# 08 Адсорбция органической макромолекулы на свободном и эпитаксиальном графене со щелью в электронном спектре

© С.Ю. Давыдов,<sup>1</sup> О.В. Посредник<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН, 194021 Санкт-Петербург, Россия <sup>2</sup>Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет (ЛЭТИ), 197022 Санкт-Петербург, Россия e-mail: Sergei\_Davydov@mail.ru

Поступило в Редакцию 14 октября 2024 г. В окончательной редакции 14 октября 2024 г. Принято к публикации 14 октября 2024 г.

Контакт органической макромолекулы со свободным и эпитаксиальным графеном, имеющим щель в электронном спектре, рассмотрен в рамках ранее предложенных модели оборванных связей с энергией  $\varepsilon_i$  и модели HOMO-LUMO (higher occupied and lower unoccupied molecular orbital). Основное внимание уделено локальным состояниям в щели, возникающим вследствие адсорбции макромолекулы, для энергии которых и чисел заполнения получены аналитические выражения. В качестве подложки для графена рассмотрены политипы SiC. Обсуждена возможность использования щелевого графена в резистивных биосенсорах.

Ключевые слова: макромолекула, щелевой графен, политипы SiC, локальные состояния.

DOI: 10.61011/JTF.2025.03.59862.324-24

### Введение

В связи с растущим в последние годы интересом к биосенсорам в работе [1] была предложена модель адсорбции (адгезии) органической макромолекулы (MM) на идеальном (бесщелевом) однолистном графене (SLG). В рамках предложенной в [1] модели оборванных связей (DBM — dangling bond model) предполагалось, что взаимодействие MM с SLG осуществляется оборванными молекулярными связями фрагментов MM, граничащих с SLG, или сшивками. В рамках DBM удалось оценить переход заряда между MM и SLG, что, в свою очередь, позволило оценить энергию адсорбции (адгезии) MM на SLG. Здесь мы рассмотрим связь MM-SLG и как наличие щели в электронном спектре SLG влияет на переход заряда между MM и графеновой подложкой.

Рассмотрим адсорбции MM на свободном щелевом графене (gapped graphene) в рамках DBM. Щель в свободном SLG можно открыть, приложив к графеновому листу внешнее механическое напряжение [2]. Затем перейдем к эпитаксиальному графену, щель в спектре которого наводит полупроводниковая подложка [3] и рассмотрим адсорбцию MM в модели HOMO-LUMO (higher occupied and lower unoccupied molecular orbital) [4].

Построенная таким образом структура полупроводниковый субстрат-SLG-MM представляет собой модель биосенсора в исходном состоянии, когда тестируемая биомолекула еще не приведена в контакт с MM [5]. Сигналом детектирования резистивного сенсора служит вызванное тестируемой биомолекулой изменение тока, текущего вдоль SLG. Воспользовавшись аналитической теорией работы биосенсора на основе бесщелевого графена [5], кратко обсудим, к каким последствиям приводит наличие щели, хотя априорно ясно, что проводимость бесщелевого графена носит металлический характер, тогда как в случае щелевого графена проводимость имеет активационный (полупроводниковый) характер.

# 1. Макромолекула на свободном щелевом графене в моделе DBM

Начнем с рассмотрения MM, адсорбированной на свободном щелевом графене (free-standing gapped graphene), представив гамильтониан такой системы в виде

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{gap}(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}}^{+} c_{\mathbf{k}} \sum_{i} \varepsilon_{i} a_{i}^{+} a_{i}$$
$$+ \sum_{i,\mathbf{k}} \frac{V_{i}^{2}(c_{\mathbf{k}}^{+} a_{i} + a_{i}^{+} c_{\mathbf{k}})}{\omega - \varepsilon_{SLG}(\mathbf{k}) + i0^{+}}, \qquad (1)$$

