

Оптические и оптоэлектронные свойства оксидированного борофена и ван-дер-ваальсовых гетероструктур на его основе

© М.М. Слепченков¹, Д.А. Колосов¹, О.Е. Глухова^{1,2}

¹ Саратовский национальный исследовательский государственный университет им. Н.Г. Чернышевского, 410012 Саратов, Россия

² Первый Московский государственный медицинский университет им. И.М. Сеченова, 119991 Москва, Россия

e-mail: slepchenkovm@mail.ru

Поступила в редакцию 27.12.2023 г.

В окончательной редакции 15.01.2024 г.

Принята к публикации 05.03.2024 г.

Методами *ab initio* проведен прогностический анализ возможности управления оптическими и оптоэлектронными свойствами ван-дер-ваальсовых квази-2D-гетероструктур, образованных гофрированным борофеном с треугольной кристаллической решеткой и монослоями графеноподобных нитрида галлия GaN и оксида цинка ZnO, за счет функционализации борофена кислородом. Обнаружено появление энергетической щели в зонной структуре исследуемых ван-дер-ваальсовых гетероструктур борофен/GaN и борофен/ZnO, обусловленное наличием щели между валентной зоной и зоной проводимости в электронном строении оксидированного (O-) борофена. Показано, что в случае поляризации света в направлении, перпендикулярном зигзагообразному краю атомной решетки борофена, в видимом диапазоне спектра поглощения гетероструктур на основе O-борофена и монослоев GaN/ZnO появляется пик с интенсивностью порядка 30%, в то время как у гетероструктур с чистым борофеном поглощение в видимом диапазоне составляло не более 5–10%. Выявлено, что профили спектра фототока гетероструктур O-борофен/GaN и O-борофен/ZnO имеют схожий вид со спектрами O-борофена. Прогнозируется, что гетероструктуры O-борофен/GaN и O-борофен/ZnO могут быть перспективны в качестве чувствительных элементов солнечных батарей, работающих как на поверхности Земли, так и за ее пределами.

Ключевые слова: теория функционала плотности, коэффициент поглощения, спектр фототока, поляризация света, фотовольтаика.

DOI: 10.61011/OS.2024.03.58141.33-24

Введение

Открытие графена и других 2D-материалов с уникальными физическими свойствами вызвало заметный всплеск интереса к ним со стороны специалистов в области материаловедения, физики конденсированного состояния, нано- и оптоэлектроники [1]. В настоящее время семейство 2D-материалов насчитывает довольно много представителей, в том числе 2D-углеродные материалы [2], халькогениды и дихалькогениды переходных металлов [3,4], карбиды, нитриды и карбонитриды переходных металлов (максены) [5], перовскиты [6], оксиды металлов [7], магнитные материалы и их производные [8]. Вертикальная укладка монослоев 2D-материалов с разными электронными, оптическими и магнитными свойствами позволяет создавать гетероструктуры из двух и более слоев с особыми физическими свойствами, отличающимися от свойств одиночных монослоев [9–12]. Наличие между монослоями лишь слабых сил Ван-дер-Ваальса позволяет сочетать 2D-структуры с разными параметрами решетки и типами кристаллической структуры. Для изготовления ван-дер-ваальсовых 2D-гетероструктур используют такие экспериментальные технологии, как перенос с выравниванием, механиче-

ское расслоение, жидкофазное расслоение, осаждение из газовой фазы, послойная электростатическая самосборка [13].

Разнообразие свойств ван-дер-ваальсовых 2D-гетероструктур открывает широкие возможности для разработки на их основе различного рода устройств [14–20]. В частности, ван-дер-ваальсовы гетероструктуры используются для создания вертикальных полевых транзисторов [17]. По сравнению с обычными кремниевыми транзисторами туннельные полевые транзисторы на основе вертикальных гетероструктур способны работать в режиме с низким энергопотреблением и обладают лучшей производительностью благодаря снижению контактного сопротивления [17]. Анизотропия электронных и оптических свойств 2D-материалов, а также возможность управления шириной запрещенной зоны этих материалов за счет изменения толщины позволяет реализовывать на основе ван-дер-ваальсовых гетероструктур фотодетекторы со сверхвысокой чувствительностью, сверхбыстрой скоростью отклика и высокой чувствительностью к поляризации света, особенно для фотодетекторов инфракрасного излучения [18,19]. Использование послойного антиферромагнитного упорядочения в атомарно тонком кристалле позволяет реализовать

на основе ван-дер-ваальсовых гетероструктур магнитные устройства хранения информации [20].

Экспериментальное получение борофена и последовавшее за ним интенсивное изучение его свойств создали предпосылки для дизайна ван-дер-ваальсовых гетероструктур на основе борофена. Борофен обладает многими привлекательными свойствами, в том числе прочностью и гибкостью, высокой тепло- и электропроводностью, а также оптической прозрачностью [21]. Уже экспериментально получены графен-борофеновые [22] и борофен/органические ван-дер-ваальсовы гетероструктуры [23]. Наряду с экспериментальными исследованиями ван-дер-ваальсовых гетероструктур на основе борофена активно развиваются прогностические исследования методами *ab initio*, направленные на поиск новых сочетаний борофена с другими 2D-материалами для формирования ван-дер-ваальсовых гетероструктур, перспективных в нано- и оптоэлектронике. В работе [24] на основе результатов прогностического моделирования методами сильной связи и неравновесных функций Грина предложена модель полевого транзистора на основе вертикальной гетероструктуры графен-нитрид бора-борофен. В последние несколько лет проводились *in silico* исследования перспектив применения борофеновых ван-дер-ваальсовых гетероструктур для реализации контакта металл-полупроводник с барьером Шоттки [25–27].

