

## Влияние метрических параметров на электропроводные свойства тонких пленок перфорированного графена, функционализированного карбоксильными группами

© П.В. Барков,<sup>1</sup> М.М. Слепченко,<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, 119992 Москва, Россия  
e-mail: barkovssu@mail.ru

Поступило в Редакцию 26 декабря 2024 г.

В окончательной редакции 26 декабря 2024 г.

Принято к публикации 26 декабря 2024 г.

В рамках формализма теории функционала плотности в приближении сильной связи проведено *in silico* исследование электропроводных свойств функционализированных карбоксильными (COOH) группами тонких пленок перфорированного графена с почти круглыми отверстиями диаметром 1.2 nm с шириной шейки, изменяющейся в диапазоне 0.7–2 nm. Выявлены закономерности изменения удельной электропроводности исследуемых пленок с увеличением ширины шейки в разных направлениях гексагональной решетки графена. Установлено, что при изменении ширины шейки в направлении „zigzag“ удельная электропроводность изменяется скачкообразно с шагом скачков, равном трем, а в направлении „armchair“ она нарастает почти по линейному закону. Для объяснения наблюдаемых закономерностей проанализированы особенности квантового транспорта электронов в исследуемых пленках при различных значениях ширины шейки.

**Ключевые слова:** удельная электропроводность, теория функционала плотности в приближении сильной связи, ширина шейки, функция пропускания электронов.

DOI: 10.61011/JTF.2025.05.60286.464-24

### Введение

Одной из новых областей науки о материалах является исследование перфорированных двумерных (2D) наноматериалов [1]. Среди 2D-дырчатых наноматериалов одним из самых перспективных и востребованных является перфорированный графен (ПГ), который представляет собой графеновую структуру с периодическим массивом отверстий разных размеров и форм с различными расстояниями между ними [2]. Структурные особенности ПГ характеризуются двумя ключевыми геометрическими параметрами:

- 1) „периодичность“, определяемая как расстояние между центрами двух соседних отверстий;
- 2) „ширина шейки“ (W), определяемая как наименьшее расстояние между краями двух соседних отверстий [3,4].

Современные технологии синтеза, такие, как нанолитография, каталитическое окисление/гидрирование, фотокаталитическая резка, электрохимическое формирование рисунка, прямое облучение электронным/ионным пучком позволяют получать структуры ПГ с геометрическими параметрами, изменяющимися в широких пределах [5]. Пристальное внимание исследователей к ПГ обусловлено высокой удельной площадью их поверхности с большим количеством полезных реакционных/адсорбционных центров, значительно улучшенным

переносом массы и заряда, электронной структурой с настраиваемой шириной запрещенной зоны, а также превосходными механическими, магнитными и фотокаталитическими свойствами [6,7]. Благодаря яркой палитре перечисленных выше свойств ПГ находит применение в самых различных технических приложениях [8,9]. В частности, ПГ рассматривают в качестве перспективного кандидата на замену графеновым нанолентам при создании полевых транзисторов [10]. В работе [3] с помощью технологии литографии блок-сополимеров были изготовлены полевые транзисторы на основе ПГ, для которых экспериментально установлено, что отношение токов включения и выключения  $I_{on}/I_{off}$  устройства можно регулировать, изменяя ширину шейки ПГ. В частности, при ширине шейки 7 nm коэффициент  $I_{on}/I_{off}$  составлял более 100. Полевые транзисторы на основе нанолент ПГ с шириной менее 10 nm, синтезированных с помощью наноимпринтной литографии, предложены в работе [11]. Было показано, что за счет уменьшения ширины наноленты ПГ, можно добиться увеличения коэффициента  $I_{on}/I_{off}$  транзистора. По сравнению с чистым графеном, ПГ структуры характеризуются более быстрой поперечной диффузией ионов, что делает их перспективным электродным материалом для устройств хранения энергии с улучшенной производительностью. Например, удельная емкость чистого ПГ в неводном электролите в 1.4 раза выше, чем у чистого графена [12],

а в водных электролитах — в 1.5 раза выше, чем у чистого графена [13]. Повысить удельную емкость электрода на основе ПГ, а значит, и улучшить эффективность хранения энергии, можно путем легирования ПГ другими элементами, в том числе азотом, фосфором и серой [14–16].

