

Влияние наночастиц оксида металла на электрофизические характеристики квази-2D-графен-нанотрубных пленок

© М.М. Слепченков,¹ П.В. Барков,¹ С.Г. Левицкий,¹ 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, 119048 Москва, Россия
e-mail: slepchenkovm@mail.ru

Поступило в Редакцию 28 декабря 2025 г.

В окончательной редакции 28 декабря 2025 г.

Принято к публикации 28 декабря 2025 г.

В рамках теории функционала плотности в приближении сильной связи проведено *in silico* исследование энергетических и электрофизических свойств гибридных квази-2D-углеродных пленок при наличии на их поверхности наночастиц оксидов металлов. Гибридные углеродные пленки образованы ковалентно связанными графеном и одностенными нанотрубками, вертикально ориентированными по отношению к плоскости графена. В качестве оксидов металлов рассмотрены оксиды титана и гафния, являющиеся ярковыраженными диэлектриками. По величине энергии связи оценена термодинамическая устойчивость исследуемых структур. Электрофизические свойства оценены по величине электрического сопротивления. Проведен анализ распределения малликовского заряда в системе „графен–нанотрубная пленка + оксид металла“.

Ключевые слова: углеродные пленки, теория функционала плотности в приближении сильной связи, оксиды металлов, электрическое сопротивление, парциальный заряд.

DOI: 10.61011/JTF.2026.05.62756.344-25

Введение

Одномерные углеродные нанотрубки (УНТ) и двумерный графен, обладающие выдающимися структурными, механическими и физическими свойствами [1,2], на протяжении многих лет притягивают внимание исследователей как с позиции фундаментальной науки, так и с позиции разработки на основе этих углеродных наноматериалов различных технических приложений, включая суперконденсаторы, транзисторы, гибкие и прозрачные электроды, солнечные батареи, устройства с полевой эмиссией [3]. Для использования преимуществ обоих углеродных наноматериалов, начиная с конца 2000-х гг. стали предприниматься попытки объединить УНТ и графен, создав на их основе гибридный материал, характеризующий улучшенными свойствами вследствие синергетического эффекта [4–15]. В создаваемых полностью углеродных наноматериалах графен должен обеспечивать платформу с большой площадью поверхности для равномерного распределения УНТ и проводимость графен–нанотрубного гибрида в плоскости [14], тогда как УНТ должны служить в качестве разделителя листов графена, препятствуя их агрегации и обеспечивая проводимость гибрида в аксиальном направлении [15]. Разнообразие технологий синтеза, используемых для получения гибридных углеродных наноматериалов [13], позволяет формировать графен–нанотрубные архитектуры с различными взаимным расположением и способом соединения нанотрубки и графена [16]. Различают три

основных вида архитектуры синтезируемых полностью углеродных наноматериалов на основе УНТ и графена [16]. В архитектуре первого вида УНТ ориентированы параллельно плоскости графена, в архитектуре второго УНТ ориентированы перпендикулярно плоскости графена и в архитектуре третьего УНТ обернуты графеном. Графен–нанотрубные материалы с архитектурой двух первых видов более распространены по сравнению с архитектурой третьего вида и широко исследуются как методами компьютерного моделирования, так и методами физического эксперимента [17–24].

Для ряда технических приложений, требующих низкого электрического сопротивления, графен–нанотрубные материалы с архитектурой второго вида являются более перспективными. Как показано в работе [22], контактное сопротивление гибридной графен–нанотрубной структуры с УНТ, ориентированными перпендикулярно плоскости графена, в четыре раза меньше контактного сопротивления графен–нанотрубной структуры с УНТ, ориентированными параллельно плоскости графена. Кроме того, графен–нанотрубные материалы с архитектурой второго вида являются перспективными материалами для создания теплопроводящих интерфейсных материалов [23,24]. В частности, в работе [23] было показано, что использование гибридов графен–УНТ в качестве теплопроводящего интерфейса обеспечило нанокомпозитам, содержащим арамидные нановолокна, превосходные характеристики фототермического преобразования и джоулевого нагрева. Также авторы рабо-

ты [24] продемонстрировали, что гибридные полностью углеродные пленки с вертикально ориентированными УНТ обладают высокими показателями продольной и поперечной теплопроводности за счет дополнительных каналов проводимости, создаваемых графеном в поперечном направлении и нанотрубками в продольном направлении. В рамках настоящей работы рассматриваются графен–нанотрубные квази-2D-пленки с вертикально ориентированными одностенными УНТ (ОУНТ), бесшовно соединенными с графеном, и наночастицами оксидов металлов, адсорбирующихся на их поверхности. В качестве оксидов металлов рассматриваются наночастицы оксидов титана TiO_2 и гафния HfO_2 , обладающие ярко выраженными диэлектрическими свойствами. Методами атомистического моделирования проводится прогностический анализ влияния типа и концентрации наночастиц оксидов металлов на электронные и электрофизические свойства графен–нанотрубных пленок.