Объектами исследования в настоящей работе являются ван-дер-ваальсовы гетероструктуры на основе гофрированного борофена с треугольной кристаллической решеткой, обладающего металлическим типом проводимости, в сочетании с полупроводниковыми монослоями графеноподобных нитрида галлия GaN и оксида цинка ZnO. Существование этих гетероструктур ранее было нами предсказано методами *ab initio* [28]. Цель данного исследования — проанализировать на основе результатов расчетов *ab initio* возможность управления оптическими и оптоэлектронными свойствами ван-дер-ваальсовых гетероструктур борофен/GaN и борофен/ZnO за счет функционализации кислородом и оценить перспективы их применения в фотовольтаике.

Методы исследования

Исследование из первых принципов проводилось с использованием теории функционала плотности (DFT) в приближении обобщенного градиента (GGA) в формулировке Пердю, Бурке и Эрнзерхофа (PBE) [29] в программном пакете SIESTA [30]. Учет сил Ван-дер-Ваальса, действующих между слоями гетероструктуры, осуществлялся посредством применения дисперсионных поправок Grimma [31]. Оптимизация атомной структуры суперячеек ван-дер-ваальсовых гетероструктур проводилась путем минимизации полной энергии с использованием алгоритма Бройдена-Пулая [32] и базисного набора поляризационных функций DZP. Релаксация структуры проводилась до тех пор, пока изменение

силы, действующей на каждый атом, не становилось менее 0.025 eV/\AA . Для того чтобы исключить взаимное влияние слоев гетероструктуры друг на друга в непериодическом направлении (вдоль оси Z), вакуумный промежуток составлял 20 \AA . Энергия отсечки выбиралась равной 150 Ry . Разбиение зоны Бриллюэна проводилось по методу Монхорст–Пэка [33] с размером сетки k -точек $2 \times 6 \times 1$. Для решения проблемы недооценки ширины запрещенной зоны материала использовалась полуэмпирическая схема LDA/GGA+U в модификации Дударева и соавторов [34].

Коэффициент поглощения A рассчитан в рамках стационарной теории возмущений первого порядка [35]:

$$A(\omega) = \frac{\omega}{cn(\omega)} \varepsilon_2(\omega), \quad (1)$$

где $\varepsilon_2(\omega)$ — мнимая часть комплексной диэлектрической проницаемости, $n(\omega)$ — показатель преломления, c — скорость света, ω — частота электромагнитного излучения. Мнимая часть диэлектрической проницаемости $\varepsilon_2(\omega)$ определяется по формуле вида

$$\varepsilon_2(\omega) = \frac{e^2}{\pi m^2 \omega^2} \sum_{v,c} \int_{\text{BZ}} d\mathbf{k} |\langle \psi_{ck} | \hat{e}, \mathbf{p} | \psi_{vk} \rangle|^2 \times \delta(E_c(k) - E_v(k) - \hbar\omega), \quad (2)$$

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 $\psi_{(c,v),k}$ — энергии и собственные функции этих состояний. Матричный элемент электронного дипольного перехода находится между заполненным и незанятым состояниями, где \hat{e} — вектор поляризации, \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) в диапазоне длин волн $0.2\text{--}2 \mu\text{m}$. Расчет оптических характеристик исследуемых гетероструктур проводился при разбиении зоны Бриллюэна с размером сетки k -точек $114 \times 65 \times 1$.

На основании спектра поглощения рассчитывался спектр фототока. Максимальное значение фототока рассчитывается по формуле

$$I_{\text{max}} = e \int_{\omega_1}^{\omega_2} \frac{a(\omega) \text{Power}_{\text{solar}}(\omega)}{h\nu} d\omega, \quad (3)$$

где e — заряд электрона, $a(\omega)$ — коэффициент поглощения, $\text{Power}_{\text{solar}}(\omega)$ — мощность солнечного излучения, $h\nu$ — энергия кванта солнечного излучения.

Атомное и электронное строение суперячеек ван-дер-ваальсовых гетероструктур на основе оксидированного борофена

Ранее с помощью DFT-расчетов нами были получены равновесные атомные конфигурации суперячеек гетероструктур борофен/GaN и борофен/ZnO [28]. В рамках данного исследования эти конфигурации были модифицированы путем оксидирования борофена, входящего в состав обеих гетероструктур. Целью сделанной модификации являлось открытие энергетической щели в зонной структуре борофена и гетероструктур на его основе для улучшения перспектив их применения в устройствах фотовольтаики. Рассматривался случай функционализации поверхности борофена кислородом с одной стороны монослоя с образованием ковалентной связи типа „мост“, т.е. один атом кислорода связан с двумя атомами бора. В работе [36] на основе расчетов из первых принципов было показано, что такая конфигурация оксидированного борофена (О-борофен) демонстрирует появление энергетической щели величиной ~ 0.2 eV. Экспериментально также показана практическая осуществимость процедуры оксидирования борофена [37]. На рис. 1 показаны равновесные конфигурации суперячеек ван-дер-ваальсовых квази-2D-гетероструктур на основе О-борофена и графеноподобных GaN и ZnO. Векторы трансляции суперячейки гетероструктуры О-борофен/GaN вдоль осей X и Y составляют $L_x = 3.41$ Å и $L_y = 6.10$ Å соответственно, а расстояние между монослоями борофена и GaN равно 4.99 Å. Векторы трансляции суперячейки гетероструктуры О-борофен/ZnO составляют $L_x = 3.339$ Å и $L_y = 5.817$ Å, расстояние между монослоями О-борофен и ZnO равно 4.87 Å.

