## 11

# Влияние деформации на оптические и оптоэлектронные свойства квази-2D ван-дер-ваальсовых гетероструктур на основе борофена

© М.М. Слепченков<sup>1</sup>, Д.А. Колосов<sup>1</sup>, О.Е. Глухова<sup>1,2</sup>

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

<sup>2</sup> Первый Московский государственный медицинский университет им. И.М. Сеченова,

Москва, Россия

e-mail: slepchenkovm@mail.ru

Поступила в редакцию 13.01.2025 г. В окончательной редакции 20.01.2025 г. Принята к публикации 07.04.2025 г.

> Методами ab initio проведен прогностический анализ влияния деформации растяжения/сжатия на оптические и оптоэлектронные свойства ван-дер-ваальсовых квази-2D гетероструктур, образованных гофрированным борофеном с треугольной кристаллической решеткой и графеноподобными нитридом галлия GaN и оксидом цинка ZnO. Подробно рассматриваются случаи деформации, приводящие к появлению энергетической щели в электронном строении исследуемых ван-дер-ваальсовых гетероструктур: одноосное сжатие на 14% и двухосное сжатие на 4% в случае гетероструктуры борофен/GaN и одноосное растяжение на 10% и двухоосное сжатие на 6% в случае гетероструктуры борофен/ZnO. Показано, что при одноосных деформациях спектры поглощения обеих гетероструктур наиболее заметно изменяются в области ИК диапазона, демонстрируя увеличение коэффициента поглощения в несколько раз по сравнению с его значениями в отсутствие деформаций. Наибольшей величиной поглощения в ИК диапазоне характеризуется гетероструктура борофен/GaN при одноосном сжатии на 14%. В случае двухосных деформаций для гетероструктуры борофен/GaN также характерно увеличение коэффициента поглощения в ИК диапазоне, а для гетероструктуры борофен/ZnO помимо увеличения поглощения в ИК диапазоне обнаружено увеличение пика поглощения в области диапазона видимого излучения при двухосном сжатии на 6 %. Показано, что осевая деформация растяжения/сжатия вызывает усиление генерации фототока у исследуемых гетероструктур в диапазонах ИК и видимого излучения за счет увеличения их коэффициента поглощения в указанных диапазонах длин волн.

> Ключевые слова: борофеновые гетероструктуры, осевое растяжение/сжатие, теория функционала плотности, спектр поглощения, фототок.

DOI: 10.61011/OS.2025.05.60782.33-25

## 1. Введение

После открытия графена [1] заметно возрос интерес к экспериментальному получению и исследованию двумерных (2D) материалов [2]. По сравнению со своими объемными аналогами 2D-материалы имеют большую площадь поверхности и более высокую реакционную способность, что в сочетании с эффектом квантового ограничения приводит к их уникальным физическим и химическим свойствам [2]. Следом за графеном в фокусе исследований оказались другие 2D-материалы, такие как гексагональный нитрид бора (h-BN) [3], черный фосфор [4], силицен [5], станен [6], германен [7], представители дихалькогенидов переходных металлов [8]. В настоящее время семейство 2D-материалов продолжает пополняться новыми членами [9], однако лишь небольшая часть из них является моноэлементными. Среди наиболее интересных моноэлементных материалов выделяется 2D аллотропная форма бора, именуемая борофеном [10]. Этот материал обладает уникальными упругими, электронными, оптическими, термическими и транспортными свойствами [11-14], что говорит о многообещающих перспективах его использования в суперконденсаторах, устройствах хранения энергии, сенсорах, медицинском оборудовании и в оптоэлектронике [15]. Как известно, трехвалентный бор имеет множество аллотропных модификаций. Подобный полиморфизм присущ и борофену. Методами ab initio было предсказано существование различных атомных конфигураций 2D-наноструктур бора [16]. Помимо листов с гексагональной и треугольной решетками [17], а также гофрированных листов с треугольной решеткой [18] существуют и другие разновидности 2D-листов бора с гексагональными отверстиями [19], в том числе алист, *β*-лист, *γ*-лист. Экспериментально различные аллотропные формы борофена можно получать методами атомно-слоевого осаждения на металлических подложках [20]. В настоящее время успешно синтезируются такие конфигурации борофена как гофрированный с треугольной решеткой, гексагональный,  $\beta 12$  и  $\chi^3$  [14]. Согласно результатам расчетов *ab initio*, наибольшей энергетической стабильностью обладает гофрированный борофен с треугольной кристаллической решеткой [21]. Кроме того, данная аллотропная модификация борофена является сильно анизотропным металлом с высоким модулем Юнга вдоль его направления armchair, превышающим модуль Юнга графена [22], и характеризуется заметной анизотропией теплопроводности [23]. Благодаря присущему борофену полиморфизму он обладает хорошей возможностью образовывать гетероструктуры (вертикальные или латеральные) с различными 2Dматериалами [24]. Первыми экспериментально были реализованы борофен-графеновые вертикальные гетероструктуры [25-27], продемонстрировавшие хорошую структурную стабильность. Подобные гетероструктуры уже применяются для создания датчика влажности, показавшего чувствительность примерно в 700 раз выше, чем у обычного графена, и в 27 раз выше, чем у индивидуального борофена [26]. Вертикальные 2Dгетероструктуры борофен-MoS2 рассматриваются как перспективный материал для разработки газовых сенсоров [28] и датчиков влажности, имеющих высокую чувствительность и быстрый отклик [29]. Методами ab initio прогнозируется создание вертикальных гетероструктур борофен/g-C<sub>2</sub>N [30], борофен/MX<sub>2</sub> (M = Mo, W и X = S, Se) [31] и борофен/InSe [32], которые являются перспективными кандидатами для реализации контакта металл-полупроводник с барьером Шоттки.

