

08

Управление электронными свойствами квази-2D ван-дер-ваальсовых гетероструктур борофен/GaN и борофен/ZnO с помощью деформаций

© М.М. Слепченков,¹ Д.А. Колосов,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 16 января 2024 г.

В окончательной редакции 16 января 2024 г.

Принято к публикации 16 января 2024 г.

В рамках теории функционала плотности проведено *ab initio* исследование влияния деформации одноосного и двухосного сжатия/растяжения на электронные свойства двух типов ван-дер-ваальсовых квази-2D гетероструктур. Первый тип гетероструктур образован монослоями гофрированного борофена с треугольной кристаллической решеткой и графеноподобного нитрида галлия. Второй тип гетероструктур образован монослоями гофрированного борофена с треугольной кристаллической решеткой и графеноподобного оксида цинка. Определены случаи деформации, которые привели к появлению энергетической щели в зонной структуре исследуемых гетероструктур. Для объяснения причины открытия щели выполнены расчеты распределений полной и парциальной плотностей электронных состояний. Дана численная оценка величины барьера Шоттки *p*-типа для дырок и барьера Шоттки *n*-типа для электронов в гетероструктурах борофен/GaN и борофен/ZnO.

Ключевые слова: теория функционала плотности, зонная структура, плотность состояний, энергетическая щель, барьер Шоттки.

DOI: 10.61011/JTF.2024.03.57380.7-24

Введение

Вертикальная укладка различных 2D-кристаллов атомарной толщины в виде слоистых гетероструктур с ван-дер-ваальсовым типом связи между слоями позволяет получать новые материалы с привлекательными свойствами [1,2]. Для формирования вертикальных ван-дер-ваальсовых гетероструктур используют как традиционные 2D-материалы, такие как графен, нитрид бора, дисульфиды и диселениды молибдена и вольфрама, оксид цинка, так и недавно синтезируемые представители карбидов, нитридов и карбонитридов переходных металлов, а также метало-органических соединений [3–6]. Благодаря многообещающим электронным и оптическим свойствам ван-дер-ваальсовые гетероструктуры находят широкое применение при конструировании полевых транзисторов с вертикальной структурой, фотодетекторов, светоизлучающих и фотовольтаических устройств [7–10]. Успешно проведенный синтез борофена [11,12] стимулировал интерес к построению ван-дер-ваальсовых гетероструктур на основе борофена. Борофен представляет собой двумерный кристалл бора, а его атомная структура состоит из треугольных и гексагональных элементов [13]. Благодаря таким уникальным свойствам, как механическая прочность и гибкость, высокая тепло- и электропроводность, а также оптическая

прозрачность борофен по праву считается одним из наиболее перспективных одноэлементных 2D-материалов для целей нано- и оптоэлектроники [14–16]. Одним из главных достоинств борофена является наличие у него многих аллотропных форм, различающихся конфигурациями ковалентных связей между атомами бора, что позволяет его успешно сочетать с разными 2D-кристаллами в составе вертикальной гетероструктуры. Уже продемонстрирована возможность создания ван-дер-ваальсовых гетероструктур борофен/g-C₂N [17], борофен/InSe [18], борофен β_{12} /MX₂ (M = Mo, W и X = S, Se) [19] и последующего их использования в качестве контактов металл-полупроводник с регулируемой высотой барьера Шоттки. В работе [20] сообщается о синтезе вертикальных борофен-графеновых гетероструктур, востребованных для разработки датчиков влажности. Методами *ab initio* прогнозируется, что ван-дер-ваальсовые гетероструктуры борофен/нитрид бора и борофен/MoS₂ являются перспективными материалами для создания молекулярных сенсоров [21,22]. В рамках настоящей работы рассматриваются две новые атомные конфигурации борофеновых ван-дер-ваальсовых квази-2D гетероструктур — борофен/GaN и борофен/ZnO. В состав этих конфигураций входит гофрированный борофен с треугольной кристаллической решеткой, обладающий наиболее высокой энергетической стабильностью среди других ал-

лотропных форм [23]. Графеноподобные монослои ZnO и GaN ранее успешно использовались для формирования ван-дер-ваальсовых гетероструктур на основе графена, продемонстрировавших многообещающие электронные и оптоэлектронные свойства [24,25]. Близкое соответствие параметров кристаллической решетки GaN и ZnO с кристаллической решеткой гофрированного борофена позволяет существенно уменьшить размеры рассчитываемых атомарных структур борофен/GaN и борофен/ZnO. Целью настоящей работы является изучение методами *ab initio* возможности управления электронными свойствами ван-дер-ваальсовых гетероструктур борофен/GaN и борофен/ZnO с помощью механической деформации.