где закон дисперсии  $\varepsilon_{gap}(\mathbf{k})$  в низкоэнергетическом приближении имеет вид

$$\varepsilon_{gap}(\mathbf{k}) = \pm \sqrt{\Delta^2 + (3tka/2)^2},\tag{2}$$

2 $\Delta$  — ширина щели, **k** — волновой вектор, отсчитываемый от волнового вектора точки Дирака, которой приписывается энергия  $\varepsilon_D = 0$ , t — энергия перескока электрона между ближайшими соседями в графене, находящимися на расстоянии a = 1.42 Å.  $\varepsilon_i$  — энергия *i*-й



**Рис. 1.** Энергетическая диаграмма адсорбции MM на щелевом графене ( $\varepsilon_i$  — энергия *i*-й оборванной связи MM,  $\varepsilon_D$  — энергия точки Дирака, 2 $\Delta$  — ширина щели, дисперсия  $\varepsilon_{gap}(k)$  изображена для  $k \leq 0$ ).

оборванной связи ММ [1],  $V_i$  — энергия взаимодействия *i*-ой связи с графеном,  $c_{\mathbf{k}}^+(c_{\mathbf{k}})$  — оператор рождения (уничтожения) электрона SLG в состоянии  $|\mathbf{k}\rangle$ ,  $a_i^+(a_i)$  аналогичные операторы для *i*-й оборванной связи. При  $ka \ll 2\Delta/3t \sim 0.1$  (см. ниже) спектр (2) принимает параболический вид  $\varepsilon_{gap}(\mathbf{k}) \approx \pm \Delta \pm h^2 k^2/2m^*$ , где эффективная масса  $m^* = 4\hbar^2 \Delta/(3ta)^2$ ,  $\hbar$  — приведенная постоянная Планка. Рассматриваемую ситуацию иллюстрирует рис. 1.

Вследствие адсорбции плотность состояний (DOS) электрона на *i*-й связи (на одну проекцию спина) равна

$$\rho_i^{gap}(\omega) = \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma_i^{gap}(\omega)}{(\omega - \varepsilon_i - \Lambda_i^{gap}(\omega))^2 + (\Gamma_i^{gap}(\omega))^2}.$$
 (3)

Здесь  $\omega$  — энергетическая переменная, функции уширения *i*-го квазиуровня равна  $\Gamma_i^{gap}(\omega) = \pi V_i^2 \rho_{gap}(\omega)$ , а соответствующая функция сдвига  $\Lambda_i^{gap}(\omega)$  является гильберт-трансформантой функции  $\Gamma_i^{gap}(\omega)$ , где DOS щелевого графена  $\rho_{gap}(\omega)$ , согласно Приложению 2 работы [1], имеет вид

$$\rho_{gap}(\omega) = \begin{cases} \frac{2|\omega|}{\xi^2}, & \sqrt{\xi^2 + \Delta^2} \ge |\omega| \ge \Delta, \\ 0, & |\omega| < \Delta, & |\omega| > \sqrt{\xi^2 + \Delta^2}, \end{cases}$$
(4)

так что функция сдвига есть

$$\Lambda_i^{gap}(\omega) = \frac{2V_i^2}{\xi^2} \,\omega \ln \left| \frac{\omega^2 - \Delta^2}{\omega^2 - \Delta^2 - \xi^2} \right| \tag{5}$$

и  $\xi = \sqrt{2\pi}\sqrt{3}t$  — энергия обрезания. При  $\Delta = 0$  выражения (4) и (5) переходят в формулы (4) и (5) работы [1], где  $\xi^2 = \xi^2/2$ . При нулевой температуре

число заполнения *i*-й изначально оборванной связи представляет собой сумму

$$n_i^{gap} = (n_i^{gap})_{band} + (n_i^{gap})_{loc}$$

$$\tag{6}$$

вклада валентной і-зоны графена

$$(n_i^{gap})_{band} = 2 \int_{-\sqrt{\xi^2 + \Delta^2}}^{-\Delta} \rho_i^{gap}(\omega) d\omega$$
(7)

и вклада находящегося в щели локального уровня, энергия которого определяется из уравнения

$$\varepsilon_i^{loc} = \varepsilon_i + \Lambda_i^{gap}(\varepsilon_i^{loc}), \tag{8}$$