В настоящей работе рассматриваются борофеновые ван-дер-ваальсовые квази-2D-гетероструктуры двух типов — борофен/GaN и борофен/ZnO, предсказанные нами ранее методами *ab initio* [33]. Для их построения использовались гофрированный борофен с треугольной решеткой и графеноподобные слои GaN и ZnO. Целью исследования является выявление закономерностей влияния деформации растяжения/сжатия на оптические и оптоэлектронные свойства этих гетероструктур.

## 2. Методы исследования

Расчеты исследуемых гетероструктур проводились в рамках формализма теории функционала плотности (DFT) в программном пакете SIESTA [34] с использованием базисного набора поляризационных функций DZP и обменно-корреляционного функционала GGA (обобщенная градиентная аппроксимация) в формулировке Пердью, Бурке и Эрнзерхофа (РВЕ) [35]. Наличие сил Ван-дер-Ваальса между слоями гетероструктуры учитывалось введением дисперсионных поправок Гримма [36]. Нахождение равновесной конфигурации супер-ячеек гетероструктур выполнялось путем минимизации полной энергии электронной системы с помощью алгоритма Бройдена-Пулая [37]. Релаксация структуры проводилась до тех пока, силы, действующие на каждый атом, не становились менее 0.025 eV/Å. Для того чтобы исключить влияние слоев гетероструктуры друг на друга в непериодичном направлении, величина вакуумного промежутка выбиралась равной 20 А. Кинетическая энергия отсечки в расчетах составляла 150 Ry. Разбиение зоны Бриллюэна проводилось по схеме Монхорст-Пака [38] с сеткой  $12 \times 6 \times 1$  из *k*-точек.

Максимальное значение фототока рассчитывается формуле

$$I_{\max} = e \int_{\omega_1}^{\omega_2} \frac{A(\omega) Power_{\text{solar}}(\omega)}{h\nu} \, d\omega, \qquad (1)$$

где e — заряд электрона;  $A(\omega)$  — коэффициент поглощения;  $Power_{solar}(\omega)$  — мощность солнечного излучения; hv — энергия кванта солнечного излучения.

Коэффициент поглощения рассчитывается в рамках нестационарной теории возмущений первого порядка [39]:

$$A(\omega) = \frac{\omega}{cn(\omega)} \varepsilon_2(\omega), \qquad (2)$$

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

$$\varepsilon_{2}(\omega) = \frac{e^{2}}{\pi m^{2} \omega^{2}} \sum_{\nu,c} \int_{BZ} d\vec{k} |\langle |\psi_{ck}| \hat{\mathbf{e}}, \mathbf{p} |\psi_{\nu k} \rangle|^{2} \\ \times \delta(E_{c}(k) - E_{\nu}(k) - \hbar \omega), \qquad (3)$$