1. Методы исследования

Для получения атомистических моделей гибридных углеродных квази-2D-структур с бесшовным соединением графена и ОУНТ применялся оригинальный метод автоматизированного построения атомных сеток бесшовных соединений произвольной формы из углеродных наноструктур [25]. Используемый метод построения включает геометрический и динамические этапы. Геометрический этап заключается в построении триангулированной наносетки, служащей исходным каркасом для соединения двух рассматриваемых углеродных структур. В ходе динамического этапа на основании информации, получаемой на геометрическом этапе, осуществляется формирование бесшовного контакта между нанообъектами с использованием метода молекулярной динамики (МД) и силового поля AIREBO [26], являющегося наиболее подходящим для описания углеродных наноструктур. Шаг интегрирования по времени брался равным 0.1 fs. При МД-моделировании применялись нормальные условия (температура 300 К и давление 10^5 Pa). Для уточнения геометрических параметров суперъчейки, полученной с помощью МД и силового поля AIREBO, проводилась двойная реоптимизация атомной структуры выбранных вариантов атомной сетки бесшовных соединений графен–ОУНТ с помощью квантового метода функционала плотности в приближении сильной связи с самосогласованным вычислением заряда SCC DFTB [27]. Выбор метода SCC DFTB обусловлен многоатомностью рассчитываемых суперъчеек, которые содержат несколько сотен атомов. Параметрами оптимизации при этом выступали не только координаты атомов, но и векторы трансляции L_x (в направлении оси X), L_y (в направлении оси Y) суперъчейки бесшовных соединений. Для физически корректного описания взаимодействия между атомами углерода, гафния и кислорода дополнительно выполнена параметризация метода

SCC DFTB, заключающаяся в создании набора параметров Слейтера–Костера (SK), определяющих атомные орбитали взаимодействующих атомов и энергию их взаимодействия. Для описания взаимодействия между атомами углерода, титана и кислорода использовалась параметризация matsci-0-3 [28].

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

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

где коэффициент 2 перед интегралом учитывает спин, $T(E)$ — усредненная функция пропускания электронов, E_F — уровень Ферми электродов, e^2/h — квант проводимости, F_T — функция теплового уширения энергетических уровней. Расчеты электропроводных характеристик выполнялись при температуре 300 К.

2. Результаты и дискуссия

Кристаллические ячейки оксидов металлов TiO_2 и HfO_2 были взяты из международной базы данных Materials Project [30]. Для расчетов были выбраны кристаллические ячейки TiO_2 тетрагональной сингонии с пространственной группой $I4_1/amd$ и HfO_2 моноклинной сингонии с пространственной группой $P2_1/c$. В обоих случаях рассматривался срез кристалла (001). Рассчитываемая

суперъчейка TiO_2 содержала 36 атомов (рис. 1, *a*), суперъчейка HfO_2 — 44 атома (рис. 1, *b*). В состав суперъчейки гибридной углеродной пленки входила ОУНТ (16,0) высотой 17.6 Å. Выбранная высота ОУНТ объясняется ограничениями, которые накладывают на размеры рассчитываемых суперъчеек используемые квантовые методы и подходы. Векторы трансляции суперъчейки вдоль направлений „zig-zag“ и „armchair“ составили 37.33 и 35.51 Å соответственно.

Рассматривались случаи адсорбции одной, двух, трех и четырех наночастиц оксидов металлов на поверхности

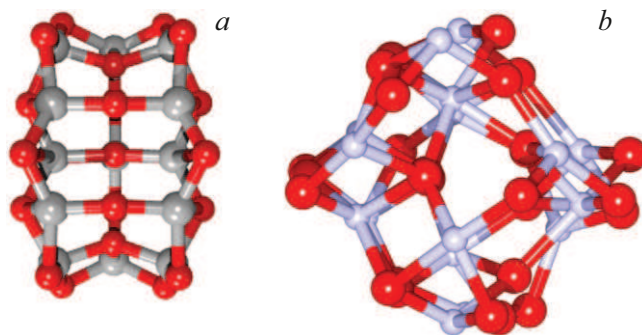


Рис. 1. Кристаллические суперъчейки TiO_2 тетрагональной сингонии с пространственной группой $I4_1/amd$ (*a*) и HfO_2 моноклинной сингонии (*b*) с пространственной группой $P2_1/c$.