1. Методы исследования

Исследование проводилось в рамках теории функционала плотности (DFT), реализованной в программном пакете SIESTA 4.1.5 [26]. Для описания обменно-корреляционных эффектов использовалось приближение обобщенного градиента (GGA) в параметризации Пердю, Бурке и Эрнзерхофа (PBE) [27]. Ван-дер-ваальсовое взаимодействие между слоями гетероструктуры учитывалось путем добавления дисперсионного корректирующего члена к полной энергии в рамках схемы коррекции Гримма DFT-D2 [28]. При оптимизации геометрических параметров структуры использовался базисный набор валентно-расщепленных орбиталей DZP, включающий в себя поляризационные функции. В ходе оптимизации варьировались не только координаты атомов, но и векторы трансляции суперъячеек. Релаксация структуры проводилась до тех пор, пока все компоненты сил, действующих на атомы, не становились меньше 10^{-4} eV/Å. Для исключения влияния слоев гетероструктуры друг на друга в не периодичном направлении величина вакуумного промежутка составляла не менее 20 Å. Энергия отсечки устанавливалась равной 300 Ry. Для решения проблемы недооценки ширины запрещенной зоны материала использовалась полуэмпирическая схема LDA/GGA+U в модификации Дударева и др. [29].

2. Атомная структура суперъячеек гетероструктур борофен/GaN и борофен/ZnO

Процесс построения прямоугольных суперъячеек квази-2D гетероструктур борофен/GaN и борофен/ZnO происходил следующим образом. Элементарные ячейки графеноподобных монослоев GaN и ZnO были взяты из базы данных открытого доступа Materials Project [30]. Исходные векторы трансляции ячеек составляли $L_x = 3.20$ Å и $L_y = 5.55$ Å для обеих 2D-структур. При построении элементарной ячейки гофрированного борофена с треугольной кристаллической решеткой

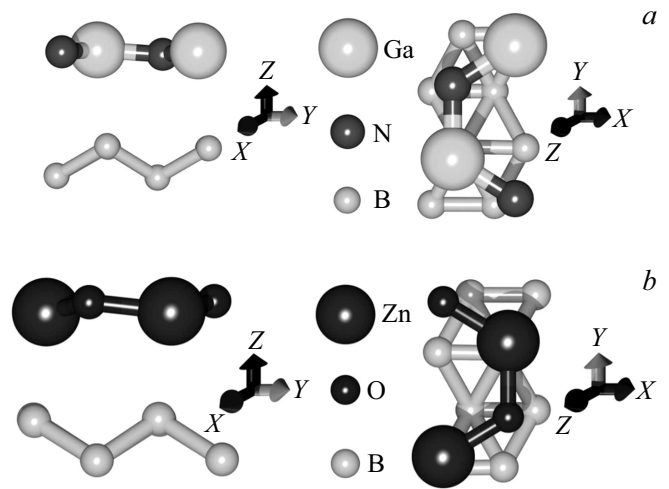


Рис. 1. Атомная структура прямоугольных суперъячеек ван-дер-ваальсовых квази-2D гетероструктур борофен/GaN (a) и борофен/ZnO (b). Слева на рисунке показан вид суперъячеек в плоскости YZ, справа показан вид суперъячеек в плоскости XY. Трансляция суперъячеек осуществлялась вдоль осей X и Y.

использовались данные работы [31]. Векторы трансляции элементарной ячейки гофрированного борофена с треугольной кристаллической решеткой составляли $L_x = 1.61$ Å; $L_y = 2.86$ Å. Далее осуществлялось наложение описанных выше элементарных ячеек монослоев борофена и GaN для формирования прямоугольной суперъячейки гетероструктуры борофен/GaN и элементарных ячеек монослоев борофена и ZnO для формирования прямоугольной суперъячейки гетероструктуры борофен/ZnO. После этого проводилась оптимизация атомной структуры суперъячеек, в ходе которой варьировались не только координаты атомов, но и векторы трансляции. Целевой функцией выступала полная энергия. Полученные в результате оптимизации атомные конфигурации суперъячеек представлены на рис. 1. Векторы трансляции суперъячейки борофен/GaN составили $L_x = 3.35$ Å и $L_y = 6.10$ Å, для борофен/ZnO — $L_x = 3.28$ Å и $L_y = 5.83$ Å. Расстояние между слоями борофена и GaN по оси Z составило 2.91 Å, между слоями борофена и ZnO — 2.51 Å.

Построенные суперъячейки прошли проверку на термодинамическую устойчивость, которая оценивалась по величине энергии связи (разность полной энергии гетероструктуры и полной энергии составляющих ее монослоев). Для гетероструктуры борофен/GaN энергия связи составляет ~ -50 meV/atom, для гетероструктуры борофен/ZnO ~ -80 meV/atom. Отрицательные значения энергии связи свидетельствуют о том, что исследуемые гетероструктуры являются стабильными по энергии. Следует отметить, что по величине энергии связи гетероструктуры борофен/GaN и борофен/ZnO превосходят янус-подобные гетероструктуры MoSSe/GaN в 2 раза [32] и гетероструктуры ZnO/GeC в 6 раз [33].