где суммирование проводится по каждой паре состояний валентной (заполненной) зоны и зоны проводимости (незанятой), а интегрирование — по всем *k*-точкам в зоне Бриллюэна, индексы *с* и *v* относятся к электронным состояниям в зоне проводимости и валентной зоне соответственно,  $E_{(c,\nu)}(k)$  и  $\psi_{(c,\nu),k}$  — энергии и собственные функции этих состояний. Матричный элемент электронного дипольного перехода находится между заполненным и незанятым состояниями, где ê вектор поляризации, а Р — оператор импульса. Оптические параметры исследуемых ван-дер-ваальсовых гетероструктур рассчитывались для двух разных направлений поляризации света (вектор Е параллелен оси Х и параллелен оси *Y*) в диапазоне длин волн 0.28 – 2 µm. Расчет оптических характеристик исследуемых гетероструктур проводился при разбиении зоны Бриллюэна с размером сетки *k*-точек  $960 \times 480 \times 1$ .

# Атомистические модели борофеновых ван-дер-ваальсовых гетероструктур при деформациях сжатия и растяжения

Подробное описание процесса получения супер-ячеек гетероструктур борофен/GaN и борофен/ZnO содержится в работе [33]. На рис. 1 показаны их равновесные конфигурации. Векторы трансляции супер-ячейки гетероструктуры борофен/GaN —  $L_x = 3.35$  Å и  $L_y = 6.10$  Å;



Рис. 1. Супер-ячейки борофеновых ван-дер-ваальсовых гетероструктур: (a) борофен/GaN, (b) борофен/ZnO.

векторы трансляции супер-ячейки гетероструктуры борофен/ZnO —  $L_x = 3.28$  Å и  $L_y = 5.83$  Å. Расстояние между слоями борофена и GaN вдоль оси Z составило 2.91 Å, между слоями борофена и ZnO — 2.51 Å.

По результатам проведенных ранее исследований электронного строения гетероструктур борофен/GaN и борофен/ZnO [33] было установлено, что они имеют бесщелевую зонную структуру, что обусловлено определяющим вкладом гофрированного борофена с треугольной решеткой в формирование зоны проводимости. Как известно, для эффективного применения ван-дерваальсовых гетероструктур в устройствах фотовольтаики, в частности для солнечных батарей, необходимо обеспечить наличие у них энергетической щели между валентной зоной и зоной проводимости. Одним из возможных способов открытия энергетической щели в зонной структуре наноматериала является деформация. В рамках нашего предыдущего исследования ab initio ван-дер-ваальсовые гетероструктуры борофен/GaN и борофен/ZnO подвергались одноосной и двухосной деформации сжатия/растяжения [40]. Рассматривались случаи одноосной деформации сжатия и растяжения вдоль оси У (вдоль зигзагообразного края листа борофена) на 1-14% и двухосной деформации сжатия и растяжения вдоль осей Х (поперек зигзагообразного края листа борофена) и У на 1-10%. По результатам проведенных численных экспериментов было установлено, что у гетеростуктуры борофен/GaN энергетическая щель появляется в случаях одноосного сжатия на 14% (0.028 eV) и двухосного сжатия на 4 % (0.018 eV), а у гетероструктуры борофен/ZnO она появляется при одноосном растяжения на 10 % (0.063 eV) и двухоосном сжатии на 6 % (0.012 eV). Причем для открытия щели необходимо обеспечить наличии нулевой плотности электронных состояний (DOS) вблизи уровня Ферми в распределениях DOS электронных орбиталей и атомов борофена и GaN/ZnO. Именно отмеченные выше случаи деформации и были нами отобраны для анализа оптических и оптоэлектронных свойств деформированных ван-дер-ваальсовых гетероструктур борофен/GaN и борофен/ZnO.