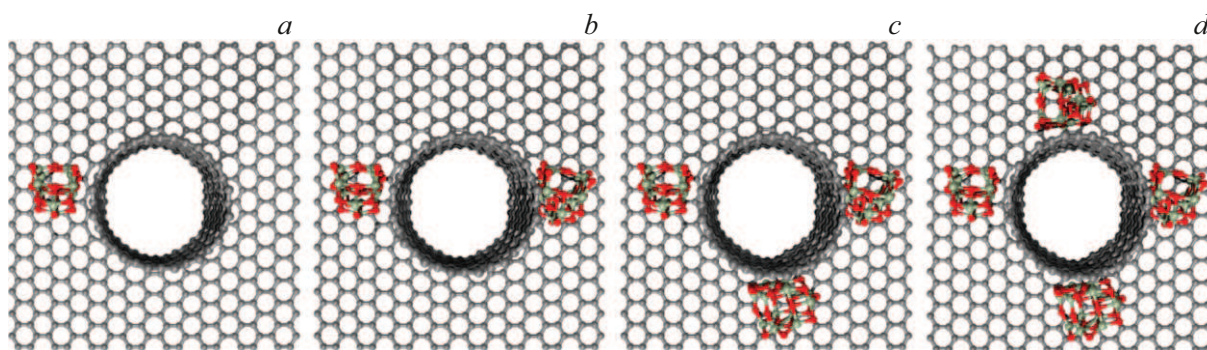


Рис. 2. Равновесные конфигурации суперрешечек графен–нанотрубных пленок с одной (а), двумя (b), тремя (c) и четырьмя (d) наночастицами TiO_2 .

Таблица 1. Энергетические и электрофизические характеристики системы „графен–нанотрубная пленка + TiO_2 “

| Количество наночастиц TiO_2 | Энергия связи E_b , eV | Уровень Ферми E_F , eV | Сопротивление R , k Ω |
|--------------------------------------|--------------------------|--------------------------|--------------------------------|
| 1 | –5.76 | –4.84 | 58.6 |
| 2 | –4.90 | –4.69 | 27.6 |
| 3 | –5.95 | –4.60 | 22.4 |
| 4 | –3.74 | –4.52 | 19.2 |

гибридной углеродной пленки. Случай с четырьмя наночастицами соответствует максимальной рассмотренной концентрации, определяемой как число частиц оксида металла, приходящееся на площадь суперрешечки. Расположение наночастиц оксидов металлов на поверхности графен–нанотрубной пленки выбиралось на основе результатов оптимизации атомной структуры суперрешечки системы „графен–нанотрубная пленка + оксид металла“. При этом для каждого из рассмотренных случаев адсорбции наночастиц оксидов металлов рассчитывалась величина энергии связи E_b , по которой оценивалась термодинамическая устойчивость системы „графен–нанотрубная пленка + оксид металла“. Энергия связи определялась как разность полной энергии системы „графен–нанотрубная пленка + оксид металла“ и суммарной полной энергии ее составных частей (пленки графен–ОУНТ и наночастиц оксида металла). На рис. 2 показаны равновесные конфигурации суперрешечек графен–нанотрубных пленок с одной (рис. 2, a), двумя (рис. 2, b), тремя (рис. 2, c) и четырьмя (рис. 2, d) наночастицами TiO_2 . В табл. 1 приведены энергетические и электрофизические характеристики графен–нанотрубной пленки с различным числом наночастиц TiO_2 на поверхности.

Из данных табл. 1 следует, что энергия связи E_b является отрицательной в каждом из рассмотренных

