ПГ + 6C=O + 7H	-4.40
7: ПГ + 7C=O + 8H	-4.26
8: ПГ + 8C=O + 9H	-4.12
9: ПГ + 9C=O + 9H	-4.06

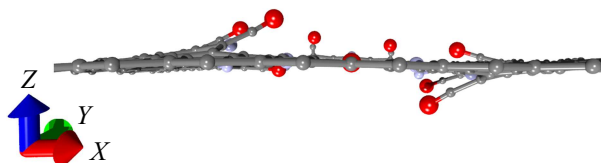


Рис. 5. Суперъядейка пленки перфорированного графена, функционализированного девятью  $C=O$ -группами (вид сбоку).

групп на атомы по краям отверстия могут быть объяснены следующими причинами:

1) Пленки перфорированного графена получают заряд от функциональных групп, что приводит к изменению положения уровня Ферми, в чем можно наглядно убедиться из данных таблицы. Поскольку основной вклад в функцию пропускания электронов вносят электронные состояния именно вблизи уровня Ферми  $E_F$ , его смещение более чем на 1 eV в сторону зоны проводимости приводит к заметным изменениям электропроводности.

2) В результате оптимизации атомной структуры суперъядейки перфорированного графена после присоединения  $C=O$ -групп меняется положение краевых атомов отверстия в базальной плоскости. Как видно из рис. 5, углеродные атомы по краям отверстия, к которым присоединяются функциональные группы, располагаются уже не в базальной плоскости, а, либо над ней, либо под ней, что свидетельствует об изменении валентных и двухгранных углов между соответствующими  $C-C$ -связями.

## Заключение

Таким образом, на основании результатов SCC DFTB расчетов были установлены следующие закономерности. Функционализация атомов по краям отверстия перфорированного графена  $C=O$ -группами приводит к перерас-



пределению электронного заряда в системе „перфорированный графен + группы С=О“, в результате которого на углеродные атомы графена переходит ощутимая часть заряда с функциональных групп. За счет принятого заряда в электронном строении перфорированного графена происходят заметные изменения, выраженные смещением уровня Ферми в направлении зоны проводимости более, чем на 1 eV. Функционализированному С=О-группами перфорированному графену свойственно скачкообразное изменение удельной электропроводности при увеличении ширины шейки в направлении „зигзаг“ гексагональной решетки графена, характерное и для нефункционализированного графена. В то же время за счет описываемых выше изменений электронного строения перфорированного графена и искажения его гексагональной решетки вблизи отверстия при присоединении функциональных групп меняется порядок чередования минимумов и максимумов удельной электропроводности. Анизотропия электропроводности присуща и нефункционализированному, и функционализированному перфорированному графену. Можно предположить, что функционализированные карбонильными группами пленки перфорированного графена будут являться перспективным материалом для изготовления высокочувствительных сенсоров.

### Финансирование работы

Работа выполнена при поддержке гранта Российского научного фонда (проект № 23-72-01122, <https://rscf.ru/project/23-72-01122/>).

### Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

### Список литературы

- [1] Y. Lin, Y. Liao, Zh. Chen, J.W. Connell. *Mater. Res. Lett.*, **5**, 209 (2017). DOI: 10.1080/21663831.2016.1271047
- [2] J. Bai, X. Zhong, S. Jiang, X. Duan. *Nature Nanotechnol.*, **5**, 190 (2010). DOI: 10.1038/nnano.2010.8
- [3] M. Kim, N.S. Safron, E. Han, M.S. Arnold, P. Gopalan. *Nano Lett.*, **10**, 1125 (2010). DOI: 10.1021/nl9032318
- [4] T.H. Han, Y.-K. Huang, A.T.L. Tan, V.P. Dravid, J. Huang. *J. American Chem. Society*, **133**, 15264 (2011). DOI: 10.1021/ja205693t
- [5] X. Zhao, C.M. Hayner, M.C. Kung, H.H. Kung. *Adv. Energy Mater.*, **1**, 1079 (2011). DOI: 10.1002/aenm.201100426
- [6] X. Han, M.R. Funk, F. Shen, Y.-C. Chen, Y. Li, C.J. Campbell, J. Dai, X. Yang, J.-W. Kim, Y. Liao, J.W. Connell, V. Barone, Z. Chen, Y. Lin, L. Hu. *ACS Nano*, **8**, 8255 (2014). DOI: 10.1021/nn502635y
- [7] Y. Xu, Z. Lin, X. Zhong, X. Huang, N.O. Weiss, Y. Huang, X. Duan. *Nature Commun.*, **5**, 4554 (2014). DOI: 10.1038/ncomms5554
- [8] H. Sahin, S. Ciraci. *Phys. Rev. B*, **84**, 035452 (2011). DOI: 10.1103/PhysRevB.84.035452
- [9] G. Tang, Z. Zhang, X. Deng, Z. Fan, Y. Zeng, J. Zhou. *Carbon*, **76**, 348 (2014). DOI: 10.1016/j.carbon.2014.04.086
- [10] J. Zhang, W. Zhang, T. Ragab, C. Basaran. *Comput. Mater. Sci.*, **153**, 64 (2018). DOI: 10.1016/j.commatsci.2018.06.026
- [11] A. Kausar. *Polym.-Plast. Technol. Mater.*, **58**, 803 (2019). DOI: 10.1080/25740881.2018.1563111
- [12] M. Yarifard, J. Davoodi, H. Rafii-Tabar. *Comput. Mater. Sci.*, **111**, 247 (2016). DOI: 10.1016/j.commatsci.2015.09.033
- [13] H.X. Yang, M. Chshiev, D.W. Boukhvalov, X. Waintal, S. Roche. *Phys. Rev. B*, **84**, 214404 (2011). DOI: 10.1103/PhysRevB.84.214404
- [14] M.K. Rabchinskii, A.S. Varezchnikov, V.V. Sysoev, M.A. Solomatin, S.A. Ryzhkov, M.V. Baidakova, D.Yu. Stolyarova, V.V. Shnitov, S.S. Pavlov, D.A. Kirilenko, A.V. Shvidchenko, E.Yu. Lobanova, M.V. Gudkov, D.A. Smirnov, V.A. Kislenco, S.V. Pavlov, S.A. Kislenco, N.S. Struchkov, I.I. Bobrinetskiy, A.V. Emelianov, P. Liang, Z. Liu, P.N. Brunkov. *Carbon*, **172**, 236 (2021). DOI: 10.1016/j.carbon.2020.09.087
- [15] S.A. Ryzhkov, M.K. Rabchinskii, V.V. Shnitov, M.V. Baidakova, S.I. Pavlov, D.A. Kirilenko, P.N. Brunkov. *J. Phys. Conf. Ser.*, **1695**, 012008 (2020). DOI: 10.1088/1742-6596/1695/1/012008
- [16] 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
- [17] V.V. Shnitov, M.K. Rabchinskii, M. Brzhezinskaya, D.Yu. Stolyarova, S.V. Pavlov, M.V. Baidakova, A.V. Shvidchenko, V.A. Kislenco, S.A. Kislenco, P.N. Brunkov. *Small*, **17**, 2104316 (2021). DOI: 10.1002/smll.202104316
- [18] A. Winter, Y. Ekinici, A. Götzhäuser, A. Turchanin. *2D Materials*, **6**, 021002 (2019). DOI: 10.1088/2053-1583/ab0014
- [19] C. Carpenter, A.M. Christmann, L. Hu, I. Fampiou, A.R. Muniz, A. Ramasubramaniam, D. Maroudas. *Appl. Phys. Lett.*, **104**, 141911 (2014). DOI: 10.1063/1.4871304
- [20] J. Park, V. Prakash. *J. Appl. Phys.*, **116**, 014303 (2014). DOI: 10.1063/1.4885055
- [21] H.-J. Qian, G. Eres, S. Irlle. *Molecular Simulation*, **43**, 1269 (2017). DOI: 10.1080/08927022.2017.1328555
- [22] M.M. Slepchenkov, D.S. Shmygin, G. Zhang, O.E. Glukhova. *Carbon*, **165**, 139 (2020). DOI: 10.1016/j.carbon.2020.04.069
- [23] V.V. Shunaev, O.E. Glukhova. *Materials*, **13**, 5219 (2020). DOI: 10.3390/ma13225219
- [24] W. Shim, Y. Kwon, S. Jeon, W.-R. Yu. *Scientific Reports*, **5**, 16568 (2015). DOI: 10.1038/srep16568
- [25] Y. Lin, X. Han, C.J. Campbell, J.-W. Kim, B. Zhao, W. Luo, J. Dai, L. Hu, J.W. Connell. *Adv. Functional Mater.*, **25**, 2920 (2015). DOI: 10.1002/adfm.201500321
- [26] Y.-Y. Peng, Y.-M. Liu, J.-K. Chang, C.-H. Wu, M.-D. Ger, N.-W. Pu, C.-L. Chang. *Carbon*, **81**, 347 (2015). DOI: 10.1016/j.carbon.2014.09.067
- [27] C.-H. Yang, P.-L. Huang, X.-F. Luo, C.-H. Wang, C. Li, Y.-H. Wu, J.-K. Chang. *Chem. Sus. Chem.*, **8**, 1779 (2015). DOI: 10.1002/cssc.201500030
- [28] S.P. Koenig, L. Wang, J. Pellegrino, J.S. Bunch. *Nature Nanotechnol.*, **7**, 728 (2012). DOI: 10.1038/nnano.2012.162
- [29] D. Cohen-Tanugi, J.C. Grossman. *Nano Lett.*, **12**, 3602 (2012). DOI: 10.1021/nl3012853