# Оптические и оптоэлектронные свойства борофеновых ван-дер-ваальсовых гетероструктур при деформациях сжатия и растяжения

Для исследуемых ван-дер-ваальсовых гетероструктур проводились расчеты спектров поглощения и спектров фототока в диапазоне длин волн электромагнитного излучения 0.28-2 µm. Рассчитанные спектры поглощения для недеформированной и деформированной гетероструктуры борофен/GaN представлены на рис. 2. Численная оценка коэффициента поглощения выполнялась для двух случаев поляризации электромагнитного излучения: вдоль оси Х (поперек зигзагообразного края листа борофена) и вдоль оси У (вдоль зигзагообразного края листа борофена). Из графиков на рис. 2, а видно, что для недеформированной гетероструктуры борофен/GaN характерна анизотропия коэффициента поглощения. Как показано в нашей предыдущей работе [41], наблюдаемая анизотропия объясняется тем, что при поляризации света вдоль оси Х определяющий вклад в оптические свойства гетероструктуры борофен/GaN вносит слой GaN, а при поляризации света вдоль оси У — борофен. При этом в обоих случаях поляризации пик поглощения приходится на область среднего УФ излучения, но его величина при поляризации света вдоль оси У в 3 раза выше, чем при поляризации вдоль оси Х. Рисунки 2, b и 2, c, наглядно показывают, что и одноосное, и двухосное сжатия вносят существенные изменения в спектр поглощения гетероструктуры борофен/GaN, что обусловлено, в первую очередь, появлением энергетической щели в ее зонной структуре. Одноосная деформация сжатия на 14% (рис. 2, b) вызвала увеличение высоты пика поглощения в области ИК диапазона в 3.5 раза при поляризации света вдоль оси Х (с 4.5% до 15.8%) и в 13 раз при поляризации света вдоль оси У (с 1 до 13.2%). В УФ диапазоне пик поглощения смещается по шкале длин волн из области среднего УФ в область ближнего УФ с сохранением а

16

20

20



Рис. 2. Коэффициент оптического поглощения ван-дер-ваальсовой гетероструктуры борофен/GaN при поляризации света вдоль осей Х и У: (а) в отсутствие деформации; (b) при одноосном сжатии на 14%; (c) при двухосном сжатии на 4%. На вставках к рисункам показаны фрагменты спектров поглощения в УФ диапазоне длин волн.

своей высоты для случая поляризации света вдоль оси Х и уменьшается по высоте в 3.5 раза, но остается попрежнему в пределах области среднего УФ в случае поляризации света вдоль оси У. Наконец, присутствующий у недеформированной гетероструктуры в видимом диапазоне пик на длине волны 0.75 µm для случая поляризации света вдоль оси Х после деформации смещается в сторону УФ диапазона, занимая длину волны 0.48 µm и теряя при этом менее 1% высоты. При двухосном сжатии на 4% картина изменений в спектре поглощения гетероструктры борофен/GaN не столь радикальна, как в описанном выше случае одноосной деформации, однако также затрагивает УФ, видимый и ИК диапазоны электромагнитного излучения. Наблюдается снижение высоты пика поглощения в УФ диапазоне с 6.4% до 3.6% для света, поляризованного вдоль оси X, и с 18.2 до 12.8% для света, поляризованного вдоль оси У. В ИК диапазоне, наоборот, пик поглощения возрастает для обоих случаев поляризации света: с 4.5 до 6% для поляризации вдоль оси X, с 1 до 2% для поляризации вдоль оси У. В видимом диапазоне при поляризации света вдоль оси Х пик поглощения расщепляется на два пика высотой  $\sim 3.8\%$  (длины волн  $0.56\,\mu\text{m}$  и  $0.45\,\mu\text{m}$ ), которая уступает высоте пика недеформированной гетероструктуры на 1.5 %. В целом можно отметить, что при поляризации света вдоль оси У одноосная деформация



Рис. 3. Расширенный фрагмент гетероструктуры борофен/GaN, состоящий из пяти супер-ячеек: (a) вид спереди; (b) вид сбоку.

сильнее влияет на количественные изменения коэффициента поглощения гетероструктуры борофен/GaN.

Причиной наблюдаемых различий между направлениями поляризации света являются особенности атомного строения 2D-листа борофена с треугольной кристаллической решеткой. Рассмотрим их на примере расширенного фрагмента гетероструктуры борофен/GaN, состоящего из пяти супер-ячеек, изображенных на рис. 1, *а*. Построенный фрагмент показан на рис. 3 в двух проекциях: вид спереди (рис. 3, *a*) и вид сбоку (рис. 3, *b*). Видно, что вдоль оси *Y* атомы бора формируют зигзагообразные цепочки со множеством поперечных связей, оказывающих высокое сопротивление деформации сжатия, действующей в направлении этой же оси, в то время как в направлении оси *X* атомы выстраиваются вдоль прямых линий.