случаев адсорбции наночастиц TiO_2 и находится в диапазоне значений от -5.76 до -3.74 eV. Отрицательные значения величины E_b свидетельствуют о том, что процесс адсорбции наночастиц TiO_2 на поверхности графен–нанотрубной пленки является энергетически выгодным, а получаемые структурные конфигурации системы „графен–нанотрубная пленка + TiO_2 “ характеризуются термодинамической устойчивостью. Следует отметить, что адсорбция наночастиц TiO_2 повлияла и на изменение электронной структуры графен–нанотрубной пленки. По сравнению с положением уровня Ферми чистой пленки графен–ОУНТ (-5.05 eV) уровень Ферми системы „графен–нанотрубная пленка + TiO_2 “ сдвигается вверх по оси энергий, достигая отметки в -4.52 eV при максимальном рассмотренном числе наночастиц TiO_2 . Для объяснения изменения положения уровня Ферми гибридной пленки графен–ОУНТ при адсорбции наночастиц TiO_2 проводился анализ заселенностей электронных орбиталей по Малликену [31]. На рис. 3 можно увидеть полученные распределения маликенового (парциального) заряда по атомам суперрешечки системы „графен–нанотрубная пленка + TiO_2 “ с различным числом наночастиц TiO_2 . Анализ распределений маликенового (парциального) заряда показал, что в системе „графен–нанотрубная пленка + TiO_2 “ наблюдается трансфер заряда с TiO_2 на углеродный каркас, причем с ростом числа наночастиц TiO_2 величина переданного заряда увеличивается с $1.5e$ до $4.7e$ (e — заряд электрона), достигая своего максимума при четырех наночастицах TiO_2 . Получение углеродной пленкой графен–ОУНТ дополнительного заряда сказывается и на величине сопротивления. Если при одной наночастице TiO_2 сопротивление системы „графен–нанотрубная пленка + TiO_2 “ составляет 58 k Ω , то при четырех наночастицах TiO_2 оно снижается втрое до 19.2 k Ω .

Аналогичные исследования проводились и для наночастиц HfO_2 . На рис. 4 показаны равновесные конфигурации суперрешечек графен–нанотрубных пленок с одной (рис. 4, a), двумя (рис. 4, b), тремя (рис. 4, c) и четырьмя (рис. 4, d) наночастицами HfO_2 . В табл. 2 приведены энергетические и электрофизические харак-

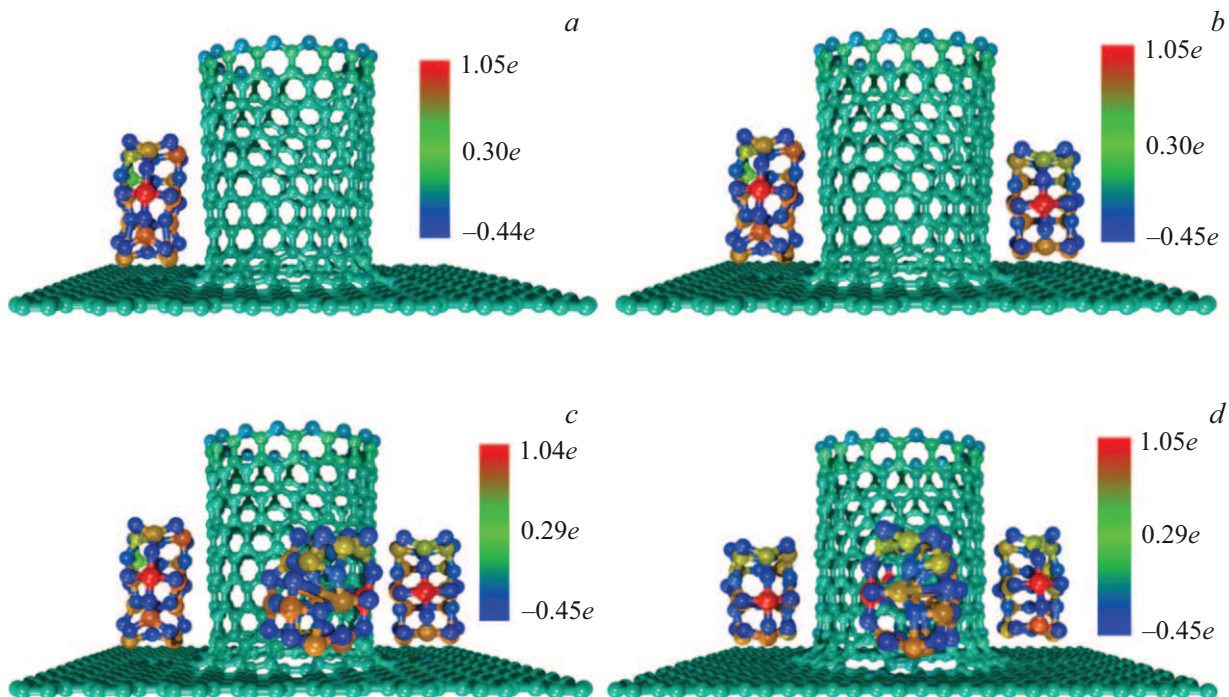


Рис. 3. Распределения малликовского (парциального) заряда по атомам суперъчейки системы „графен–нанотрубная пленка + TiO_2 “ с одной (a), двумя (b), тремя (c) и четырьмя (d) наночастицами TiO_2 .