Для эффективного применения ПГ в электронных устройствах, таких, как транзисторы и сенсоры, важно уметь осуществлять тонкую настройку электронных и электропроводных свойств наноматериалов на основе ПГ. Одним из возможных путей для решения этой задачи является подбор оптимальных геометрических параметров ПГ, обеспечивающих требуемые электронные и электропроводные свойства. Методами *ab initio* было предсказано, что размер энергетической щели ПГ можно настраивать путем варьирования ширины шейки, формы и диаметра отверстия, а также расположения отверстий вдоль направления „zigzag“ или вдоль направления „armchair“ гексагональной решетки графена [17]. В работе [18] с помощью метода теории функционала плотности (DFT) было показано, что пленки ПГ с почти круглыми отверстиями характеризуются наибольшей энергетической щелью по сравнению с пленками ПГ с отверстиями треугольной и прямоугольной форм. Другой путь к управлению свойствами ПГ лежит через функционализацию.

В настоящее время проводятся исследования, направленные на выявление закономерностей влияния различных газовых молекул на электронно-энергетические и сенсорные характеристики ПГ [19–21]. В то же время в этих работах рассматривается ситуация, когда молекулы газа адсорбируются на чистой поверхности ПГ. Однако в экспериментах по синтезу ПГ, так же, как и обычного графена, показано обязательное присутствие кислородсодержащих групп [22,23]. Эти группы должны оказывать влияния на электронное строение и электронно-энергетические параметры ПГ в силу высокой электроотрицательности кислорода. Ранее нами исследовалось влияние С=О-групп на электропроводность пленок ПГ с различной шириной шейки [24]. Целью настоящей работы является выявление закономерностей влияния ширины шейки на электропроводные характеристики пленок ПГ, функционализированных карбоксильными СООН-группами. Объектом исследования являются тонкие пленки ПГ с отверстиями почти круглой формы диаметром 1.2 nm.

## 1. Методы исследования

Исследование проводилось в рамках формализма теории функционала плотности в приближении сильной связи с самосогласованным вычислением зарядов (SCC DFTB) [25] с помощью программного пакета открытого доступа DFTB+ [26,27]. Выбор метода SCC DFTB обусловлен многоатомностью рассчитываемых суперъячеек, которые содержат несколько сотен атомов. Поиск равно-

весной 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 [28] с использованием сетки  $k$ -точек размером  $4 \times 4 \times 1$ .

Электропроводность исследуемых структур рассчитывалась в рамках формализма Ландауэра–Буттикера [29] 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

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

Коэффициент 2 перед интегралом в формуле (1) учитывает спин. Функция пропускания электронов  $T(E, k)$  определяется выражением вида

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

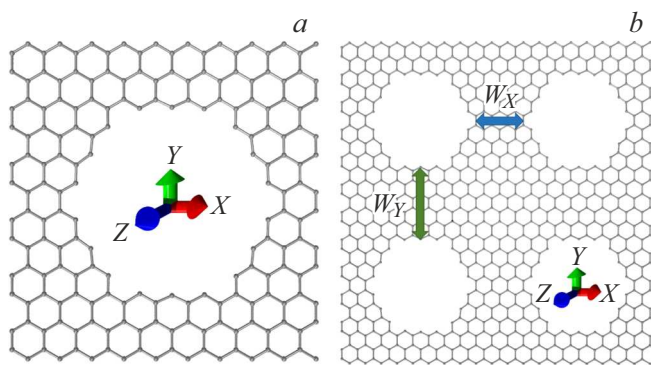
где  $G_C^A(E, k)$  и  $G_C^R(E, k)$  — опережающая и запаздывающая матрицы Грина, описывающие взаимодействие моделируемой системы с электродами, а  $\Gamma_S(E, k)$  и  $\Gamma_D(E, k)$  — матрицы расширения электронных состояний электродов истока и стока. Расчеты электропроводных характеристик исследуемых пленок выполнялись в базисе  $s$ - и  $p$ -электронных орбиталей при температуре 300 K.

## 2. Построение суперъячеек пленок функционализированного ПГ

Исходная суперъячейка пленки ПГ из 186 атомов углерода имела размеры  $2.46 \times 2.55 \text{ nm}$  (по осям  $X$  и  $Y$ ) и диаметр отверстия  $\sim 1.2 \text{ nm}$  (рис. 1, *a*). Ширина шейки составляла  $0.74 \text{ nm}$  в направлении „zigzag“ (оси  $X$ ) и  $0.99 \text{ nm}$  в направлении „armchair“ (ось  $Y$ ) графеновой решетки. Выбранные метрические параметры отвечают известным экспериментальным данным по синтезу ПГ [30,31]. Суперъячейки 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  $0.74$  до  $2.22 \text{ nm}$  с шагом  $\Delta W_X = 0.24 \text{ nm}$ , при этом ширина шейки  $W_Y$  оставалась равной  $0.99 \text{ nm}$ ;

2) изменялась ширина шейки  $W_Y$  от  $0.99$  до  $2.27 \text{ nm}$  с шагом  $\Delta W_Y = 0.42 \text{ nm}$ , при этом ширина шейки  $W_X$  оставалась равной  $0.74 \text{ nm}$  (рис. 1, *b*). Всего для проведения исследований нами использовалось 10 различных суперъячеек ПГ.