Для того чтобы убедиться в термодинамической устойчивости суперячеек ван-дер-ваальсовых гетероструктур О-борофен/GaN и О-борофен/ZnO при комнатной температуре, были проведены расчеты энергии связи E_b . Она оценивалась как разность между полной энергией гетероструктуры и полных энергий составляющих ее монослоев. Рассчитанные значения энергии связи E_b составили -99 meV/atom для гетероструктуры О-борофен/GaN и -192 meV/atom для гетероструктуры О-борофен/ZnO. Отрицательная величина энергии связи свидетельствует о том, что структуры являются стабильными по энергии, а значит, могут быть реализованы на практике.

Проведенные DFT-расчеты зонной структуры О-борофена подтвердили появление у него энергетической щели величиной ~ 0.22 eV, как сообщалось в работе [36]. Фрагменты рассчитанных зонных структур суперячеек ван-дер-ваальсовых гетероструктур О-борофен/GaN и О-борофен/ZnO приведены на рис. 2. Зона Бриллюэна представляла собой прямоугольник с выбранной траекторией обхода $\Gamma-X-S-Y-\Gamma-S$. Из рисунка видно,

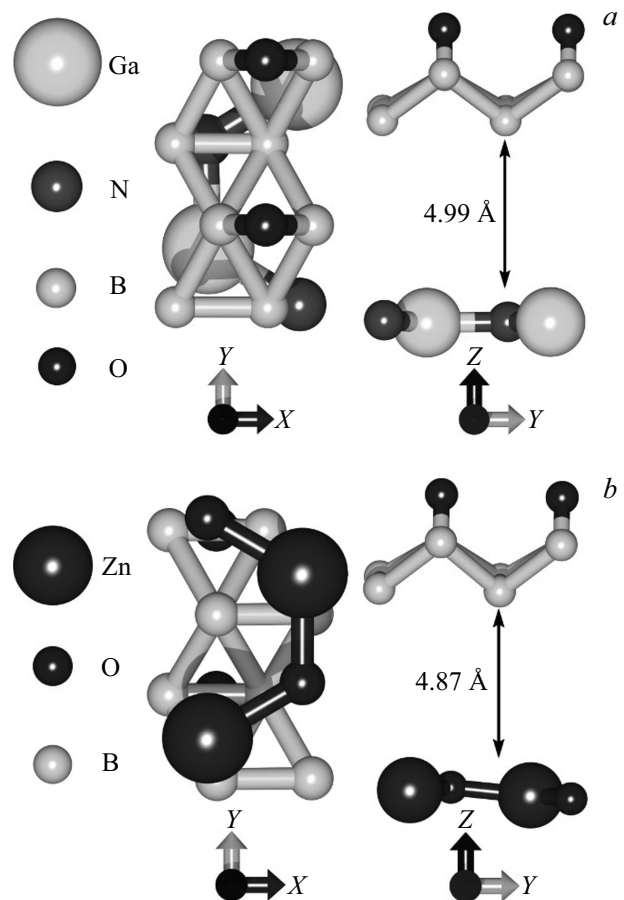


Рис. 1. Атомная структура суперячеек ван-дер-ваальсовых гетероструктур на основе оксидированного борофена: *a* — борофен/GaN; *b* — борофен/ZnO.

что в электронном строении обеих гетероструктур присутствует энергетическая щель между валентной зоной и зоной проводимости. Значение энергетической щели, определенное из рассчитанных зонных диаграмм, составляет 0.13 eV для гетероструктуры О-борофен/GaN и 0.22 eV для гетероструктуры О-борофен/ZnO.

Оптические и оптоэлектронные свойства ван-дер-ваальсовых гетероструктур на основе оксидированного борофена

Анализ оптических и оптоэлектронных свойств исследуемых ван-дер-ваальсовых гетероструктур проводился на основе рассчитанных спектров поглощения и спектров фототока в диапазоне длин волн электромагнитного излучения $0.2-2$ μm. Рассчитанные спектры поглощения для гетероструктур О-борофен/GaN и О-борофен/ZnO представлены на рис. 3 и 4 соответственно. Были рассмотрены два случая поляризации света: вдоль оси X (поперек зигзагообразного края О-борофена) и вдоль оси Y (вдоль зигзагообразного края О-борофена).