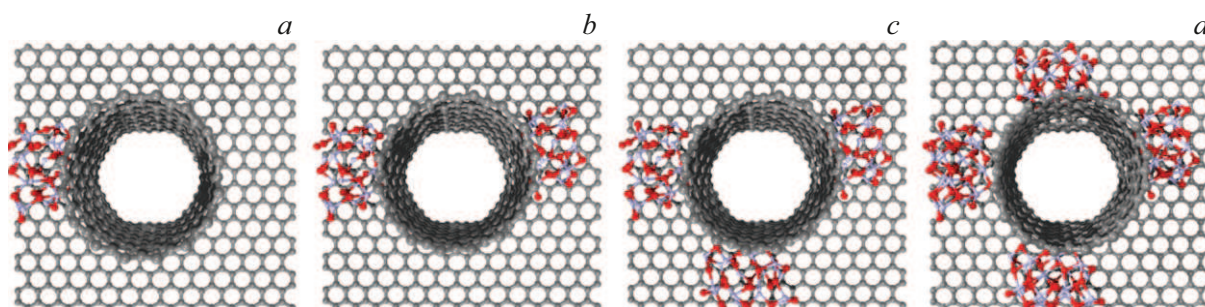


Рис. 4. Равновесные конфигурации суперъчеек графен–нанотрубных пленок с одной (a), двумя (b), тремя (c) и четырьмя (d) наночастицами HfO_2 .

Таблица 2. Энергетические и электрофизические характеристики системы „графен–нанотрубная пленка + HfO_2 “

| Количество наночастиц HfO_2 | Энергия связи E_b , eV | Уровень Ферми E_F , eV | Сопротивление R , k Ω |
|--------------------------------------|--------------------------|--------------------------|--------------------------------|
| 1 | –9.39 | –4.86 | 28.2 |
| 2 | –13.31 | –4.58 | 24.5 |
| 3 | –9.27 | –4.29 | 16.1 |
| 4 | –14.34 | –4.11 | 8.6 |

характеристики графен–нанотрубной пленки с различным числом наночастиц HfO_2 на поверхности. Как видно из данных табл. 2, суперъчейки графен–нанотрубных

пленок с разным числом наночастиц HfO_2 характеризуются отрицательными значениями энергии связи E_b , причем по своему абсолютному значению они выше, чем значения E_b , приведенные в табл. 1 для случаев адсорбции наночастиц TiO_2 . Уровень Ферми гибридной пленки графен–ОУНТ (16,0) также смещается вверх по оси энергий по сравнению с его положением в отсутствие оксидов металлов, как и в случае адсорбции наночастиц TiO_2 , достигая отметки -4.11 eV при четырех наночастицах HfO_2 . Изменение положения уровня Ферми в электронной структуре пленок графен–ОУНТ (16,0) при наличии наночастиц HfO_2 объясняется трансфером заряда в системе „графен–нанотрубная пленка + HfO_2 “, который перетекает с HfO_2 на углеродный каркас согласно распределениям малликовского заряда, представленным на рис. 5. Величина переданного заряда увеличивается с $2.3e$ до $7.7e$