**Рис. 1.** Исходная суперячейка ПГ размером  $2.46 \times 2.55$  nm (a) и расширенный фрагмент этой суперячейки с обозначением ширины шейки вдоль направления „zigzag“ ( $W_x = 0.74$  nm) и вдоль направления „armchair“ ( $W_y = 0.99$  nm) (b).

Функциональные  $\text{COOH}$ -группы ковалентно присоединялись к атомам ПГ, располагающимся по краям отверстия, поскольку в этой области присутствуют ненасыщенные углеродные связи. Моделирование процесса функционализации проводилось пошагово с использованием оригинальной методики, подробно описанной в работе [32]. Согласно этой методике, для присоединения  $\text{COOH}$ -группы выбирался атом с наибольшей величиной избыточного отрицательного заряда на основе рассчитанного по методу Малликена распределения парциального заряда по всем атомам суперячейки ПГ, причем после добавления каждой новой функциональной группы это распределение пересчитывалось. На рис. 2 показана равновесная атомная конфигурация исходной суперячейки ПГ с девятью присоединенными  $\text{COOH}$ -группами (вид сверху и вид сбоку). Как видно из рисунка, ближайшие соседи атомов ПГ, к которым присоединялись  $\text{COOH}$ -группы, насыщены атомами водорода. Это было сделано для того, чтобы избежать образования ненужных ковалентных связей между функциональными группами и ближайшими соседними углеродными атомами. Аналогичным образом осуществлялась функционализация  $\text{COOH}$ -группами других суперячеек ПГ с увеличивающимися значениями  $W_x$  и  $W_y$ .

При проведении численных экспериментов по ковалентному присоединению  $\text{COOH}$ -групп к атомам ПГ выполнялась оценка энергии связи  $E_b$  согласно формуле

$$E_b = E_{PG+n\text{COOH}+mH} - E_G - E_{n\text{COOH}} - E_{mH}, \quad (4)$$

где  $E_{PG+n\text{COOH}+mH}$  — энергия суперячейки ПГ с присоединенными  $\text{COOH}$ -группами ( $n$  — число групп) и присоединенными атомами водорода ( $m$  — число посаженных атомов водорода),  $E_G$ ,  $E_{n\text{COOH}}$ ,  $E_{mH}$  — энергии изолированных ПГ,  $\text{COOH}$ -групп и атомов водорода соответственно. Результаты расчетов показали, что на разных этапах функционализации  $E_b$  принимает

значения в интервале от  $-80$  до  $-20$  meV/atom. Отрицательные значения величины  $E_b$  свидетельствуют о том, что процесс ковалентного присоединения  $\text{COOH}$ -групп к атомам по краям отверстия ПГ является энергетически выгодным, а получаемые атомные конфигурации функционализированного ПГ обладают термодинамической стабильностью.

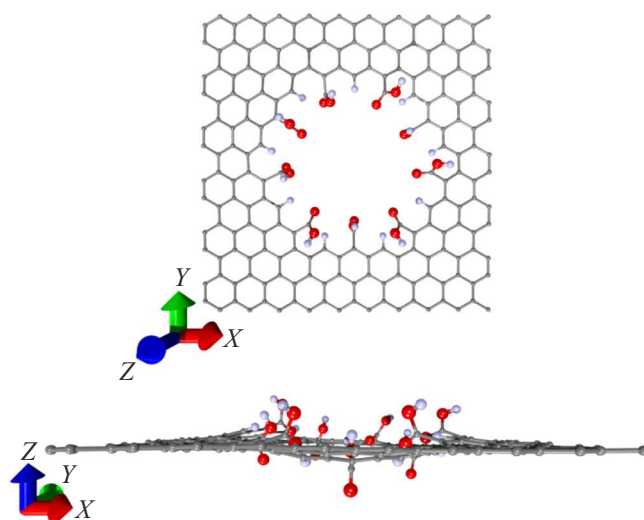
### 3. Электропроводные свойства пленок функционализированного ПГ с изменяющейся шириной шейки