равного

$$(n_i^{gap})_{loc} = v_i^{loc} \Theta(\mu - \varepsilon_i^{loc}),$$
  
$$v_i^{loc} = 2 \left| 1 - \frac{d\Lambda_i^{gap}(\omega)}{d\omega} \right|_{\varepsilon_i'}^{-1},$$
 (9)

где  $\Theta(\ldots)$  — функция Хэвисайда,  $\nu_i^{loc}$  — фактор заполнения,  $\mu$  — химический потенциал. Легко показать, что

$$\frac{d\Lambda_i^{gap}(\omega)}{d\omega} = \frac{2V_i^2}{\xi^2} \left[ \ln \left| \frac{\omega^2 - \Delta^2}{\omega^2 - \Delta^2 - \xi^2} \right| + \frac{2\omega^2 \xi^2}{(\omega^2 - \Delta^2)(\omega^2 - \Delta^2 - \xi^2)} \right].$$
(10)

Отметим, что в [17] подробно рассматривалась адсорбция на бинарных графеноподобных соединениях (GLC) типа  $A_N B_{8-N}$ . Так как GLC отличаются от щелевого графена только природой щели (полуширина которой равна  $\Delta_{AB} = |\varepsilon_A - \varepsilon_B|/2$ , где  $\varepsilon_{A(B)}$  — энергия *p*-орбитали атома A(B)), то из сравнения результатов [12,17] следует, что главное отличие щелевого графена от бесщелевого состоит в наличие локальных состояний, энергия которых определяется из уравнения (8), графическое решение которого представлено на рис. 1, *b* работы [17]). В [17] (см. рис. 2–4) приведен также подробный анализ чисел заполнения при вариации параметров задачи. Здесь мы ограничимся только порядковыми оценками.

Так как  $t \sim 3 \text{ eV}$  и  $\xi \sim 10 \text{ eV}$ , то, как следует из табл. 2 обзора [3], для графена в подавляющем числе случаев  $\Delta^2/\xi^2 \ll 1$ . Тогда легко показать, что зонные вклады в числа заполнения оборванных связей для щелевого и бесщелевого графенов совпадают с точностью  $\sim \Delta^2/\xi^2$ . При  $\Delta^2/\xi^2 \ll 1$  и  $\omega^2 < \Delta^2$  для функции сдвига вместо (5) имеем  $\Lambda_i^{gap} \approx -(2V_i^2\omega/\xi^2) \ln[\xi^2/(\Delta^2-\omega^2)]$ . Что же касается локальных состояний, то при тех же условиях  $d\Lambda_i^{gap}/d\omega \approx -(2V_i^2/\xi^2) \left[\ln[\xi^2/(\Delta^2-\omega^2)] + 2\omega^2/(\Delta^2-1\omega^2)\right]$ . На рис. 2 приведены типичные зависимости  $\varepsilon_i^{loc}(\varepsilon_i)$  и  $\nu_i^{loc}(\varepsilon_i)$ . Легко показать, что при  $\varepsilon_i \to \varepsilon_D$  имеем  $\varepsilon_i^{loc} \to -(2V_i^2/\xi^2) \ln(\xi^2/\Delta^2)$  и  $\nu_i^{loc} \to (\nu_i^{loc})_{max} = 2[1 + (2V_i^2/\xi^2) \ln(\xi^2/\Delta^2)]^{-1}$ ; при  $\varepsilon_i \to \pm \infty$  получаем  $\varepsilon_i^{loc} \to \mp \Delta$  и  $\nu_i^{loc} \to 0$ . Таким



**Рис. 2.** Свободный графен: зависимости приведенной энергии *i*-го локального состояния  $\overline{\varepsilon}_i^{loc} = \varepsilon_i^{loc}/\Delta$  и множителя  $\nu_i^{loc}$  от приведенной энергия *i*-й оборванной связи  $\overline{\varepsilon}_i = \varepsilon_i/\Delta$ .

образом, именно заполнение локальных уровней  $\varepsilon_i^{loc}$  будет определять различие перехода заряда в системах ММ-щелевой графен и ММ-бесщелевой графен (см. подробнее [17]).