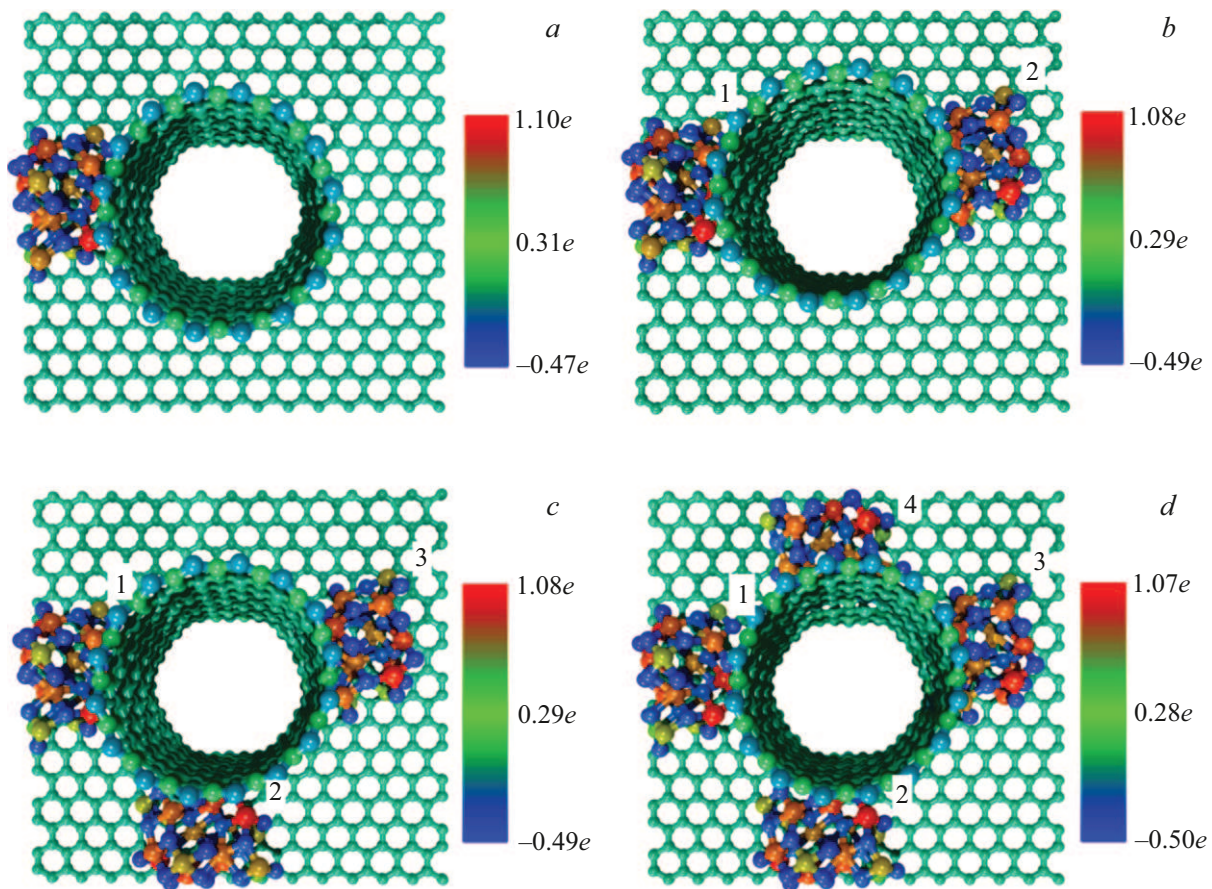


Рис. 5. Распределения маллиkenового (парциального) заряда по атомам суперъячейки системы „графен–нанотрубная пленка + HfO_2 “ с одной (a), двумя (b), тремя (c) и четырьмя (d) наночастицами HfO_2 .

(e — заряд электрона) с ростом числа наночастиц HfO_2 .

Электрическое сопротивление углеродной пленки графен–ОУНТ (16,0) по мере добавления наночастиц HfO_2 снижается, как видно из данных табл. 2. При четырех наночастицах HfO_2 сопротивление составляет порядка $\sim 9 \text{ k}\Omega$, что более чем вдвое меньше, чем при четырех наночастицах TiO_2 и ниже сопротивления чистой пленки графен–ОУНТ (16,0) ($14.3 \text{ k}\Omega$).

Для объяснения наблюдаемого эффекта снижения электрического сопротивления углеродной пленки графен–ОУНТ (16,0) при функционализации ее поверхности наночастицами TiO_2 и HfO_2 обратимся к анализу функции пропускания электронов $T(E)$, которая определяет число доступных для транспорта электронов каналов проводимости. Для чистой пленки графен–ОУНТ (16,0) значение $T(E)$ на уровне Ферми ~ 1.1 . Наименьшее сопротивление ($\sim 9 \text{ k}\Omega$) графен–нанотрубной пленки, функционализированной четырьмя наночастицами HfO_2 , объясняется тем, что при этом функция $T(E)$ достигает на уровне Ферми своего максимального значения (~ 1.9) среди всех рассмотренных случаев функционализации. Для графен–нанотрубной пленки, функционализированной четырьмя наночастица-

ми TiO_2 , с сопротивлением $19.2 \text{ k}\Omega$, функция $T(E)$ на уровне Ферми принимает значение ~ 0.8 . Разница в значениях функции $T(E)$ графен–нанотрубных пленок, функционализированных HfO_2 и TiO_2 (2.4), хорошо коррелирует с разницей в значениях электрического сопротивления между ними (2.2). Преимущества HfO_2 над TiO_2 связаны с большей величиной парциального заряда, переданного на углеродный каркас. Кроме того, в случае функционализации четырьмя наночастицами HfO_2 уровень Ферми углеродной пленки графен–ОУНТ (16,0) (-4.11 eV) по модулю заметно меньше, чем в случае функционализации четырьмя наночастицами TiO_2 (-4.52 eV). Это свидетельствует о том, что гибридная углеродная пленка, функционализированная наночастицами HfO_2 , характеризуется большей шириной валентной зоны, а значит, большее число валентных электронов может перейти в зону проводимости, создав тем самым лучшие условия для протекания тока.