Электропроводные свойства пленок ПГ в рамках данного исследования оценивались по величине удельной электропроводности  $\sigma$ , рассчитываемой для двух направлений токопереноса: вдоль направления „zigzag“ (ось  $X$ ) и вдоль направления „armchair“ (ось  $Y$ ) гексагональной решетки графена. Прежде чем переходить к обсуждению зависимостей  $\sigma$  от ширины шейки для ПГ с  $\text{COOH}$ -группами, напомним уже известную картину изменения  $\sigma$  с ростом  $W_x$  и  $W_y$  для нефункционализированного ПГ, установленную в рамках нашего предыдущего исследования [33]:

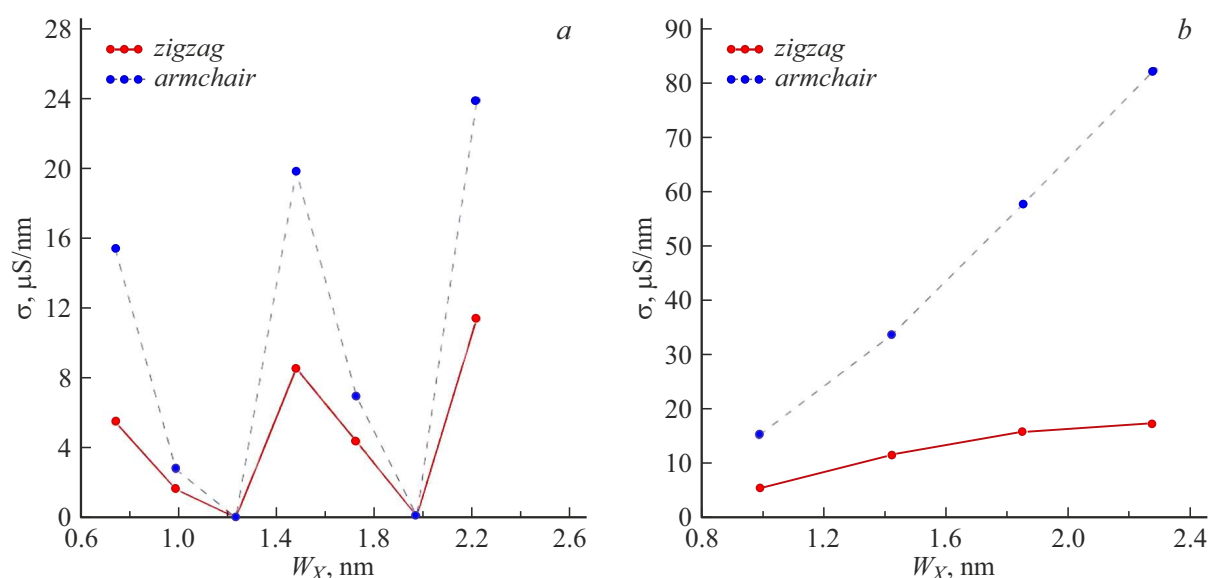
1) для структур ПГ характерна анизотропия электропроводности, вызванная неравномерным распределением локальной плотности электронных состояний (LDOS) по атомам суперячейки ПГ вдоль направлений „armchair“ и „zigzag“;

2) при увеличении  $W_x$  величина  $\sigma$  демонстрирует скачкообразный характер изменения в обоих направлениях токопереноса, в то время как при увеличении  $W_y$   $\sigma$  изменяется почти монотонно.

Выясним теперь, каков будет характер изменения величины  $\sigma$  при увеличении ширины шейки для ПГ



**Рис. 2.** Равновесная атомная конфигурация исходной суперячейки ПГ (размеры ячейки  $2.46 \times 2.55$  nm, ширина шейки  $W_x = 0.74$  nm,  $W_y = 0.99$  nm) с девятью присоединенными  $\text{COOH}$ -группами (вид сверху и вид сбоку).