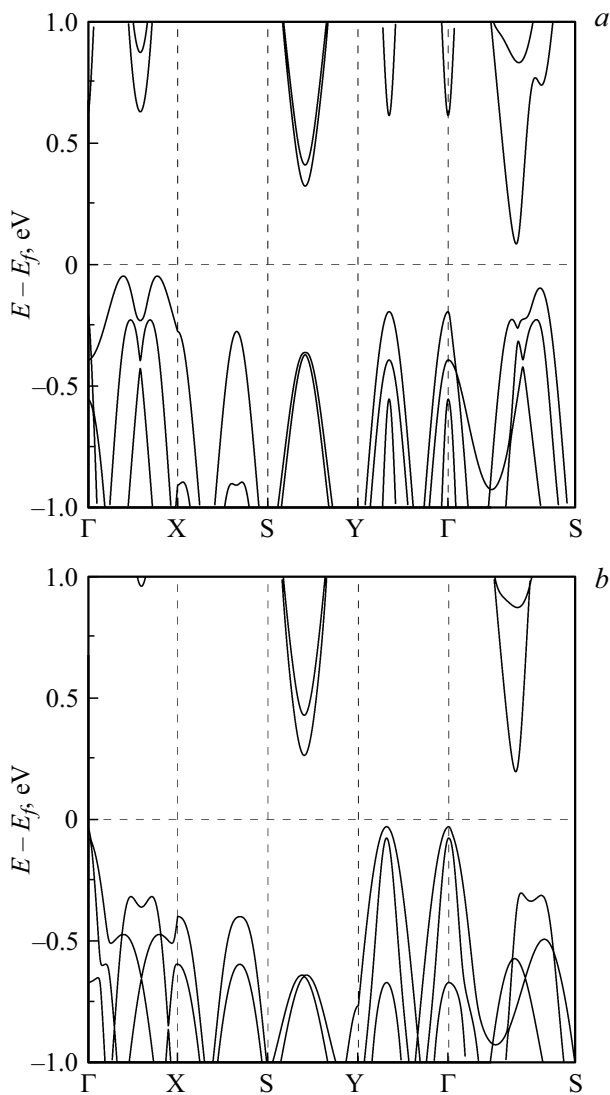


Рис. 2. Фрагменты зонной структуры вблизи уровня Ферми (смещен в 0 eV) ван-дер-ваальсовых гетероструктур на основе оксидированного борофена: *a* — борофен/GaN; *b* — борофен/ZnO.

Для установления влияния функционализации борофена кислородом на закономерности поглощения электромагнитного излучения исследуемых ван-дер-ваальсовых гетероструктур на рис. 3 и 4 также приведены рассчитанные спектры поглощения этих же гетероструктур, но с не функционализированным борофеном. Представленные на рисунках графики наглядно демонстрируют, что оксидирование борофена кардинальным образом изменило профиль спектра поглощения гетероструктур борофен/GaN и борофен/ZnO при поляризации света в направлении оси X. В этом случае в области видимого излучения появляется пик поглощения с максимальной для этих гетероструктур интенсивностью порядка 30%. В отсутствие функционализации кислородом борофена поглощение для гетероструктур борофен/GaN и борофен/ZnO во всем рассматриваемом диапазоне длин волн

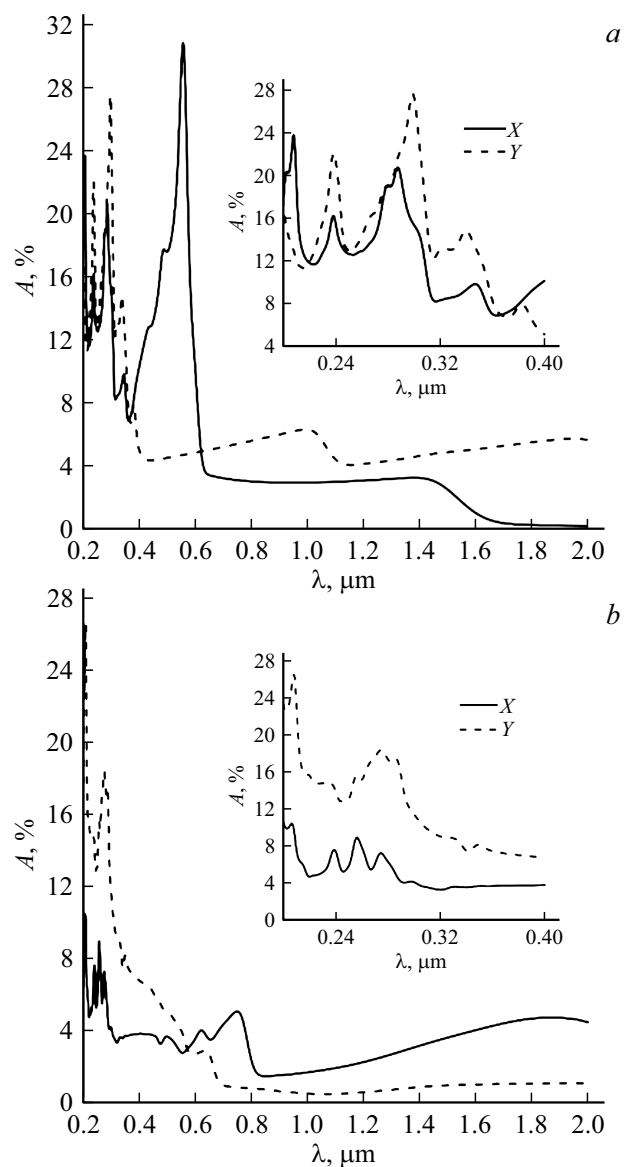


Рис. 3. Коэффициент оптического поглощения ван-дер-ваальсовой гетероструктуры борофен/GaN при поляризации света вдоль осей X (сплошные кривые) и Y (штриховые кривые): *a* — с оксидированным борофеном; *b* — с чистым борофеном.

составляло не более ~ 10 и ~ 5% соответственно. При поляризации волн вдоль оси Y профили спектров поглощения гетероструктур борофен/GaN и борофен/ZnO с оксидированным и не оксидированным борофеном практически одинаковы.