Таким образом, на основании проведенного анализа можно заключить, что электрофизическими характеристиками гибридной графен–нанотрубной пленки можно управлять за счет адсорбции наночастиц оксидов ме-

таллов на ее поверхности, варьируя тип и количество наночастиц.

Заключение

На основании результатов SCC DFTB-расчетов были выявлены закономерности влияния наночастиц оксидов металлов (на примере TiO_2 и HfO_2) на электрофизические свойства графен–нанотрубкой пленки с вертикально ориентированными ОУНТ (16,0), оцениваемые по величине электрического сопротивления. Установлено наличие явления трансфера заряда в системе „графен–нанотрубная пленка + оксид металлов“ в направлении от наночастиц оксидов металлов к углеродному каркасу, которое приводит к изменению электронного строения гибридной пленки графен–ОУНТ, сопровождаемому сдвигом уровня Ферми вверх по оси энергий, свидетельствующим о расширении валентной зоны. Изменение положения уровня Ферми и трансфер заряда отражаются на функции пропускания электронов, определяющей число доступных для протекания тока каналов проводимости, и, как следствие, на величине электрического сопротивления пленки графен–ОУНТ, снижающегося с ростом числа частиц оксидов металла. При функционализации поверхности графен–нанотрубной пленки наночастицами HfO_2 достигнута минимальная величина сопротивления ниже в два раза по сравнению с минимальной величиной сопротивления, достигнутой при функционализации наночастицами TiO_2 , что объясняется большим числом каналов проводимости в случае HfO_2 и большей величиной заряда, переданного наночастицами HfO_2 на углеродный каркас по сравнению с наночастицами TiO_2 . Исследуемые структуры графен–нанотрубных пленок при наличии наночастиц оксидов металла можно рассматривать как перспективный наноматериал для создания устройств нанoeлектроники, в частности, нанотранзисторов.

Финансирование работы

Работа выполнена при поддержке гранта Российского научного фонда (проект № 24-79-10316, <https://rscf.ru/project/24-79-10316/>).