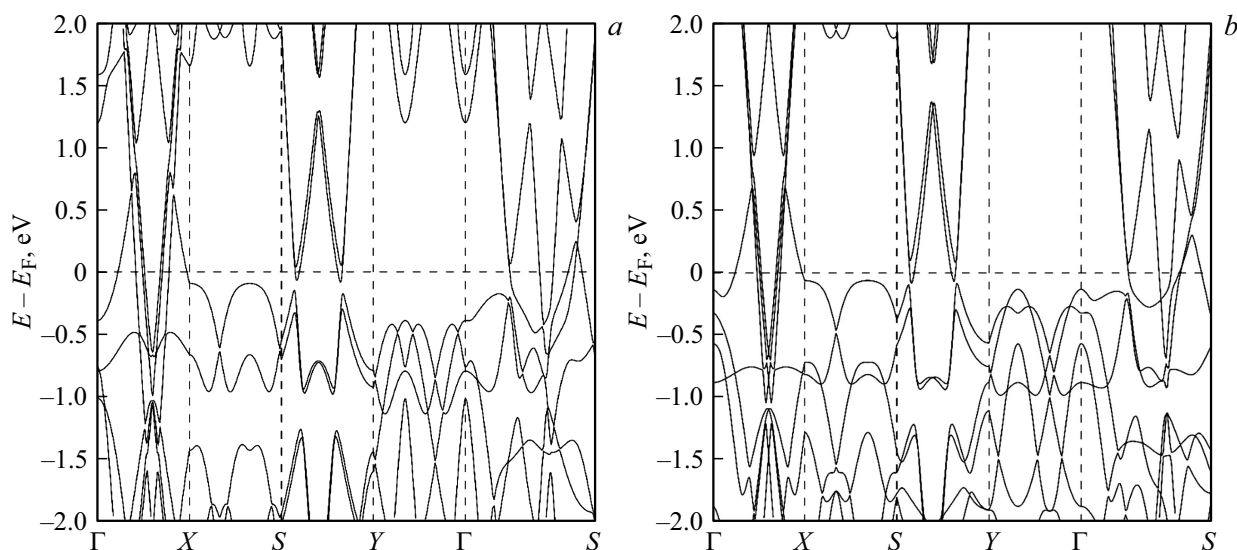


Рис. 2. Фрагменты зонной структуры вблизи уровня Ферми (смещен в 0 eV) ван-дер-ваальсовых гетероструктур борофен/GaN (a) и борофен/ZnO (b).

3. Электронные свойства гетероструктур борофен/GaN и борофен/ZnO

Для построенных суперъячеек ван-дер-ваальсовых гетероструктур борофен/GaN и борофен/ZnO была рассчитана зонная структура, фрагмент которой вблизи уровня Ферми (смещен в 0 eV) показан на рис. 2. Для отображения выбран именно такой интервал энергий, поскольку электронные состояния вблизи уровня Ферми вносят определяющий вклад в электронные свойства материала. Зона Бриллюэна представляла собой прямоугольник. Выбранная траектория обхода зоны была $\Gamma-X-S-Y-\Gamma-S$. Из рис. 2 видно, что обе гетероструктуры не имеют энергетической щели между валентной зоной и зоной проводимости.

Для того чтобы объяснить отмеченные выше особенности электронного строения ван-дер-ваальсовых гетероструктур борофен/GaN и борофен/ZnO, для них был выполнен анализ распределений полной (TDOS) и частичной плотностей электронных состояний (PDOS). Рассчитанные распределения TDOS и PDOS представлены на рис. 3. Согласно данным рис. 3, a, для гетероструктуры борофен/GaN основной вклад в формирование электронных состояний в валентной зоне (левее 0 eV) вносят незаполненные $2p$ -орбитали атомов азота, в то время как формирование электронных состояний в зоне проводимости обусловлено вкладом незаполненных $2p$ -орбиталей атомов бора. Аналогично на рис. 3, b можно увидеть, что для гетероструктуры борофен/ZnO основной вклад в формирование электронных состояний валентной зоны вносят незаполненные $2p$ -орбитали атомов азота, а в формирование электронных состояний зоны проводимости — незаполненные $2p$ -орбитали атомов бора. Таким образом, можно заключить, что борофен

вносит определяющий вклад в формирование зоны проводимости гетероструктур борофен/GaN и борофен/ZnO, объясняя их бесщелевой характер.