## 2. ММ на эпитаксиальном графене. Модель HOMO-LUMO

Перейдем теперь к ММ, адсорбированной на эпитаксиальном щелевом графене, или щелевом эпиграфене (gapped epigraphene). В задаче об эпитаксиальных GLC на полупроводниках [7] получено точное выражение для DOS (справедливое и для щелевого графена), которое, однако, вследствие своей громоздкости, неудобно для последующего анализа. Поэтому прибегнем к ряду упрощений.

В качестве DOS полупроводниковой подложки  $\rho_{sub}(\omega)$  примем модель Халдейна-Андерсона [8]:

$$\rho_{sub}(\Omega) = \begin{cases} \rho_{sc}, & |\Omega| \ge E_g/2, \\ 0, & |\Omega| < E_g/2, \end{cases}$$
(11)

где  $\rho_{sc} = \text{const}$ ,  $\Omega = \omega - \omega_0$ ,  $\omega_0$  — энергия центра запрещенной зоны шириной  $E_g$  (табл. 1), в результате чего получаем для электронных состояний щелевого графена функции уширения  $\Gamma_{sub}(\omega) = \pi V^2 \rho_{sc}$ при  $|\Omega| \ge E_g/2$ ,  $\Gamma_{sub}(\omega) = 0$  при  $|\Omega| \le E_g/2$  и сдвига  $\Lambda_{sub}(\Omega) = \rho_{sc} V^2 \ln |(\Omega - E_g/2)/(\Omega + E_g/2)|$ , где V матричный элемент связи графена с подложкой. Система щелевой графен-полупроводниковый субстрат представляют собой гетеропереходы, энергетические диаграммы которых представлены на рис. 4.27 в работе [9]. По данным [10–13] для графена на поверхности 4*H* и 6*H* политипов SiC, ширина щели наведенной подложкой составляет десятые доли eV. Максимальная щель ~ 1.5 eV имеет место при контакте SLG с гексагональным двумерным нитридом бора h-BN. Таким образом, и в случае эпиграфена мы можем, как и выше, считать  $\Delta^2/\xi^2 \ll 1$ . Полученные в [14] значения  $\omega_0$  и энергии смещенной (за счет взаимодействия с субстратом) точки Дирака  $\varepsilon'_D = -\Lambda_{sub}(0)$ , приведены в табл. 1.

Из таблицы следует, что энергетический интервал  $(-\Delta + \varepsilon'_D, \varepsilon'_D + \Delta)$  при  $\Delta < \varepsilon'_D$  располагается в запрещенной зоне политипов карбида кремния, так что реализуется охватывающий гетеропереход I рода (straddling heterojunction) (см. [7] и рис. 1, *b* в [9]). Если щель перекрывается с зонами разрешенных состояний, говорят о разорванном переходе III рода (broken heterojunction) (см. [7] и рис. 1, *c* в [9]). В этом случае мы имеем аналог адсорбции на металле, когда щель исчезает [15].

Прибегнем к дальнейшему упрощению и для случая перекрытия щели с запрещенной зоной (гетеропереход I типа) будем использовать формулы разд. 1 для свободного щелевого графена, учитывая перенормировку точки Дирака  $\varepsilon_D = 0 \rightarrow \varepsilon'_D$  (см. табл. 1). Таким образом, во все формулы разд. 1 следует вместо энергии  $\omega$  ввести  $\omega' = \omega - \varepsilon'_D$  [14]. Подчеркнем, что использование для DOS эпиграфена формулы (3), относящейся к свободному графену (а не GLC DOS [9]), допустимо только для режима слабой связи графен-подложка  $V^2/t^2 \ll 1$ . Такое упрощение достаточно целесообразно, так как в режиме сильной связи  $V^2/t^2 \gg 1$  графен практически распадается на независимые адатомы углерода, утрачивая при этом свои уникальные свойства.