Причина таких заметных изменений в спектре поглощения гетероструктур O-борофен/GaN и O-борофен/ZnO при поляризации света вдоль оси X кроется в топологии O-борофена. Из рис. 1 четко видно, что вдоль оси X идут „мостики“ из ковалентных связей между атомом кислорода и соседними атомами бора в составе борофена. То есть, именно в направлении оси X функционализация борофена кислородом проявляется

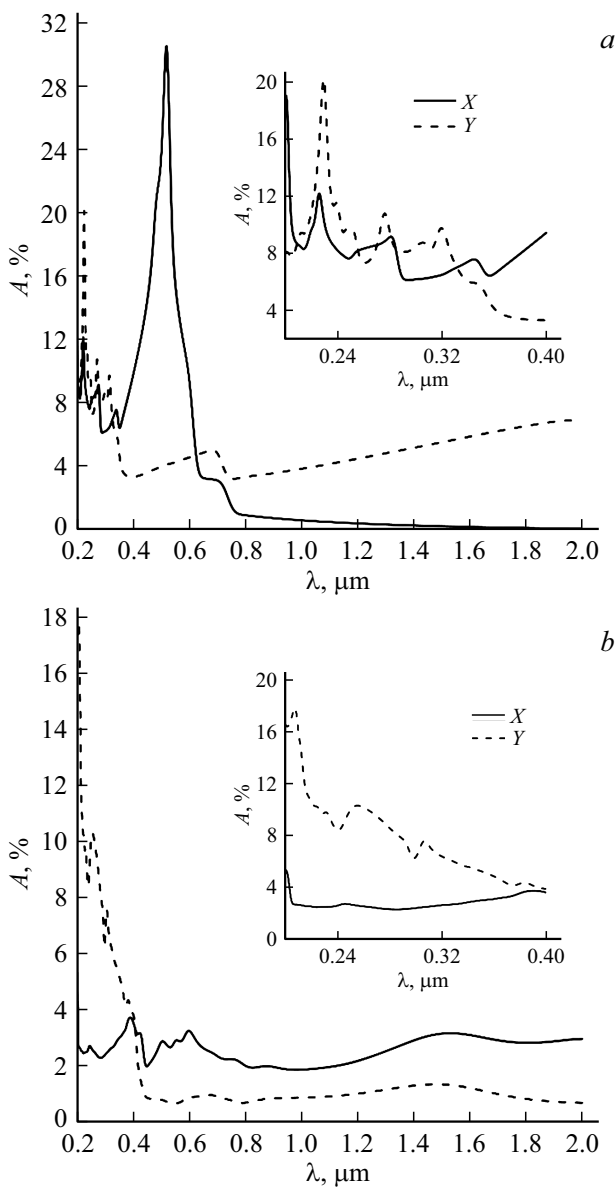


Рис. 4. Коэффициент оптического поглощения ван-дер-ваальсовой гетероструктуры борофен/ZnO при поляризации света вдоль осей X (сплошные кривые) и Y (штриховые кривые): a — с оксидированным борофеном; b — с чистым борофеном.

заметнее всего. Для того чтобы в этом убедиться, приведем на рис. 5 спектры поглощения оксидированного борофена для двух направлений поляризации света. Представленный график демонстрирует появление в области видимого диапазона точно такого же пика поглощения интенсивностью $\sim 30\%$, что и в спектрах поглощения ван-дер-ваальсовых гетероструктур О-борофен/GaN и О-борофен/ZnO при поляризации света вдоль оси X .

На основе полученных спектров поглощения и спектров солнечного излучения на поверхности Земли (AM1.5) и вне земной атмосферы (AM0) рассчитывались спектры фототока. Спектры солнечного излучения

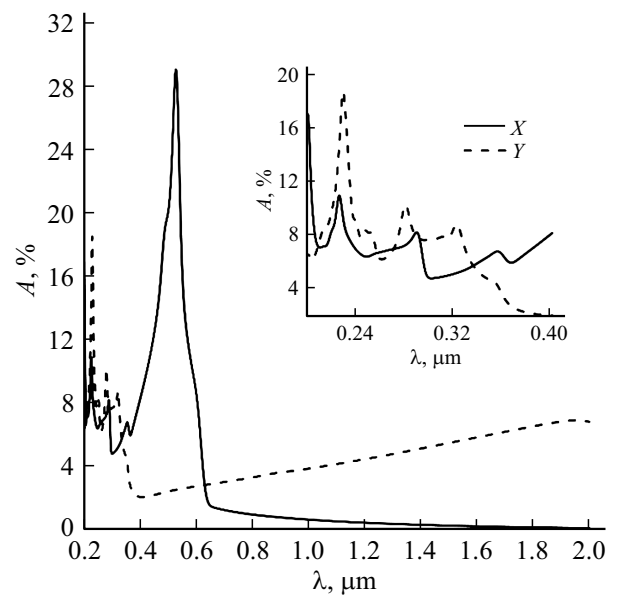


Рис. 5. Коэффициент оптического поглощения оксидированного борофена при поляризации света вдоль осей X (сплошные кривые) и Y (штриховые кривые).