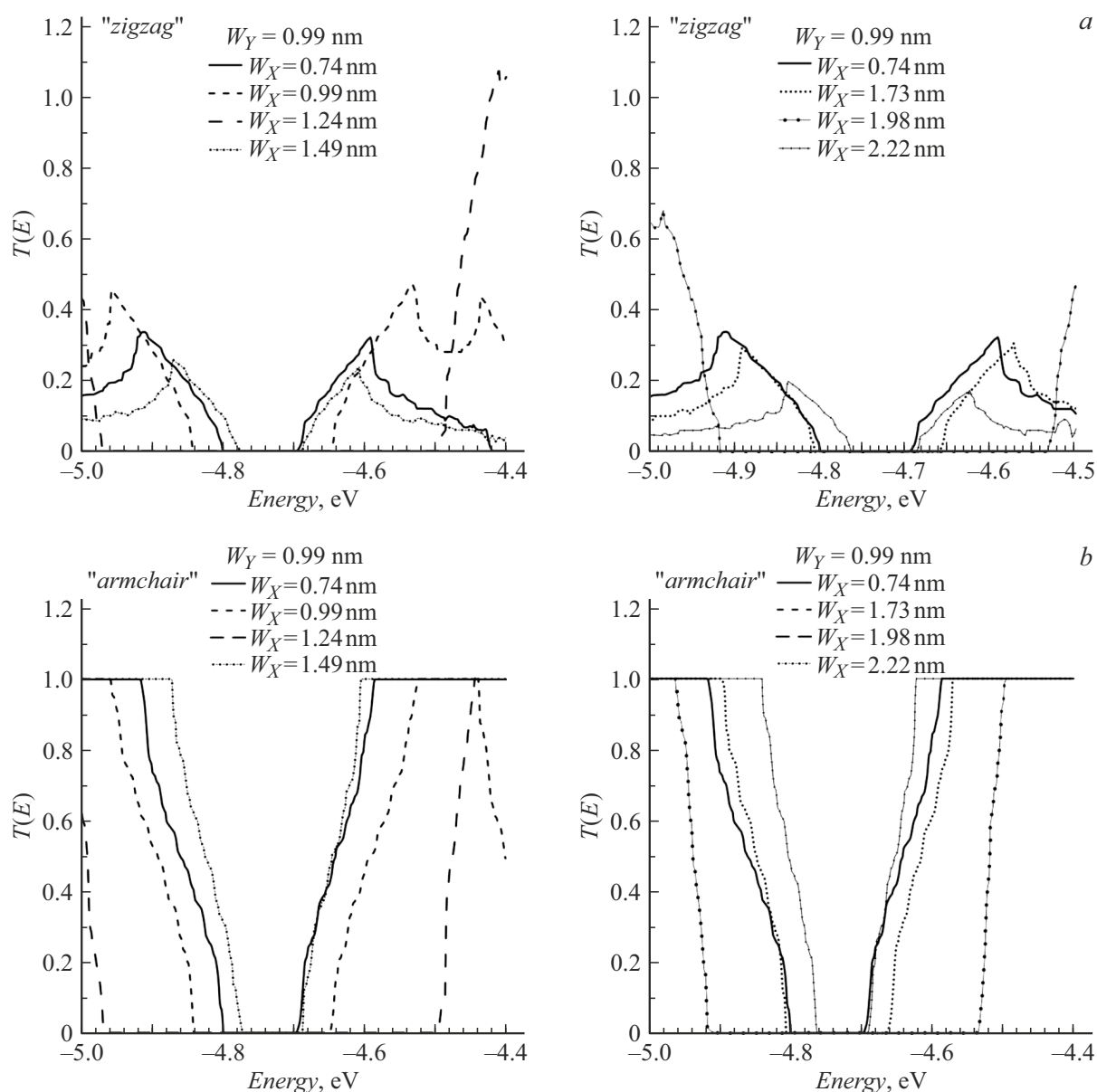


**Рис. 3.** Графики зависимости удельной электропроводности  $\sigma$  ПГ, функционализированного COOH-группами, от ширины шейки при ее увеличении вдоль направления „zigzag“ (a) и „armchair“ (b) для разных направлений токопереноса („zigzag“ и „armchair“).

при наличии COOH-групп. На рис. 3 приведены зависимости  $\sigma(W_X)$  (рис. 3, a) и  $\sigma(W_Y)$  (рис. 3, b) для суперъячеек функционализированного ПГ. Можно отметить, что характер изменения  $\sigma$  функционализированного ПГ в целом повторяет зависимости  $\sigma(W_X)$  и  $\sigma(W_Y)$ , приведенные в работе [33] для ПГ в отсутствии COOH-групп. С увеличением ширины шейки  $W_X$  величина  $\sigma$  меняется скачкообразно (рис. 3, a) в обоих направлениях токопереноса. Шаг скачков равен трем, причем при  $W_X = 1.24$  nm и  $W_X = 1.98$  nm  $\sigma$  снижается почти до нуля (менее  $0.1 \mu\text{S/nm}$ ). С увеличением ширины шейки  $W_Y$  величина  $\sigma$  меняется не скачком, а демонстрирует рост, близкий к линейному (рис. 3, b). Сохраняется и анизотропия электропроводности: разница в значениях  $\sigma$  между направлениями токопереноса „armchair“ и „zigzag“ составляет  $\sim 3$  раз для исходной суперъячейки с минимальными размерами  $W_X$  и  $W_Y$ , и с увеличением ширины шейки  $W_X$  эта разница снижается до 2 раз в точках максимума, а с увеличением ширины шейки  $W_Y$  она возрастает почти до 5 раз. По сравнению с нефункционализированным ПГ меняются лишь значения, которые принимает удельная электропроводность  $\sigma$ . В частности, при увеличении ширины шейки  $W_X$  максимумы  $\sigma$  принимают значения  $15\text{--}24 \mu\text{S/nm}$  для функционализированного ПГ и  $46\text{--}54 \mu\text{S/nm}$  для нефункционализированного ПГ при токопереносе вдоль направления „armchair“, в то время как при токопереносе вдоль направления „zigzag“ значения  $\sigma$  составляют  $5\text{--}11 \mu\text{S/nm}$  для функционализированного ПГ и  $15\text{--}21 \mu\text{S/nm}$  для нефункционализированного ПГ. Разница в значениях  $\sigma$  между нефункционализированным и функционализированным ПГ объясняется описанным в работе [32] явлением трансфера заряда с атомов ПГ на COOH-группы в ходе образования