Для дальнейших оценок воспользуемся моделью НОМО-LUMO [4], являющейся упрощенным вариантом DBM: из всего набора оборванных орбиталей MM выбираются только две — наивысшая заполненная орбиталь HOMO ( $\varepsilon_{-}$ ) и наинизшая свободная орбиталь LUMO ( $\varepsilon_{+}$ ). Тогда для описания взаимодействия этих орбиталей с бесщелевым эпиграфеном можно использовать гамильтониан (1), где i = +, -, а вместо (2) ввести  $\varepsilon'_{gap}(\mathbf{k}) = \varepsilon'_{D} \pm \sqrt{\Delta^{2} + (3tka/2)^{2}}$ . Теперь выражение (3) принимает вид

$$\rho_m^{gap}(\omega) = \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma_m^{gap}(\omega')}{(\omega' - \varepsilon_m - \Lambda_m^{gap}(\omega'))^2 + (\Gamma_m^{gap}(\omega'))^2}, \quad (12)$$

где  $\omega' = \omega - \varepsilon'_D$ . Зонный вклад в числа заполнения  $n_{\pm}^{gap}$  орбиталей НОМО и LUMO при нулевой температуре равен

$$(h_{\mp}^{gap})_{band} = 2 \int_{-\sqrt{\xi^2 + \Delta^2} - \varepsilon'_D}^{-\Delta - \varepsilon'_D} \rho_{\mp}^{gap}(\omega) d\omega, \qquad (13)$$

а локальный вклад  $(n_{\mp}^{gap})_{loc}$  дается формулой (8) с заменой индекса *i* на  $\mp$ , так что  $\varepsilon_{\mp}^{loc} = \varepsilon_{\mp} + \Lambda_{\mp}^{gap}(\varepsilon_{\mp}^{loc}).$ 

**Таблица 1.** Ширина запрещенной зоны  $E_s$ , положение ее центра  $\omega_0$  (относительно точки Дирака свободного графена  $\varepsilon_D = 0$ ) и энергия смещенной точки Дирака  $\varepsilon'_D = -\Lambda_{sub}(0)$  в eV

Политип SiC	8 <i>H</i>	21 <i>R</i>	6 <i>H</i>	15 <i>R</i>	27 <i>R</i>	4 <i>H</i>
$E_g$	2.86	2.96	3.00	3.06	3.13	3.23
$-\omega_0$	0.51	0.50	0.45	0.37	0.34	0.29
$\varepsilon'_D$	0.75	0.70	0.62	0.49	0.44	0.36

Таблица 2. Энергии ионизации I и сродства к электрону А фрагментов MM в eV [17]

Фрагмент ММ	O <sub>2</sub>	NO	NH	CH <sub>2</sub>	NH <sub>2</sub>	CH <sub>3</sub>
Ι	12.07	9.26	13.1	10.4	10.15	9.84
Α	0.44	0.03	0.37	0.65	0.76	1.07

Следует также иметь в виду, что в (8) положение химического потенциала определяется MM и щелевым SLG, тогда как в данном случае добавляется SiC-субстрат.

Рассмотрим в качестве иллюстрации случай, когда центр запрещенной зоны политипа SiC совпадает с точкой Дирака щелевого графена и оба материалы являются недопированными, т.е.  $\omega_0 = \varepsilon_D = \mu = 0$  [16]. При этом переход заряда между SiC и графеном отсутствует. Так как  $\Delta \ll E_g/2$  (охватывающий гетеропереход), то в задаче о локальных состояниях наличием SiC-подложки можно пренебречь и пользоваться формулами разд. 1. Исходя из табл. 2, положим  $\varepsilon_{-} = -(I(\text{NO}) - \varphi_{SLG})$ и  $\varepsilon_{+} = -(A(CH_3) - \varphi_{SLG})$ , где работа выхода графена  $\varphi_{SLG} = 4.5 \,\mathrm{eV}$  [1]. Тогда  $\varepsilon_- \approx -4.8 \,\mathrm{eV}$  и  $\varepsilon_+ \approx -3.4 \,\mathrm{eV}$ , так что  $\varepsilon_{\pm}^{loc} \sim \mp \Delta$  и  $\nu_{\pm}^{loc} \sim 0$ . Если, однако, учесть потенциал изображения  $V_{im} = e^2/4d$ , где d — расстояние между фрагментом ММ и графеном, то энергия ионизации уменьшается  $I \rightarrow I - V_{im}$ , а энергия сродства возрастает  $A \to A - V_{im}$  [18] (при d = 2.5 Å получаем  $V_{im} \sim 2 \, {\rm eV}$ ). В этом случае нужен уже расчет, а не порядковые оценки.