Перейдем к обсуждению влияния деформации на спектры поглощения гетероструктуры борофен/ZnO, представленные на рис. 4. Из рис. 4, а видно, что для недеформированной гетероструктуры также свойственна анизотропия коэффициента поглощения при выборе направления поляризации света, как и для гетероструктуры борофен/GaN. Как было показано в нашей предыдущей работе [41], в области УФ и видимого диапазонов основной вклад в формирование спектральных профилей поглощения в направлении оси X вносит ZnO, в направлении оси У борофен, а в области ИК диапазона проявляется синергетический эффект сочетания борофена и ZnO в составе слоистой структуры. При одноосном растяжении на 10% наибольшие изменения происходят в области ИК диапазона (рис. 4, b): максимум поглощения возрастает в 2 раза для случая поляризации света вдоль оси Х и в 5 раз при поляризации света вдоль оси У. В последнем случае обращает на себя внимание появление характерного пика максимальной интенсивности на длине волны 1.35 µm, что обусловлено упомянутым выше синергетическим эффектом от взаимодействия борофена и ZnO в гетероструктуре, проявляющемся в виде возрастающего участка характеристик действительной и мнимой частей комплексной диэлектрической проницаемости в области ИК диапазона [41]. В УФ диапазоне максимум поглощения в области ближнего УФ снижается с 3.7 до 3% для света, поляризационного вдоль

оси Х, и возрастает с 8.4 до 11.8 % для света, поляризованного вдоль оси У. В видимом диапазоне наблюдается увеличение максимума поглощения менее, чем на 1 %, и смещение его по длинам волн в сторону УФ диапазона при поляризации света вдоль оси X, а также увеличение в 3 раза при поляризации света вдоль оси У. Различие между направлениями поляризации света может быть объяснена тем, что в случае поляризации света вдоль оси Х в значительной степени проявляются оптические свойства ZnO, в случае оси Y — борофена. Двухосное сжатие на 6% приводит к возрастанию максимума поглощения во всех трех рассматриваемых диапазонах электромагнитного излучения при поляризации света вдоль оси Х: на 1% в УФ диапазоне, на 3% (почти вдвое) в видимом диапазоне и на 2% (почти вдвое) в ИК диапазоне. При поляризации света вдоль оси У заметных качественных изменений в профиле спектра поглощения не происходит. Наблюдаются количественные изменения в значениях максимума поглощения в УФ диапазоне (снижение с 8.4 до 6.2%) и ИК диапазоне (увеличение на 0.2%). В случае одноосной деформации растяжения можно отметить большую чувствительность оптических свойств гетероструктуры борофен/ZnO при поляризации света вдоль оси У, что, как и в случае с гетероструктурой борофен/GaN, объясняется геометрическими особенностями 2D-листа борофена в этом направлении (формирование зигзагообразных цепочек со множеством поперечным связей). Эти геометрические особенности можно увидеть из рис. 5, где в двух проекциях показан расширенный фрагмент гетероструктуры борофен/ZnO, состоящий из пяти супер-ячеек, изображенных на рис. 2, а.

На основе полученных спектров поглощения и спектров солнечного излучения на поверхности Земли (AM1.5) и вне земной атмосферы (AM0) для исследуемых ван-дер-ваальсовых гетероструктур рассчитывались спектры фототока. Спектры солнечного излучения AM0 и AM1.5 были взяты с сайта *National Renewable Energy Laboratory* [42], где приведены солнечные спектры в диапазоне длин волн  $0.28-2\,\mu$ m. Рассчитанные спектры фототока недеформированной и деформированной вандер-ваальсовой гетероструктуры борофен/GaN показаны на рис. 6. Значения фототока приведены для площади



**Рис. 4.** Коэффициент оптического поглощения ван-дер-ваальсовой гетероструктуры борофен/ZnO при поляризации света вдоль осей X и Y: (a) в отсутствие деформации; (b) при одноосном растяжении на 10%; (c) при двухосном сжатии на 6%. На вставках к рисункам показаны фрагменты спектров поглощения в УФ диапазоне длин волн.



Рис. 5. Расширенный фрагмент гетероструктуры борофен/ZnO, состоящий из пяти супер-ячеек: (*a*) вид спереди; (*b*) вид сбоку.