ковалентного соединения между ними. В свою очередь, удельная электропроводность  $\sigma$  и функционализированного ПГ, и нефункционализированного ПГ выше, чем у обычного листа графена ( $\sim 3 \mu\text{S/nm}$  в обоих направлениях токопереноса согласно проведенным нами SCC DFTB-расчетам).

Для объяснения наблюдаемых на рис. 3 закономерностей поведения  $\sigma$ , в том числе количественных изменений в соотношениях значений  $\sigma$  между двумя направлениями токопереноса, приведем графики функции пропускания электронов  $T(E)$  для суперъячеек функционализированного ПГ с разными значениями ширины шейки  $W_X$  и  $W_Y$ . На рис. 4 показаны зависимости  $T(E)$  для случая увеличения ширины шейки  $W_X$ . Можно наглядно увидеть, что скачкообразное изменение  $\sigma$  на рис. 3, a объясняется то расширением, то сужением транспортной щели (протяженность интервала энергий, в которых  $T(E)$  обращается в нуль) при разных значениях ширины шейки  $W_X$  (рис. 4, a). В частности, при  $W_X = 1.24$  и  $1.98$  nm, когда  $\sigma$  спадает почти до нуля, ширина транспортной щели в обоих направлениях токопереноса составляет  $0.48$  и  $0.38$  eV соответственно, в то время как в точках максимума  $\sigma$  она составляет порядка  $0.1$  eV и меньше. Также из рис. 4 следует, что значения  $T(E)$  вблизи уровня Ферми ( $4.72\text{--}4.74$  eV в зависимости от значений  $W_X$  и  $W_Y$ ) в направлении токопереноса „armchair“ в несколько раз больше, чем в направлении токопереноса „zigzag“. Например, при  $W_X = 0.74$  nm и  $W_Y = 0.99$  nm (исходная суперъячейка ПГ) значения  $T(E)$  в направлениях „armchair“ и „zigzag“ отличаются в  $\sim 3$  раза, а при  $W_X = 1.98$  nm и  $W_Y = 0.99$  nm — уже в  $\sim 2$  раза, что объясняет анизотропию электропроводности на рис. 3.



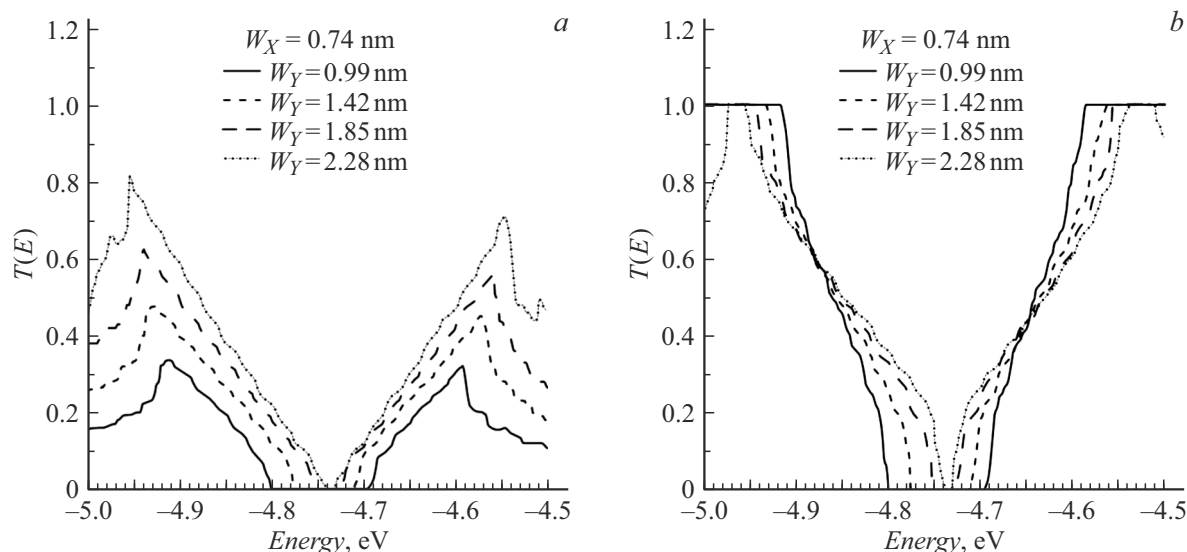
**Рис. 4.** Функции пропускания ПГ, функционализированного СООН-группами, в направлениях токопереноса „zigzag“ (a) и „armchair“ (b) при фиксированном значении ширины шейки  $W_Y = 0.99$  nm и значениях ширины шейки  $W_X$ , изменяющихся в диапазоне от 0.74 до 2.22 nm.