AM0 и AM1.5 были взяты с сайта National Renewable Energy Laboratory [38], где приведены солнечные спектры в диапазоне длин волн 280–2000 nm. Рассчитанные спектры фототока О-борофена и ван-дер-ваальсовых гетероструктур на его основе показаны на рис. 6. Значения фототока приведены для площади поверхности, равной 1 cm^2 . Для О-борофена пик фототока расположен в видимой области спектра на длине волны $0.531 \mu\text{m}$, и его высота составляет $13.42 \text{ mA}\cdot\text{cm}^{-2}\cdot\mu\text{m}^{-1}$ в условиях AM0 и $10.96 \text{ mA}\cdot\text{cm}^{-2}\cdot\mu\text{m}^{-1}$ в условиях AM1.5. Участок возрастания фототока приходится на диапазон длин волн от ~ 0.4 до $\sim 0.65 \mu\text{m}$, охватывая больше половины (62.5%) спектра видимого излучения ($0.38\text{--}0.78 \mu\text{m}$). Здесь и далее наличие атмосферы обуславливает провалы фототока в ИК области спектра за счет поглощения электромагнитного излучения с длинами волн в соответствующем диапазоне. Спектры фототока гетероструктур О-борофен/GaN и О-борофен/ZnO имеют схожий вид со спектрами О-борофена. Для гетероструктуры О-борофен/GaN высота пика фототока на длине волны $0.561 \mu\text{m}$ составляет $14.97 \text{ mA}\cdot\text{cm}^{-2}\cdot\mu\text{m}^{-1}$ в условиях AM0 и $12.36 \text{ mA}\cdot\text{cm}^{-2}\cdot\mu\text{m}^{-1}$ в условиях AM1.5. Для гетероструктуры О-борофен/ZnO значения высоты пика фототока (на длине волны $0.524 \mu\text{m}$) в условиях AM0 и AM1.5 составляют 14.22 и $11.61 \text{ mA}\cdot\text{cm}^{-2}\cdot\mu\text{m}^{-1}$ соответственно.

Одной из ключевых характеристик фотовольтаических устройств является значение интегрального фототока или плотность фототока. В таблице приведены рассчитанные значения интегрального фототока для всего солнечного спектра излучения и для видимого диапазона солнечного спектра 380–780 nm, а также максимальный фототок на длине волны 550 nm, которая отвечает

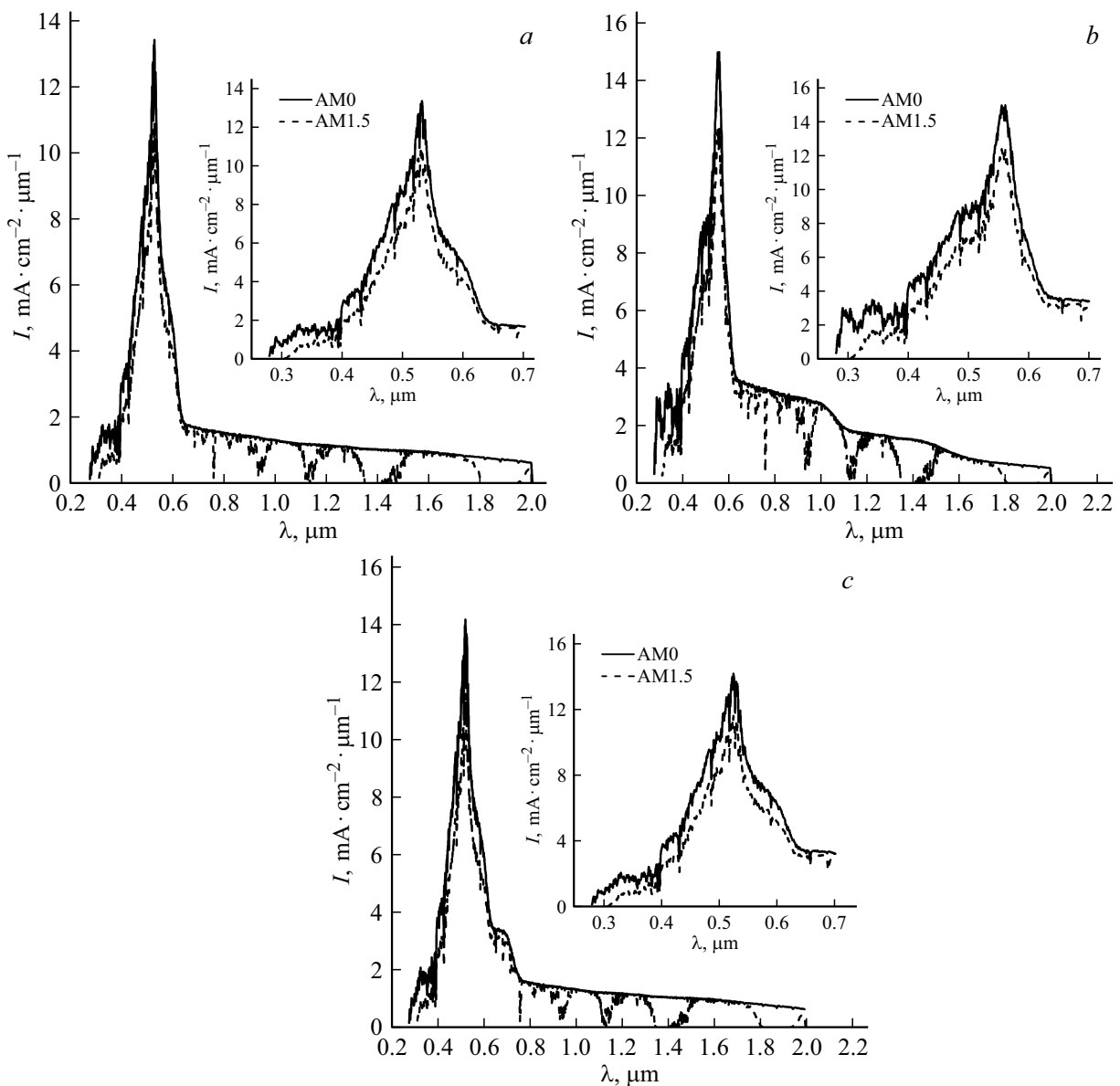


Рис. 6. Спектры фототока на поверхности Земли (AM1.5, штриховые кривые) и за пределами земной атмосферы (AM0, сплошные кривые): *a* — для монослоя оксидированного борофена; *b* — ван-дер-ваальсова гетероструктура на основе оксидированного борофена и GaN; *c* — ван-дер-ваальсова гетероструктура на основе оксидированного борофена и ZnO.