**Рис. 6.** Спектры фототока на поверхности Земли (AM1.5) и за пределами земной атмосферы (AM0) для гетероструктур борофен/GaN: (*a*) в отсутствие деформации; (*b*) при одноосном сжатии на 14%; (*c*) при двухосном сжатии на 4%. На вставках к рисункам показаны фрагменты спектров фототока в диапазоне длин волн 0.28 – 0.7 μm.

поверхности, равной  $1 \text{ cm}^2$ . Как видно из рис. 6, *a*, наибольшая интенсивность интегральной величины фототока наблюдается в области видимого и УФ излучения. Начиная с длины волны  $0.8 \,\mu\text{m}$  (ИК диапазон) наблюдается спад величины интегрального фототока, обусловленный, во-первых, малым коэффициентом поглощения гетероструктур в этом диапазоне, во-вторых, меньшей мощностью солнечного излучения (максимум приходится на длину волны 550  $\mu$ m). При деформации сжатия как одноосной (рис. 6, *b*), так и двухосной (рис. 6, *c*) наблюдается рост максимального интегрального фототока

в области ИК диапазона, причем в случае одноосного сжатия на 14% происходит троекратное увеличение максимума фототока на длине волны  $\sim 2\,\mu$ m по сравнению с недеформированной структурой (рис. 6, *a*). При этом характерные пики в области видимого диапазона сохраняются для обоих случаев деформации.

На рис. 7 показаны спектры фототока недеформированной и деформированной ван-дер-ваальсовой гетероструктуры борофен/ZnO. В отсутствие деформации можно наблюдать закономерности изменения коэффициента поглощения (рис. 7, a), схожие со случаем недефор-



**Рис. 7.** Спектры фототока на поверхности Земли (AM1.5) и за пределами земной атмосферы (AM0) для гетероструктур борофен/ZnO: (*a*) в отсутствие деформации; (*b*) при одноосном растяжении на 10%; (*c*) при двухосном сжатии на 6%. На вставках к рисункам показаны фрагменты спектров фототока в диапазоне длин волн 0.28–0.7 µm.

мированной гетероструктуры борофен/GaN (рис. 6, *a*). Одноосная деформация растяжения на 10% приводит к двухкратному росту максимального интегрального фототока в ближнем ИК диапазоне (длина волны 1.2 µm) с сохранением максимума фототока в диапазоне видимого излучения (рис. 7, b). Двухосная деформация сжатия на 6% вызывает увеличение интегральной величины фототока во всем рассматриваемом интервале длин волн ИК диапазона и почти двухкратное увеличение максимума фототока в области диапазона видимого излучения (рис. 7, c). В целом можно отметить, что выявленные закономерности изменения коэффициента поглощения в рассматриваемом диапазоне длин волн для исследуемых гетероструктур в присутствии деформации проявляются и в спектрах фототока, рассчитываемых на основе спектров поглощения.

## 5. Заключение

Таким образом, с помощью одноосной и двухосной деформации растяжения и сжатия возникает возможность управления оптическими (коэффициент поглощения) и оптоэлектронными (интегральная величина фототока) характеристиками ван-дер-ваальсовых гетероструктур борофен/GaN и борофен/ZnO на основе гофрированного борофена с треугольной кристаллической решеткой. Появление энергетической щели между валентной зоной и зоной проводимости в электронном строении у борофеновых гетероструктур приводит к росту коэффициента поглощения и интегральной величины фототока в области ИК диапазона, особенно заметному для случая одноосной деформации сжатия гетероструктуры борофен/GaN на 14%. В направлении поляризации света вдоль зигзагообразного края листа борофена влияние одноосных деформаций на количественные изменения коэффициента поглощения и, как следствие, интегральной величины фототока более ощутимое ввиду того, что атомы борофена в этом направлении формируют зигзагообразные цепочки со множеством поперечным связей, оказывающих заметное сопротивление деформации. Прогнозируется, что вандер-ваальсовые гетероструктуры борофен/GaN и борофен/ZnO при наличии деформаций растяжения и сжатия, приводящих к появлению энергетической щели в их зонной структуре, могут быть перспективны в качестве чувствительных элементов солнечных батарей ИК диапазона, работающих как на поверхности Земли, так и за ее пределами, а также в качестве эффективных детекторов ИК излучения.

