10,11

Влияние вакансионных дефектов на электронные и электрофизические свойства квази-2D графен/нанотрубных пленок: DFTB исследование

© М.М. Слепченков

Саратовский национальный исследовательский государственный университет им. Н.Г. Чернышевского, Саратов, Россия

E-mail: slepchenkovm@mail.ru

Поступила в Редакцию 9 июля 2025 г.
В окончательной редакции 13 июля 2025 г.
Принята к публикации 23 июля 2025 г.

В рамках метода функционала плотности в приближении сильной связи выполнено исследование квази-2D гибридных углеродных пленок, образованных горизонтально ориентированными одностенными нанотрубками типа zigzag (10,0), заключенными между двумя листами графена и ковалентно связанными с ними. Проведен анализ влияния дефектов типа одиночная вакансия на электронные и электрофизические свойства гибридных графен-нанотрубных пленок. Установлено, что и бездефектная, и дефектная гибридные пленки характеризуются наличием энергетической щели в зонной структуре, однако с появлением дефектов и ростом их числа щель начинает сужаться. Выявлено частичное перетекание заряда с нанотрубки на листы графена, которое усиливается с появлением дефектов и приводит к росту анизотропии электрической проводимости в гибридных графен-нанотрубных пленках.

Ключевые слова: дефект типа одиночная вакансия, плотность электронных состояний, электрическая проводимость, трансфер заряда.

DOI: 10.61011/FTT.2025.07.61174.180-25

1. Введение

Графен и углеродные нанотрубки (УНТ) являются наиболее обсуждаемыми аллотропными модификациями углерода на протяжении нескольких десятилетий [1,2]. Объединение графена и нанотрубок в гибридную структуру дало новый виток развития фундаментальным исследованиям и прикладным разработкам в области углеродных наноматериалов [3–8]. Растущий интерес исследователей к графен-нанотрубным гибридным структурам объясняется возможностью получения на их основе наноматериалов с новыми и/или улучшенными свойствами, превосходящими свойства каждого из углеродных компонентов в отдельности, благодаря синергетическому эффекту [9–11]. Наиболее часто используемыми методами синтеза гибридных наноматериалов графен-УНТ являются метод послойной самосборки [12], золь-гель технология [13], химическое осаждение из паровой фазы [14], гидротермальный метод [15] и метод физического смешивания [16]. Благодаря разнообразию технологий синтеза можно формировать гибридные наноматериалы графен-УНТ с различной архитектурой, в том числе с разным взаимным расположением слоев графена и нанотрубок в составе гибрида [17]. Объектом многих прикладных исследований являются гибридные наноматериалы графен-УНТ с архитектурой, в составе которой горизонтально ориентированные нанотрубки заключены между листами графена. Преимуществами подобной архитектуры являются 1) предотвращение агрегации слоев графена и 2) решение проблемы низкой проводимости графена в перпендикулярном направлении путем помещения проводящего разделителями в виде УНТ [18]. На основе гибридных наноматериалов графен-УНТ с горизонтально ориентированными нанотрубками создаются такие устройства, как суперконденсаторы [19], фотодетекторы [20], сенсоры [21].

Для управления свойствами наноматериалов графен-УНТ важно обладать информацией о закономерностях протекания в них физических процессов на атомно-молекулярном и квантовом уровнях. В связи с этим становятся востребованными прогностические исследования механических, транспортных, электронных и оптических свойств гибридных наноструктур графен-УНТ, проводимые методами атомистического моделирования [3,4,22–24]. В частности, в работе [22] в рамках теории функционала плотности (DFT) и метода неравновесных функций Грина (NEGF) проводились исследования электрических и электронных свойств гибридной системы графен-одностенные УНТ (ОУНТ), состоящей из одной ОУНТТ (5,5), двух ОУНТТ (8,0) и графеновых чешуек различной концентрации. Было обнаружено, что с увеличением концентрации графеновых чешуек возрастает величина DOS гибридной системы графен-ОУНТТ на уровне Ферми, что приводит к росту ее проводимости и тока. Исследования методом функционала плотности в приближении сильной связи (DFTB) электронных и транспортных свойств латеральных 2D-1D-2D гибридных структур, представляющих собой непре-