На рис. 5 показаны зависимости  $T(E)$  для случая увеличения ширины шейки  $W_Y$ . Из графиков на рис. 5 видно, что и в случае токопереноса вдоль направления „zigzag“, и в случае токопереноса вдоль направления „armchair“ наблюдается сужение ширины транспортной щели, причем величина этого сужения пропорциональна увеличению коэффициента, показывающего отношение между значениями  $\sigma$  в двух направлениях токопереноса. Например, при  $W_X = 0.74$  nm и  $W_Y = 1.42$  nm величина транспортной щели составляет  $\sim 0.06$  eV, что соответствует почти трехкратному превышению значения  $\sigma$  в направлении „armchair“ по сравнению с направлением „zigzag“, а при  $W_X = 0.74$  nm и  $W_Y = 2.28$  nm

транспортная щель величиной  $\sim 0.01$  eV соответствует разнице в  $\sim 4.8$  раза между значениями  $\sigma$  в разных направлениях токопереноса. Кроме того, как и в случае увеличения ширины шейки  $W_X$ , можно отметить, что число доступных каналов проводимости, определяемое значением функции  $T(E)$ , различается между направлениями токопереноса „zigzag“ и „armchair“ в пользу последнего.

Таким образом, на основании проведенного анализа можно заключить, что электропроводные свойства пленок ПГ, функционализированного СООН-группами, можно усиливать, либо ослаблять, варьируя шириной шейки.





**Рис. 5.** Функции пропускания ПГ, функционализированного  $\text{COOH}$ -группами, в направлениях токопереноса „zigzag“ (a) и „armchair“ (b) при фиксированном значении ширины шейки  $W_X = 0.74 \text{ nm}$  и значениях ширины шейки  $W_Y$ , изменяющихся в диапазоне от 0.99 до 2.28 nm.

## Заключение

Таким образом, на основании результатов SCC DFTB расчетов были выявлены закономерности влияния ширины шейки на электропроводные характеристики тонких пленок ПГ, функционализированного  $\text{COOH}$ -группами по краям отверстий почти круглой формы диаметром 1.2 nm. Анализ графиков удельной электропроводности  $\sigma$  исследуемых пленок с разными метрическими параметрами показал, что, варьируя ширину шейки в направлении „zigzag“, можно реализовывать в структурах функционализированного ПГ эффект переключения тока между состояниями с высокой и почти нулевой проводимостью, а, изменяя ширину шейки в направлении „armchair“, можно добиться многократного (4–5) увеличения  $\sigma$ , что важно для работы транзисторных и сенсорных устройств на основе подобных графеновых наноматериалов.

## 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] D. Wang, Y. Dou, X. Zhang, K. Bi, I.R. Panneerselvam, H. Sun, X. Jiang, R. Dai, K. Song, H. Zhuang, Y. Lu, Y. Wang, Y. Liao, L. Ding, Q. Nian. *Nano Today*, **55**, 102162 (2024). DOI: 10.1016/j.nantod.2024.102162

[2] M. Nazarian-Samani, S. Haghighat-Shishavan, M. Nazarian-Samani, S.F. Kashani-Bozorg, S. Ramakrishna, K.B. Kim. *Progr. Mater. Sci.*, **116**, 100716 (2021). DOI: 10.1016/j.pmatsci.2020.100716