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] V. Georgakilas, J.A. Perman, J. Tucek, R. Zboril. *Chem. Rev.*, **115**, 4744 (2015) DOI: 10.1021/cr500304f
- [2] O.S. Ayanda, A.O. Mmuoegbulam, O. Okezie, N.I. Durumin Iya, S.E. Mohammed, P.H. James, A.B. Muhammad, A.A. Unimke, S.A. Alim, S.M. Yahaya, A. Ojo, T.O. Adaramoye, S.K. Ekundayo, A. Abdullahi, H. Badamasi. *J. Nanopart. Res.*, **26**, 106 (2024). DOI: 10.1007/s11051-024-06006-2
- [3] D. Jariwala, V.K. Sangwan, L.J. Lauhon, T.J. Marks, M.C. Hersam. *Chem. Soc. Rev.*, **42**, 2824 (2013). DOI: 10.1039/C2CS35335K
- [4] R. Atif, F. Inam. *Beilstein J. Nanotechnol.*, **7**, 1174 (2016). DOI: 10.3762/bjnano.7.109
- [5] P.N. Nirmalraj, P.E. Lyons, S. De, J.N. Coleman, J.J. Boland. *Nano Lett.*, **9**, 3890 (2009). DOI: 10.1021/nl9020914
- [6] S. Nardecchia, D. Carriazo, M. C. Gutiérrez, M. L. Ferrer, F. del Monte. *Chem. Soc. Rev.*, **42**, 794 (2013). DOI: 10.1039/C2CS35353A
- [7] C.-Y. Lin, Z. Zhao, J. Niu, Z. Xia. *Synthesis. J. Phys. D Appl. Phys.*, **49**, 443001 (2016). DOI: 10.1088/0022-3727/49/44/443001
- [8] M.M. Slepchenkov, P.V. Barkov, D.A. Kolosov, O.E. Glukhova. *C*, **9** (2), 51 (2023). DOI: 10.3390/c9020051
- [9] A. Gbaguidi, S. Namila, D. Kim. *Nanotechnology*, **31**, 255704 (2020). DOI: 10.1088/1361-6528/ab7fcc
- [10] X. Zhao, L. Qiu, D. Kong, Y. Huang, J. Liu. *Materials*, **16**, 6571 (2023). DOI: 10.3390/ma16196571
- [11] M.R. Zakaria, M.F. Omar, M.S. Zainol Abidin, H. Md Akil, M.M.A.B. Abdullah. *Compos. -A: Appl. Sci. Manuf.*, **154**, 106756 (2022). DOI: 10.1016/j.compositesa.2021.106756
- [12] S. Pyo, Y. Eun, J. Sim, K. Kim, J. Choi. *Micro Nano Syst. Lett.*, **10**, 9 (2022). DOI: 10.1186/s40486-022-00151-w
- [13] V.T. Dang, D.D. Nguyen, T.T. Cao, P.H. Le, D.L. Tran, N.M. Phan, V.C. Nguyen. *Adv. Nat. Sci.: Nanosci. Nanotechnol.*, **7**, 033002 (2016). DOI: 10.1088/2043-6262/7/3/033002
- [14] X. Wu, F. Mu, H. Zhao. *J. Mater. Sci. Technol.*, **55**, 16 (2020). DOI: 10.1016/j.jmst.2019.05.063
- [15] W. Du, Z. Ahmed, Q. Wang, C. Yu, Z. Feng, G. Li, M. Zhang, C. Zhou, R. Senegor, C.Y. Yang. *2D Mater.*, **6**, 042005 (2019). DOI: 10.1088/2053-1583/ab41d3
- [16] B. Liu, J. Sun, J. Zhao, X. Yun. *Adv. Compos. Hybrid Mater.*, **8**, 1 (2025). DOI: 10.1007/s42114-024-01074-3
- [17] J. Sheng, Z. Han, G. Jia, S. Zhu, Y. Xu, X. Zhang, Y. Yao, Y. Li. *Adv. Funct. Mater.*, **33**, 2306785 (2023). DOI: 10.1002/adfm.202306785
- [18] C. Le, X. Xudong, L. Mengya, L. Hao, Z. Xiahong, Y. Gui. *APL Mater.*, **9**, 041110 (2021). DOI: 10.1063/5.0045100
- [19] Z. Li, Z.H. Li, Y. Zhang, X. Xu, Y. Cheng, Y. Zhang, J. Zhao, N. Wei. *ACS Sens.*, **9**, 2499 (2024). DOI: 10.1021/acssensors.4c00170
- [20] Y. Li, Q. Ai, L. Mao, T. Gong, Y. Lin, G. Wu, W. Huang, X. Zhang. *Sci. Rep.*, **11**, 21006 (2021). DOI: 10.1038/s41598-021-00307-5
- [21] T. Xu, J. Jiang. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **25**, 5066 (2023). DOI: 10.1039/D2CP04797G
- [22] M. Gao, Z.L. Huang, B. Zeng, T.S. Pan, Y. Zhang, H.B. Peng, Y. Lin. *Appl. Phys. Lett.*, **106**, 051601 (2015). DOI: 10.1063/1.4907642
- [23] M. Lan, X. Jia, R. Tian, L. Feng, D. Shao, H. Song. *Carbon*, **219**, 118850 (2024). DOI: 10.1016/j.carbon.2024.118850
- [24] K. Xiong, C. Ma, J. Wang, X. Ge, W. Qiao, L. Ling. *Ceram. Int.*, **49**, 8847 (2023). DOI: 10.1016/j.ceramint.2022.11.039
- [25] G. Zhang, O.E. Glukhova. *Comput. Mater. Sci.*, **184**, 109943 (2020). DOI: 10.1016/j.commatsci.2020.109943
- [26] A. Van Duin, S. Dasgupta, F. Lorant, W.A. Goddard III. *J. Phys. Chem. A*, **105**, 9396 (2001). DOI: 10.1021/jp004368u
- [27] 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

- [28] DFTB+. Available online: <https://dftbplus.org/> (accessed on 1 February 2024)
- [29] S. Datta. *Quantum Transport: Atom to Transistor* (Cambridge University Press: Cambridge, London, UK, 2005), p. 404.
- [30] *Materials Project* Available online: <https://next-gen.materialsproject.org/> (accessed on 1 February 2024)
- [31] R.S. Mulliken. *J. Chem. Phys.*, **23**, 1833 (1955).