- [30] S.C. O'Hern, D. Jang, S. Bose, J.-C. Idrobo, Y. Song, T. Laoui, J. Kong, R. Karnik. *Nano Lett.*, **15**, 3254 (2015). DOI: 10.1021/acs.nanolett.5b00456
- [31] S.P. Surwade, S.N. Smirnov, I.V. Vlassioug, R.R. Unocic, G.M. Veith, S. Dai, S.M. Mahurin. *Nature Nanotechnol.*, **10**, 459 (2015). DOI: 10.1038/nnano.2015.37
- [32] 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
- [33] B. Aradi, B. Hourahine, Th. Frauenheim. *J. Phys. Chem. A*, **111**, 5678 (2007). DOI: 10.1021/jp070186p
- [34] 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. Sánchez, M. Sternberg, M. Stöhr, F. Stuckenberg, A. Tkatchenko, V.W.-Z. Yu, T. Frauenheim. *J. Chem. Phys.*, **152**, 20 (2020). DOI: 10.1063/1.5143190
- [35] M. Elstner, G. Seifert. *Philos. Trans. R. Soc. A*, **372**, 20120483 (2014). DOI: 10.1098/rsta.2012.0483
- [36] H.J. Monkhorst, J.D. Pack. *Phys. Rev. B*, **13**, 5188 (1976). DOI: 10.1103/PhysRevB.13.5188
- [37] S. Datta. *Quantum Transport: Atom to Transistor* (Cambridge University Press: Cambridge, London, UK, 2005), p. 404.
- [38] 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*, **12**, 28261 (2016). DOI: 10.1021/acs.jpcc.6b08758
- [39] B. Sakkaki, H.R. Saghai, G. Darvish, M. Khatir. *Opt. Mater.*, **122**, 111707 (2021). DOI: 10.1016/j.optmat.2021.111707
- [40] O.E. Glukhova, P.V. Barkov. *Lett. Mater.*, **12**, 392 (2021). DOI: 10.22226/2410-3535-2021-4-392-396