Если предположить, что именно 3D-подложка диктует всей структуре значение  $\mu$ , то для заполнения локальных уровней  $\varepsilon_{-}^{loc}$  и  $\varepsilon_{+}^{loc}$  следует использовать SiC-подложку соответственно с *n*- и *p*-типом проводимости. Далее, если  $T \neq 0$  и химический потенциал близок к какому-либо уровню  $\varepsilon_{i}^{loc}$ , то с повышением температуры электрон (дырка), локализованный на этом уровне, может перейти в зону проводимости (в валентную зону) [19]. Таким образом, локальные уровни в щелевом графене играют ту же роль, что и примесные уровни в полупроводнике.

Изменения электронных состояний в системе SiCподложка — бесщелевой SLG — антитело, вызванные подключениями антигена к антителу, обсуждались в работе [5]. Было выдвинуто предположение, что влияние антигена на антитело сводится к сдвигу энергий оборванных связей и изменению их уширения, или в рассматриваемом здесь случае к вариации характеристик

16\* Журнал технической физики, 2025, том 95, вып. 3

орбиталей НОМО и LUMO в формуле (11). Рассчитать такие изменения в настоящее время возможным не представляется, так как сшивки фрагментов биомолекул антитела и антигена осуществляется мономерамиконнекторами (см. рис. 2 в [20]).

#### Заключительные замечания

SiC-SLG-Рассмотренная в работе система биомолекула (выступающая в роли антитела) представляет собой модель биосенсора в исходном состоянии, когда тестируемая биомолекула (антиген) еще не приведена в контакт с антителом. Сигналом детектирования антитела служит вызванное антигеном изменение проводимости графена  $\sigma_{SLG} = en_{SLG}\mu_{SLG}$ , где e — элементарный заряд, *n<sub>SLG</sub>* и *µ<sub>SLG</sub>* — концентрация и подвижность носителей заряда. Бесщелевой графен обладает металлической проводимостью, а щелевой графен характеризуется активационной (полупроводниковой) проводимостью. Активационный характер связан с термической делокализацией электронов с уровней  $\varepsilon_i^{loc}$ , расположенных внутри щели. Выше мы упоминали два способа открытия щели в спектре графена: деформация и влияние подложки. Однако еще одним способом функционализации графена является адсорбция. Если спекулятивно представить, что подключение антигена к антителу может вызывать появление щели, то это был бы наилучший вариант работы сенсора, так как смену типа проводимости графена легче детектировать, чем ее изменение (см. подробнее формулу (10) в [5], куда в случае щелевого графена должен быть включен вклад локальных состояний).

#### Финансирование работы

Давыдов С.Ю. признателен РНФ за финансовую поддержку (грант 22-12-00134).

#### Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

### Список литературы

- [1] С.Ю. Давыдов. ФТТ, 64 (12), 2050 (2022).
   DOI: 10.21883/FTT.2022.12.53661.452 [S.Yu. Davydov.
   Phys. Solid State, 64 (12), 2018 (2022).
   DOI: 10.21883/PSS.2022.12.54400.452]
- [2] И.В. Антонова. УФН, 192, 609 (2022). [I.V. Fntonova. Phys. Usp., 65, 567 (2022).]
- [3] И.В. Антонова. ΦΤΠ, 50 (1), 67 (2016). [I.V. Antonova. Semiconductors, 50 (1), 66 (2016). DOI: 10.1134/S106378261601005X]
- [4] С.Ю. Давыдов, А.А. Лебедев. ФТТ, 65 (12), 2048 (2023).
   DOI: 10.61011/FTT.2023.12.56719.4910k [S.Yu. Dsvydov,
   A.A. Lebedev. Phys. Solid State, 65 (12), (2023).]
- [5] С.Ю. Давыдов. ФТТ, 66 (2), 306 (2024).
   DOI: 10.61011/FTT.2024.02.57256.251 [S.Yu. Davydov.
   Phys. Solid State, 66 (2), 293 (2024).
   DOI: 10.61011/PSS.2024.02.57928.251]
- [6] С.Ю. Давыдов. ФТП, 51 (2), 226 (2017).
   DOI: 10.21883/FTP.2017.02.44110.8336 [S.Yu. Davydov. Semicondyctors, 51 (2), 217 (2017).
   DOI: 10.1134/S1063782617020051]
- [7] С.Ю. Давыдов. ФТТ, **58** (6), 1182 (2016). [S.Yu. Davydov. Phys. Solid State, **58** (6), 1222 (2016)].
- [8] С.Ю. Давыдов, С.В. Троппин. ФТТ, 49, 1603 (2007).
   [S.Yu. Davydov, S.V. Troshin. Phys. Solid State, 49, 1583 (2016). DOI: 10.1134/S1063783416040041]
- [9] Ф. Бехштедт, Р. Эндерлайн. Поверхности и границы раздела полупроводников, пер. с англ. под ред. И.П. Звягина (Мир, М., 1990), 484 с. [F. Bechstedt, R. Enderlein. Semiconductor surfaces and interfaces. (Akademie-Verlag, Berlin, 1988), 441 p.]
- [10] S. Kim, J. Ihm, H.J. Choi, Y.-W. Son. Phys. Rev. Lett., 100, 176802 (2008). DOI: 10.1103/PhysRevLett.100.176802
- X. Cao, J. Shi, M. Zhang, X. Jiang, H. Zhong, P. Huang, Y. Ding, M. Wu. J. Phys. Chem. C, **120**, 11299 (2016).
   DOI: https: 10.1021/acs.jpcc.6b03308
- [12] R. Nandee, M.A. Chowdhury, A. Shahid, N. Hossain, M. Rana. Results in Engineer., 15, 100474 (2022). www.sciencedirect.com/journal/results-in-engineering
- [13] E.H. Hasdeo, L.P.A. Krisna, M.Y. Hanna, B.E. Gunara, N.T. Hung, A.R.T. Nugraha. J. Appl. Phys., **126**, 035109 (2019). DOI: 10.1063/1.5100985
- [14] С.Ю. Давыдов. ФТТ, 65 (11), 2024 (2023).
   DOI: 10.61011/FTT.2023.11.56561.183 [S.Yu. Davydov. Phys. Solid State, 58 (11), 1942 (2023).
   DOI: 10.61011/PSS.2023.11.57332.183]
- [15] С.Ю. Давыдов. ФТТ, 53 (4), 779 (2016). [S.Yu. Davydov. Phys. Solid State, 53 (4), 804 (2016). DOI: 10.1134/S1063783416040041]
- [16] С.Ю. Давыдов, О.В. Посредник. ФТП, 57 (9), 758 (2023).
   DOI: 10.61011/FTP.2023.09.56991.5558 [S.Yu. Davydov,
   O.V. Posrednik. Semiconductors, 57 (9), 733 (2023).]
- [17] *Физические величины*, справочник, под ред. Е.С. Григорьева, Е.З. Мейлихова. (Энергоатомиздат, М., 1991)

- [18] Theory of Chemisorption ed. by J.R. Smith (Springer-Verlag, Berlin, 1980), Ch. 7. пер. Теория хемосорбции, под ред. Дж.Р. Смита (Мир, М., 1983). гл. 7.
- [19] С.Ю. Давыдов. ЖТФ, 86 (7), 145 (2016). [S.Yu. Davydov. Tech. Phys., 61 (7), 1106 (2016). DOI: 10.1134/S1063784216070100]
- [20] С.Ю. Давыдов. ФТТ, **66** (8), 1450 (2024). DOI: 10.61011/FTT.2024.08.58615.91