Проанализировав данные о закономерностях электронного строения исходных конфигураций ван-дер-ваальсовых гетероструктур борофен/GaN и борофен/ZnO, мы перешли к выявлению способов управления их электронными свойствами, в том числе к изучению возможности открытия энергетической щели в зонной структуре. В качестве таких способов были рассмотрены различные виды механических деформаций, а именно одноосное и двухосное растяжение/сжатие, часто встречающиеся в реальном эксперименте. Были рассмотрены случаи деформации одноосного сжатия и растяжения (вдоль оси Y) на 0–14%, деформации двухосного сжатия и растяжения (вдоль осей X и Y) на 1–10%. Выбранные интервалы деформации обусловлены вычислительной сложностью квантовых расчетов, проводимых для исследуемых гетероструктур. При этом не ставилась задача определить их пределы прочности на растяжение/сжатие.

Для гетероструктуры борофен/GaN было обнаружено, что энергетическая щель между валентной зоной и зоной проводимости открывается в случаях одноосного сжатия на 14% и двухосного сжатия на 4%. Размер щели в первом случае составляет 0.028 eV, во втором — 0.018 eV. Для объяснения причины открытия энергетической щели у гетероструктуры борофен/GaN в указанных случаях деформации на рис. 4 приведены графики PDOS. Видно, что в распределении DOS $2s$ - и $2p$ -орбиталей атомов бора, $2s$ - и $2p$ -орбиталей атомов азота и $4s$ - и $4p$ -орбиталей атомов Ga на уровне Ферми электронные состояния отсутствуют. Именно это является причиной открытия энергетической щели в зонной структуре. Открытие энергетической щели в

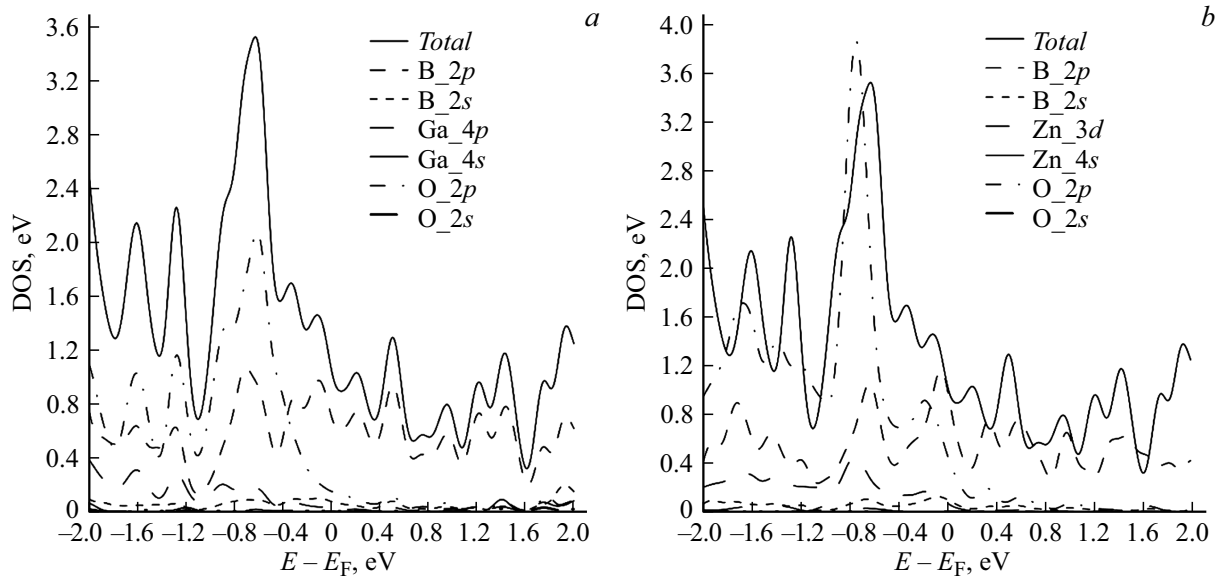


Рис. 3. Графики полной и парциальной DOS ван-дер-ваальсовых квази-2D гетероструктур борофен/GaN (a) и борофен/ZnO (b) вблизи уровня Ферми (смещен в 0 eV).

зонной структуре гетероструктуры борофен/ZnO было обнаружено для случаев одноосного растяжения на 10% и двухосного сжатия в 6%. В первом случае величина открывшейся энергетической щели составляет 0.063 eV. Рассчитанные распределения PDOS для этого случая (рис. 5, a) показали, что DOS всех орбиталей атомов борофена и атомов ZnO имеют нулевую плотность состояний вблизи уровня Ферми. Следовательно, каждая орбиталь вносит свой вклад в открытие энергетической щели между зонами. Во втором случае величина щели составляет 0.012 eV. Результаты расчета PDOS наглядно продемонстрировали (рис. 5, b), что при такой величине двухосного сжатия нулевая DOS присутствует в распределениях PDOS *s*- и *p*-орбиталей атомов бора и азота, а также *s*- и *d*-орбиталей атомов цинка.