максимуму мощности солнечного излучения. Анализ данных таблицы показывает, что функционализация борофена кислородом приводит к двукратному увеличению интегрального фототока гетероструктур борофен/GaN и борофен/ZnO для спектров AM0 и AM1.5. В видимом диапазоне интегральный фототок для гетероструктур с O-борофеном в несколько раз превышает интегральный фототок гетероструктур с не функционализированным борофеном. При этом максимум фототока на длине волны 550 nm возрастает в 6 раз для гетероструктур O-борофен/GaN и O-борофен/ZnO. Также следует отметить, что значения интегрального фототока гетероструктур O-борофен/GaN и O-борофен/ZnO в видимом диапазоне хорошо коррелируют со значениями

интегрального фототока гетероструктуры графен/MoS₂ (~ 3 mA/cm²) [39] и многослойного WS₂ (4.10 mA/cm²), получаемых в реальном эксперименте [40].

Заключение

По итогам проведенного исследования можно сделать следующие выводы. Функционализация борофена кислородом с образованием ковалентных связей с одной стороны борофенового монослоя приводит к открытию энергетической щели в зонной структуре ван-дер-ваальсовых гетероструктур борофен/GaN (размер щели 0.13 eV) и борофен/ZnO (размер щели 0.22 eV). Благодаря полупроводниковому типу проводимости в

Оптоэлектронные характеристики исследуемых ван-дер-ваальсовых гетероструктур

Структура	Интегральный фототок для всего солнечного спектра излучения, mA/cm ²	Максимум фототока на длине волны 550 nm, mA·cm ⁻² ·μm ⁻¹	Интегральный фототок для видимого диапазона 380–80 nm, mA/cm ²
Солнечный спектр AM0			
О-борофен/GaN	4.59	13.81	2.40
О-борофен/ZnO	3.66	8.54	2.37
О-борофен борофен/GaN	3.20	7.94	1.92
борофен/GaN	2.08	2.76	1.20
борофен/ZnO	1.51	1.46	0.64
Солнечный спектр AM1.5			
О-борофен/GaN	3.42	11.42	1.95
О-борофен/ZnO	2.73	7.06	1.87
О-борофен борофен/GaN	2.36	6.57	1.50
борофен/GaN	1.49	2.28	0.92
борофен/ZnO	1.07	1.21	0.46

спектрах оптического поглощения и фототока гетероструктур О-борофен/GaN и О-борофен/ZnO в области видимого излучения появляется характерный пик высокой интенсивности, что важно для эффективной работы солнечных батарей на их основе. Наличие оксидированного борофена в составе исследуемых гетероструктур приводит к увеличению максимума фототока на длине волны 550 nm в 6 раз по сравнению с конфигурациями гетероструктур с чистым борофеном. Следовательно, за счет функционализации кислородом можно управлять расположением и интенсивностью пиков оптического поглощения и фототока гетероструктур на основе борофена. Прогнозируется, что ван-дер-ваальсовы гетероструктуры О-борофен/GaN и О-борофен/ZnO могут быть перспективны в качестве чувствительных элементов солнечных батарей, работающих как на поверхности Земли, так и за ее пределами. Об этом также свидетельствует хорошее соответствие данным натуральных экспериментов с другими слоистыми вертикальными 2D-структурами.