#### Финансирование работы

Работа выполнена при поддержке гранта Российского научного фонда (проект № 21-72-00082, https://rscf.ru/project/21-72-00082/) и государственного задания Минобрнауки FSRR-2023-0008.

## Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

## Список литературы

- K.S. Novoselov, A.K. Geim, S.V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S.V. Dubonos, I.V. Grigorieva, A.A. Firsov. Science, **306** 666 (2004). DOI: 10.1126/science.110289
- [2] P. Ares, K.S. Novoselov. Nano Mater. Sci., 4, 3 (2021). DOI: 10.1016/j.nanoms.2021.05.002
- M. Corso, W. Auwarter, M. Muntwiler, A. Tamai, T. Greber, J. Osterwalder. Science, 303, 217 (2004).
   DOI: 10.1126/science.10919
- [4] L. Li, Y. Yu, G.J. Ye, Q. Ge, X. Ou, H. Wu, D. Feng, X.H. Chen, Y. Zhang. Nat. Nanotechnol., 9, 372 (2014). DOI: 10.1038/nnano.2014.35
- [5] L. Tao, E. Cinquanta, D. Chiappe, C. Grazianetti, M. Fanciulli, M. Dubey, A. Molle, D. Akinwande. Nat. Nanotechnol., 10, 227 (2015). DOI: 10.1038/nnano.2014.325
- [6] F.F. Zhu, W.J. Chen, Y. Xu, C.L. Gao, D.D. Guan, C.H. Liu, D. Qian, S.C. Zhang, J.F. Jia. Nat Mater., 14, 1020 (2015). DOI: 10.1038/nmat4384
- M. Davila, L. Xian, S. Cahangirov, A. Rubio, G. Le Lay. New J. Phys., 16, 095002 (2014).
   DOL 10 1000/1007 2020/16/0/005002
  - DOI: 10.1088/1367-2630/16/9/095002
- [8] S. Manzeli, D. Ovchinnikov, D. Pasquier, O.V. Yazyev, A. Kis. Nat. Rev. Mater., 2, 17033 (2017).
   DOI: 10.1038/natrevmats.2017.33
- [9] M.M. Uddin, M.H. Kabir, M.A. Ali, M.M. Hossain, M.U. Khandaker, S. Mandal, A. Arifutzzaman, D. Jana. RSC Adv., 13, 33336 (2023). DOI: 10.1039/d3ra04456d
- [10] Y.V. Kaneti, D.P. Benu, X. Xu, B. Yuliarto, Y. Yamauchi, D. Golberg. Chem. Rev., **122**, 1000 (2021).
   DOI: 10.1021/acs.chemrev.1c00233