Чувствительность электронного строения исследуемых гетероструктур к деформациям также отслеживалась по изменению положения уровня Ферми. В отсутствие деформации уровень Ферми составляет -5.25 eV для гетероструктуры борофен/GaN и -5.90 eV для гетероструктуры борофен/ZnO. При одноосном сжатии уровень Ферми гетероструктуры борофен/GaN меняется скачкообразно: при сжатии до 8% смещается вниз (в сторону валентной зоны) по оси энергий на максимальную величину 0.06 eV, при сжатии до 14% смещается вверх (в сторону зоны проводимости) по оси энергий на максимальную величину 0.1 eV. В диапазоне небольших деформаций (1–6%) уровень Ферми остается неизменным. При одноосном растяжении уровень Ферми сохраняет тенденцию к смещению вверх по оси энергий, изменяясь на 0.1 eV при 12% растяжении. Для гетероструктуры борофен/ZnO при одноосном сжатии уровень Ферми смещается вниз по оси энергий на протяжении всего рассматриваемого интервала деформаций, причем при

сжатии на 14% величина сдвига составляет 0.92 eV. При одноосном растяжении, напротив, уровень Ферми смещается вверх по оси энергии. Максимальная величина сдвига на 0.3 eV достигается при 12% растяжении. При двухосных деформациях растяжения/сжатия изменения в положении уровня Ферми еще более заметны, чем при одноосных. Для гетероструктуры борофен/GaN и при двухосном растяжении, и при двухосном сжатии уровень Ферми смещается вниз по оси энергий: при растяжении максимальный сдвиг составляет 0.3 eV, при сжатии — 0.2 eV. Для гетероструктуры борофен/ZnO при двухосных деформациях наблюдаются те же закономерности изменения положения уровня Ферми, что и в случае одноосных деформаций. При двухосном сжатии уровень Ферми смещается влево по оси энергий, причем максимальная величина сдвига составляет 1 eV (при 8% сжатии). При двухосном растяжении уровень Ферми смещается по оси энергии вправо на максимальную величину 0.6 eV при 10% растяжении.

Разная чувствительность электронного строения гетероструктур борофен/GaN и борофен/ZnO к одним и тем же видам осевых деформаций может быть объяснена следующими причинами: 1) разницей в расстояниях по оси *Z* между монослоями в составе суперъячеек ван-дер-ваальсовых гетероструктур; 2) различиями в характерных особенностях зонной структуры монослоев GaN и ZnO. Меньшее расстояние между борофеном и ZnO вызывает более заметные изменения атомной структуры монослоя ZnO в составе гетероструктуры борофен/ZnO по сравнению с изменениями атомной структуры монослоя GaN в составе гетероструктуры борофен/GaN. В частности, у монослоев GaN и ZnO сильно различается величина двугранных углов: у GaN она отрицательная и составляет -7.21° , а у ZnO она

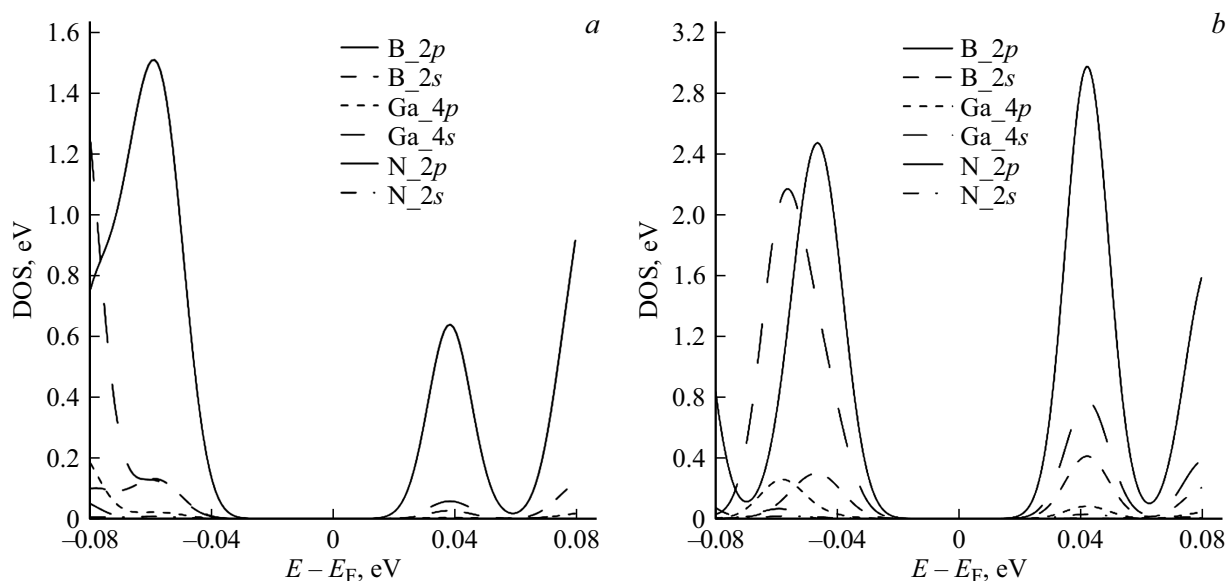


Рис. 4. График парциальной DOS вблизи уровня Ферми (смещен в 0 eV) для ван-дер-ваальсовой квази-2D гетероструктуры борофен/GaN при одноосном сжатии на 14% (a) и двухосном сжатии на 4% (b).