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] P. Ares, K.S. Novoselov. *Nano Mater. Sci.*, **4**, 3 (2021). DOI: 10.1016/j.nanoms.2021.05.002
- [2] J. Azadmanjiri, V.K. Srivastava, P. Kumar, Z. Sofer, J. Min, J. Gong. *Appl. Mater. Today*, **19**, 100600 (2020). DOI: 10.1016/j.apmt.2020.100600
- [3] X. Zhou, E.E. Rodriguez. *Chem. Mater.*, **29**, 5737 (2017). DOI: 10.1021/acs.chemmater.7b01561
- [4] R. Lv, J.A. Robinson, R.E. Schaak, D. Sun, Y. Sun, T.E. Mallouk, M. Terrones. *Acc. Chem. Res.*, **48**, 56 (2015). DOI: 10.1021/ar5002846
- [5] G. Murali, J.K. Reddy Modigunta, Y.H. Park, J.H. Lee, J. Rawal, S.Y. Lee, I. In, S.J. Park. *ACS Nano*, **16**, 13370 (2022). DOI: 10.1021/acsnano.2c04750
- [6] L. Li, Y. He, L. Xu, H. Wang. *Appl. Sci.*, **9**, 5211 (2019). DOI: 10.3390/app9235211
- [7] H. Xie, Z. Li, L. Cheng, A.A. Haidry, J. Tao, Y. Xu, K. Xu, J. Z. Ou. *iScience*, **25**, 103598 (2022). DOI: 10.1016/j.isci.2021.103598
- [8] M.C. Wang, C.C. Huang, C.H. Cheung, C.Y. Chen, S.G. Tan, T.W. Huang, Y. Zhao, Y. Zhao, G. Wu, Y.P. Feng, H. Wu, C. Chang. *Ann. Der Phys.*, **532**, 1900452 (2020). DOI: 10.1002/andp.201900452
- [9] A.K. Geim, I.V. Grigorieva. *Nature*, **499**, 419 (2013). DOI: 10.1038/nature12385
- [10] K.S. Novoselov, A. Mishchenko, A. Carvalho, A.H. Castro Neto. *Science*, **353**, aac9439 (2016). DOI: 10.1126/science.aac94
- [11] A. Di Bartolomeo. *Nanomaterials*, **10**, 579 (2020). DOI: 10.3390/nano10030579
- [12] J. Yao, G. Yanga. *J. Appl. Phys.*, **131**, 161101 (2022). DOI: 10.1063/5.0087503
- [13] Z. Wang, B. Xu, S. Pei, J. Zhu, T. Wen, C. Jiao, J. Li, M. Zhang, J. Xia. *Sci. China Inf. Sci.*, **65**, 211401 (2022). DOI: 10.1007/s11432-021-3432-6
- [14] Z.U.D. Babar, A. Raza, A. Cassinese, V. Iannotti. *Molecules*, **28**, 2275 (2023). DOI: 10.3390/molecules28052275
- [15] S.K. Chakraborty, B. Kundu, B. Nayak, S.P. Dash, P.K. Sahoo. *iScience*, **25**, 103942 (2022). DOI: 10.1016/j.isci.2022.103942
- [16] 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
- [17] S. Liang, B. Cheng, X. Cui, F. Miao. *Adv. Mater.*, **32**, 1903800 (2020). DOI: 10.1002/adma.201903800

- [18] Q. Tang, F. Zhong, Q. Li, J. Weng, J. Li, H. Lu, H. Wu, S. Liu, J. Wang, K. Deng, Y. Xiao, Z. Wang, T. He. *Nanomaterials*, **13**, 1169 (2023). DOI: 10.3390/nano13071169
- [19] P. Lin, J.K. Yang. *J. Alloys Compd.*, **842**, 155890 (2020). DOI: 10.1016/j.jallcom.2020.155890
- [20] N. Shehzad, S. Saeed, I. Shahid, I. Khan, I. Saeed, J.A. Zapien, L. Zhang. *RSC Adv.*, **12**, 31456 (2022). DOI: 10.1039/D2RA03439E
- [21] Y.V. Kaneti, D.P. Benu, X. Xu, B. Yulianto, Y. Yamauchi, D. Golberg. *Chem. Rev.*, **122**, 1000 (2022). DOI: 10.1021/acs.chemrev.1c00233
- [22] X. Liu, M.C. Hersam. *Sci. Adv.*, **5**, eaax6444 (2019). DOI: 10.1126/sciadv.aax6444
- [23] L. Li, J.F. Schultz, S. Mahapatra, X. Liu, C. Shaw, X. Zhang, M.C. Hersam, N. Jiang. *J. Am. Chem. Soc.*, **143**, 15624 (2021). DOI: 10.1021/jacs.1c04380
- [24] R. Abbasi, R. Faez, A. Horri, M.K. Moravvej-Farshi. *J. Appl. Phys.*, **132**, 034302 (2022). DOI: 10.1063/5.0092647
- [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] M.M. Slepchenkov, D.A. Kolosov, O.E. Glukhova. *Materials*, **15**, 4084 (2022). DOI: 10.3390/ma15124084
- [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] 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
- [31] S. Grimme. *J. Comput. Chem.*, **27**, 1787 (2006). DOI: 10.1002/jcc.20495
- [32] P. Pulay. *Chem. Phys. Lett.*, **73**, 393 (1980). DOI: 10.1016/0009-2614(80)80396-4
- [33] H.J. Monkhorst, J.D. Pack. *Phys. Rev. B*, **13**, 5188 (1976). DOI: 10.1103/PhysRevB.13.5188
- [34] S.L. Dudarev, G.A. Botton, S.Y. Savrasov, C.J. Humphreys, A.P. Sutton. *Phys. Rev. B*, **57**, 1505 (1998). DOI: 10.1103/PhysRevB.57.1505
- [35] 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
- [36] Y. He, N. Cheng, C. Chen, S.Y. Xiong, J.W. Zhao. *Sci. China Technol. Sci.*, **62**, 799 (2019). DOI: 10.1007/s11431-018-9385-x
- [37] X. Liu, M.S. Rahn, Q. Ruan, B.I. Yakobson, M.C. Hersam. *Nanotechnology*, **33**, 10 (2022). DOI: 10.1088/1361-6528/ac56bd
- [38] *National Renewable Energy Laboratory (NREL)*. [Электронный ресурс]. URL: <https://www.nrel.gov/>.
- [39] D.B. Seo, T.N. Trung, S.S. Bae, E.T. Kim. *Nanomaterials*, **11**, 1585 (2021). DOI: 10.3390/nano11061585
- [40] C.M. Went, J. Wong, P.R. Jahlka, M. Kelzenberg, S. Biswas, M.S. Hunt, A. Carbone, H.A. Atwater. *Sci. Adv.*, **5**, eaax6061 (2019). DOI: 10.1126/sciadv.aax6061