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

[4] J. Yanga, M. Maa, L. Lia, Y. Zhanga, W. Huanga, X. Dong. *Nanoscale*, **6**, 13301 (2014). DOI: 10.1039/C4NR04584J

[5] N.S. Rajput, S.A. Zadjali, M. Gutierrez, A.M.K. Esawi, M.A. Teneji. *RSC Adv.*, **11**, 27381 (2021). DOI: 10.1039/d1ra05157a

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

[7] Y. Lin, Y. Liao, Z. Chen, J.W. Connell, *Mater. Res. Lett.*, **5** (4), 209 (2017). DOI: 10.1080/21663831.2016.1271047

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

[9] K. Yanga, J. Lia, L. Zhou, T. Zhang, L. Fu. *Flat Chem.*, **15**, 100109 (2019). DOI: 10.1016/j.flatc.2019.100109

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

[11] X. Liang, Y.S. Jung, S. Wu, A. Ismach, D.L. Olynick, S. Cabrini, J. Bokor. *Nano Lett.*, **10**, 2454 (2010). DOI: 10.1021/nl100750v

[12] 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

[13] 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

[14] F. Su, S. Zheng, F. Liu, X. Zhang, F. Su, Z.-S. Wu. *Chin. Chem. Lett.*, **32**, 914 (2021). DOI: 10.1016/j.cclet.2020.07.025

[15] J.H. Jeong, G.-W. Lee, Y.H. Kim, Y.J. Choi, K.C. Roh, K.-B. Kim. *Chem. Eng. J.*, **378**, 122126 (2019). DOI: 10.1016/j.cej.2019.122126

- [16] D. Yang, B. Xu, Q. Zhao, X.S. Zhao. *J. Mater. Chem. A*, **7**, 363 (2019). DOI: 10.1039/C8TA09188A
- [17] W. Oswald, Z. Wu. *Phys. Rev. B*, **85**, 115431 (2012). DOI: 10.1103/PhysRevB.85.115431
- [18] G. Tang, Z. Zhang, X. Deng, Z. Fan, Y. Zeng, J. Zhou. *Carbon*, **76**, 348 (2014). DOI: 10.1016/j.carbon.2014.04.086
- [19] M.S. Eldeeb, M.M. Fadlallah, G.J. Martyna, A.A. Maarouf. *Carbon*, **133**, 369 (2018). DOI: 10.1016/j.carbon.2018.03.048
- [20] L. Huang, S. Miao, X. Wang, X. Yang. *Molecular Simulation*, **46**, 853 (2020). DOI: 10.1080/08927022.2020.1778171
- [21] 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
- [22] V.V. Shnitov, M.K. Rabchinskii, M. Brzhezinskaya, D.Yu. Stolyarova, S.V. Pavlov, M.V. Baidakova, A.V. Shvidchenko, V.A. Kislenko, S.A. Kislenko, P.N. Brunkov. *Small*, **17**, 2104316 (2021). DOI: 10.1002/sml.202104316
- [23] П.В. Барков, М.М. Слепченко, О.Е. Глухова. *ЖТФ*, **94** (3), 426 (2024). [P.V. Barkov, M.M. Slepchenkov, O.E. Glukhova. *Technical Physics*, **69** (4), 404 (2024).]
- [24] 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
- [25] B. Aradi, B. Hourahine, Th. Frauenheim. *J. Phys. Chem. A*, **111**, 5678 (2007). DOI: 10.1021/jp070186p
- [26] 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, Th. Frauenheim. *J. Chem. Phys.*, **152**, 20 (2020). DOI: 10.1063/1.5143190
- [27] M. Elstner, G. Seifert. *Philos. Trans. R. Soc. A*, **372**, 20120483 (2014). DOI: 10.1098/rsta.2012.0483
- [28] H.J. Monkhorst, J.D. Pack. *Phys. Rev. B*, **13**, 5188 (1976). DOI: 10.1103/PhysRevB.13.5188
- [29] S. Datta. *Quantum Transport: Atom to Transistor* (Cambridge University Press, London, UK, 2005), p. 404.
- [30] 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
- [31] B. Sakkaki, H.R. Saghai, G. Darvish, M. Khatir. *Opt. Mater.*, **122**, 111707 (2021). DOI: 10.1016/j.optmat.2021.111707
- [32] O.E. Glukhova, P.V. Barkov. *Lett. Mater.*, **12**, 392 (2021). DOI: 10.22226/2410-3535-2021-4-392-396
- [33] P.V. Barkov, O.E. Glukhova. *Nanomaterials*, **11**, 1074 (2021). DOI: 10.3390/nano11051074