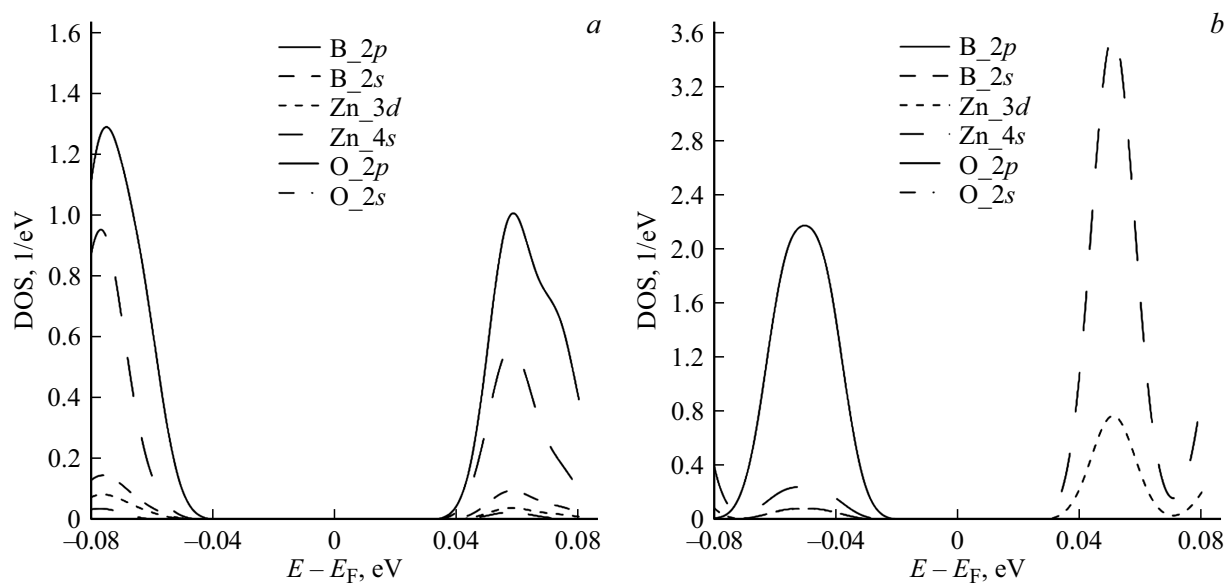


Рис. 5. График парциальной DOS вблизи уровня Ферми (смещен в 0 eV) для ван-дер-ваальсовой квази-2D гетероструктуры борофен/ZnO при одноосном растяжении на 10% (a) и двухосном сжатии на 6% (b).

положительная и составляет 19.18. Зонная структура графеноподобного GaN имеет непрямую запрещенную зону, а графеноподобного ZnO — прямую запрещенную зону, различающиеся значениями величины энергетического зазора между валентной зоной и зоной проводимости [34].

С целью выявления перспектив потенциального применения исследуемых ван-дер-ваальсовых гетероструктур борофен/GaN и борофен/ZnO, реализующих контакт типа металл–полупроводник, в устройствах нанoeлектроники были рассчитаны высоты барьера Шоттки p -типа для дырок и барьера Шоттки n -типа для электро-

нов. Согласно подходу, изложенному в работах [35,36], барьеры Шоттки для дырок или электронов определяются как разность энергий между уровнем Ферми и максимумом валентной зоны или минимумом зоны проводимости гетероструктур соответственно. Проведенная в рамках данного подхода численная оценка показала, что величины барьеров Шоттки для дырок (ϕ_h) и электронов (ϕ_e) для гетероструктуры борофен/GaN составили 0.43 и 1.04 eV соответственно, для гетероструктуры борофен/ZnO — 0.15 и 0.95 eV соответственно. Возможность управления величиной барьера Шоттки за счет деформации была проверена путем вычислений ϕ_h и ϕ_e

Барьеры Шоттки для дырок ϕ_h и электронов ϕ_e исследуемых ван-дер-ваальсовых гетероструктур при одноосной и двухосной деформации сжатия и растяжения

Тип гетероструктуры	Вид деформации	ϕ_h , eV	ϕ_e eV
Борофен/GaN	Одноосное сжатие 14%	0.38	0.87
Борофен/GaN	Одноосное растяжение 6%	0.29	1.11
Борофен/ZnO	Одноосное сжатие 12%	0.08	0.67
Борофен/ZnO	Одноосное растяжение 10%	0.41	1.03
Борофен/GaN	Двухосное сжатие 4%	0.19	1.01
Борофен/GaN	Двухосное растяжение 6%	0.31	0.89
Борофен/ZnO	Двухосное сжатие 6%	0.47	0.84
Борофен/ZnO	Двухосное растяжение 10%	0.23	1.10

для деформированных гетероструктур борофен/GaN и борофен/ZnO. Расчеты проводились для рассмотренных случаев максимальной и минимальной одноосной и двухосной деформаций растяжения и сжатия, а также для тех случаев деформации, при которых в зонной структуре ван-дер-ваальсовых гетероструктур открывалась энергетическая щель между валентной зоной и зоной проводимости. Полученные результаты расчета приведены в таблице.