- [11] C. Hou, G. Tai, Z. Wu, J. Hao. Chempluschem., 85, 2186 (2020). DOI: 10.1002/cplu.202000550
- [12] K. Wang, S. Choyal, J.F. Schultz, J. McKenzie, L. Li, X. Liu, N. Jiang. Chempluschem., 89, e202400333 (2024).
   DOI: 10.1002/cplu.202400333
- [13] P. Ranjan, J.M. Lee, P. Kumar, A. Vinu. Adv. Mater., 32, 2000531 (2020). DOI: 10.1002/adma.202000531
- [14] G.H. Gupta, S. Kadakia, D. Agiwal, T. Kesharia, S. Kumar. Mater. Adv., 5, 1803 (2024). DOI: 10.1039/D3MA00829K
- [15] P. Kumar, G. Singh, R. Bahadur, Z. Li, X. Zhang, C.I. Sathish, M.R. Benzigar, T.K.A. Tran, N.T. Padmanabhan, S. Radhakrishnan, J.C. Janardhanan, C.A. Biji, A.J. Mathews, H. John, E. Tavakko, A. Vinu. Prog. Mater. Sci., 146, 101331 (2024). DOI: 10.1016/j.pmatsci.2024.101331
- Z. Luo, X. Fan, Y. An. Nanoscale Res. Lett., 12, 514 (2017).
   DOI: 10.1186/s11671-017-2282-7
- [17] X.B. Li, S.Y. Xie, H. Zheng, W.Q. Tian, H.B. Sun. Nanoscale, 7, 18863 (2015). DOI: 10.1039/c5nr04359j
- [18] K.C. Lau, R. Pati, R. Pandey, A.C. Pineda. Chem. Phys. Lett., 418, 549 (2006).
   DOI: 10.1016/j.cplett.2005.10.104
- [19] X. Wu, J. Dai, Y. Zhao, Z. Zhuo, J. Yang, X.C. Zeng. ACS Nano, 6, 7443 (2012). DOI: 10.1021/nn302696v
- [20] D. Li, J. Gao, P. Cheng, J. He, Y. Yin, Y. Hu, L. Chen, Y. Cheng, J. Zhao. Adv. Funct. Mater., **30**, 1904349 (2019). DOI: 10.1002/adfm.201904349
- [21] A. Horri, R. Faez. Micro Nano Lett., 14, 992 (2019).
   DOI: 10.1049/mnl.2019.0023
- [22] A.J. Mannix, X.-F. Zhou, B. Kiraly, J.D. Wood, D. Alducin, B.D. Myers, X. Liu, B.L. Fisher, U. Santiago, J.R. Guest, M.J. Yacaman, A. Ponce, A.R. Oganov, M.C. Hersam, N.P. Guisinger. Science, **350**, 1513 (2015). DOI: 10.1126/science.aad1080
- [23] H. Sun, Q. Li, X.G. Wan. J. Am. Chem. Soc., 18, 14927 (2016). DOI: 10.1039/C6CP02029A
- [24] R. Yanga, M. Sun. J. Mater. Chem. C, 11, 6834 (2023). DOI: 10.1039/D3TC00974B
- [25] S. Wang, Q. Li, K. Hu, Q. Liu, X. Liu, X. Kong. Compos — A: Appl. Sci. Manuf., 138, 106033 (2020). DOI: 10.1016/j.compositesa.2020.106033
- [26] C. Hou, T. Ga, B. Liu, Z. Wu, Y. Yin. Nano Res., 14, 2337 (2021). DOI: 10.1007/s12274-020-3232-8
- [27] J. Yu, M. Zhou, M. Yang, Y. Zhang, B. Xu, X. Li, H. Tao. Adv. Mater. Interfaces, 9, 2102088 (2022).
   DOI: 10.1002/admi.202102088
- [28] J. Shen, Z. Yang, Y. Wang, L.C. Xu, R. Liu, X. Liu. Appl. Surf. Sci., 504, 144412 (2020). DOI: 10.1016/j.apsusc.2019.144412
- [29] C. Hou, G. Tai, Y. Liu, Z. Wu, Z. Wua, X. Liang. J. Mater. Chem. A, 9, 13100 (2021). DOI: 10.1039/D1TA01940F
- [30] 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
- [31] 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
- [32] 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
- [33] M.M. Slepchenkov, D.A. Kolosov, O.E. Glukhova. Materials, 15, 4084 (2022). DOI: 10.3390/ma15124084
- [34] 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

- [35] 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
- [36] S. Grimme. J. Comput. Chem., 27, 1787 (2006). DOI: 10.1002/jcc.20495
- [37] P. Pulay. Chem. Phys. Lett., 73, 393 (1980).DOI: 10.1016/0009-2614(80)80396-4
- [38] H.J. Monkhorst, J.D. Pack. Phys. Rev. B, 13, 5188 (1976).DOI: 10.1103/PhysRevB.13.5188
- [39] E.N. Economou. *Green's Functions in Quantum Physics*, 3rd ed. (Springer, Berlin, 1983), pp. 55–75.
   DOI: 10.1007/3-540-28841-4\_4
- [40] М.М. Слепченков, Д.А. Колосов, О.Е. Глухова. ЖТФ,
   94 (3), 419 (2024). DOI: 10.61011/JTF.2024.03.57380.7-24
   [M.M. Slepchenkov, D.A. Kolosov, O.E. Glukhova. Technical Physics, 69 (3), 397 (2024). DOI: 10.21883/000000000].
- [41] М.М. Слепченков, Д.А. Колосов, О.Е. Глухова. Опт. и спектр., 131 (6), 754 (2023).
  DOI: 10.21883/OS.2023.06.55909.115-23 [М.М. Slepchenkov, D.A. Kolosov, O.E. Glukhova. Opt. Spectrosc., 131 (6), 712 (2023). DOI: 10.61011/EOS.2023.06.56658.115-23].
- [42] National Renewable Energy Laboratory (NREL) [Электронный ресурс]. URL: https://www.nrel.gov/