На основе расчетных данных было установлено, что для гетероструктуры борофен/GaN удалось добиться максимального снижения величины барьера Шоттки ϕ_h до 0.19 eV в случае двухосной деформации сжатия на 4% и величины барьера Шоттки ϕ_e до 0.87 eV в случае одноосной деформации сжатия на 14%. Для гетероструктуры борофен/ZnO удалось добиться максимального снижения величины барьера Шоттки ϕ_h до 0.08 eV и величины барьера Шоттки ϕ_e до 0.67 eV в случае одноосной деформации сжатия на 12%. Сравнение полученных значений барьеров Шоттки с показателями ван-дер-ваальсовых гетероструктур на основе борофена и дихалькогенидов переходных металлов [19] показало, что деформированные гетероструктуры борофен/GaN и борофен/ZnO превосходят по обоим показателям (ϕ_h и ϕ_e) такие гетероструктуры, как борофен β_{12}/MoS_2 , борофен β_{12}/MoSe_2 , борофен β_{12}/WS_2 , борофен β_{12}/WSe_2 .

Заключение

Таким образом, на основе результатов первопринципных расчетов установлено, что из двух рассмотренных видов двухосной деформации более эффективной для управления электронными свойствами исследуемых ван-дер-ваальсовых гетероструктур является деформация двухосного сжатия. Выявлено, что для появления энергетической щели в электронной структуре гетероструктур борофен/GaN и борофен/ZnO необходимо, чтобы нулевая плотность электронных состояний вбли-

зи уровня Ферми присутствовала в распределениях DOS электронных орбиталей и атомов борофена, и атомов GaN/ZnO. При этом определяющий вклад в распределение DOS гетероструктуры борофен/GaN вносят электронные p -орбитали атомов бора и азота, а в распределение DOS гетероструктуры борофен/ZnO — электронные p -орбитали атомов бора и кислорода. На основе полученных результатов расчета высоты барьера Шоттки для дырок и электронов можно прогнозировать, что рассмотренные конфигурации квази-2D гетероструктур борофен/GaN и борофен/GaN с электронными свойствами, настраиваемыми путем деформации растяжения/сжатия, могут быть перспективным материалом нано- и оптоэлектроники, в том числе для устройств с барьером Шоттки.

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] A.K. Geim, I.V. Grigorieva. Nature, **499**, 419 (2013). DOI: 10.1038/nature12385
- [2] K.S. Novoselov, A. Mishchenko, A. Carvalho, A.H. Castro Neto. Science, **353**, aac9439 (2016). DOI: 10.1126/science.aac94
- [3] X. Kong, Q. Liu, C. Zhang, Z. Peng, Q. Chen, Chem. Soc. Rev., **46**, 2127 (2017). DOI: 10.1039/C6CS00937A
- [4] J. Yao, G. Yanga. J. Appl. Phys., **131**, 161101 (2022). DOI: 10.1063/5.0087503
- [5] Y. Liu, N.O. Weiss, X. Duan, H.-C. Cheng, Y. Huang, X. Duan. Nat. Rev. Mater., **1**, 16042 (2016). DOI: 10.1038/natrevmats.2016.42

- [6] W. Ahmad, L. Pan, K. Khan, L. Jia, Q. Zhuang, Z. Wang. *Adv. Funct. Mater.*, **33**, 2300686 (2023). DOI: 10.1002/adfm.202300686
- [7] S. Zhang, M. Maruyama, S. Okada, M. Xue, K. Watanabe, T. Taniguchi, K. Hashimoto, Y. Miyata, R. Canton-Vitoriaa, R. Kitaura, *Nanoscale*, **15**, 5948 (2023). DOI: 10.1039/D2NR06616E
- [8] Z. Kang, Y. Ma, X. Tan, M. Zhu, Z. Zheng, N. Liu, L. Li, Z. Zou, X. Jiang, T. Zhai, Y. Gao. *Adv. Electron. Mater.*, **3**, 1700165 (2017). DOI: 10.1002/aelm.201700165
- [9] 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
- [10] H.-L. Hou, C. Anichini, P. Samori, A. Criado, M. Prato. *Adv. Funct. Mater.*, **32**, 2207065 (2022). DOI: 10.1002/adfm.202207065
- [11] 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. Yacamán, A. Ponce, A.R. Oganov, M.C. Hersam, N.P. Guisinger. *Science*, **350**, 1513 (2015). DOI: 10.1126/science.aad1080
- [12] M.G. Cuxart, K. Seufert, V. Chesnyak, W.A. Waqas, A. Robert, M.L. Bocquet, G.S. Duesberg, H. Sachdev, W. Auwärter. *Sci. Adv.*, **7**, eabk1490 (2021). DOI: 10.1126/sciadv.abk1490
- [13] P. Ranjan, J.M. Lee, P. Kumar, A. Vinu. *Adv. Mater.*, **32**, e2000531 (2020). DOI: 10.1002/adma.202000531
- [14] Y.V. Kaneti, D.P. Benu, X. Xu, B. Yuliarto, Y. Yamauchi, D. Golberg. *Chem. Rev.*, **122**, 1000 (2022). DOI: 10.1021/acs.chemrev.1c00233
- [15] D.J. Joshi, N.I. Malek, S.K. Kailasa. *New J. Chem.*, **46**, 4514 (2022). DOI: 10.1039/D1NJ05271C
- [16] A. Rahman, M.T. Rahman, M.A. Chowdhury, S.B. Ekram, M.M. Kamal Uddin, Md.R. Islam, L. Dong. *Sens. Actuator A Phys.*, **359**, 114468 (2023). DOI: 10.1016/j.sna.2023.114468
- [17] 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
- [18] 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
- [19] N. Katoch, A. Kumar, R. Sharma, P.K. Ahluwalia, J. Kumar. *Phys. E: Low-Dimens. Syst. Nanostructures*, **2020**, 120, 113842. DOI: 10.1016/j.physe.2019.113842
- [20] C. Hou, G. Tai, B. Liu, Z. Wu, Y. Yin. *Nano Res.*, **14**, 2337 (2021). DOI: 10.1007/s12274-020-3232-8
- [21] J. Shen, Z. Yang, Y. Wang, L.-C. Xu, R. Liu, X. Liu. *J. Phys. Chem. C*, **125**, 427 (2021). DOI: 10.1021/acs.jpcc.0c08580
- [22] K. Vishwakarma, S. Rani, S. Chahal, C.Y. Lu, S.J. Ray, C.-S. Yang, P. Kumar. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **24**, 12816 (2022). DOI: 10.1039/D2CP01712A
- [23] Z. Zhang, E.S. Penev, B.I. Yakobson. *Chem. Soc. Rev.*, **46**, 6746 (2017). DOI: 10.1039/C7CS00261K
- [24] S. Zhang, A. Hu, Q. Liu, L. Xu, X. Ren, B. Wang, Y. Ren, W. Liu, X. Zhou, S. Chen, X. Guo. *Adv. Electron. Mater.*, **9**, 2300243 (2023). DOI: 10.1002/aelm.202300243
- [25] A. Kumar, A. Varghese, V. Janyani. *J. Mater. Sci.: Mater. Electron.*, **33**, 3880 (2022). DOI: 10.1007/s10854-021-07578-8
- [26] J.M. Soler, E. Artacho, J.D. Gale, A. García, J. Junquera, P. Ordejón, D. Sánchez-Portal. *J. Phys.: Condens. Matter.*, **14**, 2745 (2002). DOI: 10.1088/0953-8984/14/11/302
- [27] 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
- [28] S. Grimme. *J. Comput. Chem.*, **27**, 1787 (2006). DOI: 10.1002/jcc.20495
- [29] 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
- [30] *The Materials Project*. Электронный ресурс. Режим доступа: URL: <https://materialsproject.org/>
- [31] B. Peng, H. Zhang, H. Shao, Z. Ning, Y. Xu, G. Ni, H. Lu, D.W. Zhang, H. Zhu. *Mater. Res. Lett.*, **5**, 399 (2017). DOI: 10.1080/21663831.2017.1298539
- [32] M. Idrees, C.V. Nguyen, H.D. Bui, I. Ahmad, B. Amin. *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **22**, 20704 (2020). DOI: 10.1039/D0CP03434G
- [33] X. Gao, Y. Shen, Y. Ma, S. Wu, Z. Zhou. *J. Mater. Chem. C*, **7**, 4791 (2019). DOI: 10.1039/C9TC00423H
- [34] H. Xiang, H. Quan, Y. Hu, W. Zhao, B. Xu, J. Yin. *J. Inorg. Mater.*, **36**, 492 (2021). DOI: 10.15541/jim20200346
- [35] R.T. Tung. *Appl. Phys. Rev.*, **1**, 011304 (2014). DOI: 10.1063/1.4858400
- [36] F. Zhang, W. Li, Y. Ma, Y. Tang, X. Dai, RSC Adv., **7**, 29350 (2017). DOI: 10.1039/C7RA00589J