рывное соединение графеновых листов через фрагмент ОУНТТ типа „зигзаг“ различного диаметра, выполнено в работе [23]. Авторами показана сильная нелинейность в поведении коэффициента прохождения вблизи энергии Ферми для таких структур в зависимости от диаметра ОУНТТ. В работе [24] с использованием методов DFTB и NEGF изучались вопросы квантового транспорта электронов через гибридную углеродную структуру с горизонтально ориентированными ОУНТТ различного типа проводимости на листе графена при варьируемых расстояниях между ним и нанотрубками. Исследователями было установлено разное поведение тока стока для гибридов графен-ОУНТТ с полупроводниковыми и металлическими нанотрубками при уменьшении расстояния между углеродными компонентами. Для полупроводниковых ОУНТ ток увеличивается при низких напряжениях смещения и уменьшается при высоких напряжениях смещения; для металлических ОУНТ ток уменьшается во всем рассмотренном диапазоне значений напряжения смещения. В то же время в имеющихся теоретических работах при изучении электронных и электропроводных свойств гибридных наноматериалов графен-УНТ не рассматривается влияние структурных дефектов, в частности, точечных (нульмерных) дефектов кристаллической решетки, которые могут образовываться в процессе синтеза графена и нанотрубок.

Целью данной работы является изучение методами атомистического моделирования электронных и электропроводных свойств гибридных наноматериалов графен-УНТ, содержащих точечные дефекты кристаллической решетки. Объектом исследования являются квази-2D пленки, образованные горизонтально ориентированными ОУНТТ типа zigzag с индексами хиральности (10,0), заключенными между листами графена и ковалентно связанными с ними. В качестве точечного дефекта рассмотрен дефект типа одиночная вакансия, формируемый в атомной сетке графена. Подобный дефект часто встречается при синтезе графена [25]. Выбор ОУНТТ типа zigzag обусловлен тем, что для образования ковалентных связей с графеном, в первую очередь, подходят именно подобные трубки, как было показано в работе [26]. Диаметр выбранной ОУНТТ (10,0) составляет ~ 0.8 nm и соответствует известным экспериментальным данным о наиболее часто синтезируемых ОУНТТ [27].

2. Методы и подходы

Атомная структура и электронно-энергетические характеристики (энергия связи E_b, плотность электронных состояний (DOS), уровень Ферми E_F) исследуемых гибридных наноструктур графен-ОУНТТ (10,0)-графен рассчитывались в рамках метода DFTB [28] в программном пакете открытого доступа DFTB+ [29]. Выбор метода DFTB обусловлен тем, что кристаллические ячейки (супер-ячейки) исследуемых гибридных наноструктур содержат до 288 атомов, что увеличивает трудоемкость расчетов квантового транспорта электронов для них. В свою очередь, метод DFTB примерно на три порядка быстрее, чем DFT. В работе [30] на примере графена показано, что метод DFTB способен успешно воспроизводить геометрические и энергетические характеристики углеродных наноструктур, сравнимые по точности с результатами расчета методом DFT, но при меньших вычислительных затратах. Для получения равновесной конфигурации супер-ячеек проводилась оптимизация, которая заключается в решении мини-максной задачи, с целью выявления глобального минимума полной энергии путем варьирования координат всех атомов и длин векторов трансляций. Распределение плотности электронного заряда по атомам определяется в соответствии с анализом населенностей Малликена [31]. Электрическая проводимость исследуемых структур рассчитывалась в рамках формализма Ландауэра-Буттикера [32] по формуле вида

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

где $T(E)$ — усредненная функция пропускания электронов, E_F — уровень Ферми электродов, e^2/h — квант проводимости, F_T — функция теплового уширения энергетических уровней, определяемая как

$$F_T = \frac{1}{4k_B T} \operatorname{sech}^2\Big(\frac{E - E_F}{2k_B T}\Big), \qquad (2)$$

где k_B — постоянная Больцмана, T — температура.

Функция пропускания электронов $T(E)$ определяется выражением вида

$$T(E) = Tr\big(\Gamma_S(E) G_C^A(E) \Gamma_D(E) G_C^R(E)\big), \qquad (3)$$

где $G_C^A(E)$ и $G_C^R(E)$ — опережающая и запаздывающая матрицы Грина, описывающие взаимодействие моделируемой системы с электродами, а $\Gamma_S(E)$ и $\Gamma_D(E)$ — матрицы уширения энергетических уровней электродов истока и стока. Расчеты электропроводных характеристик выполнялись при температуре 300 K и при разбиении обратного пространства с использованием пятидесяти k-точек в направлении, перпендикулярном направлению токопереноса.

3. Результаты

На рис. 1 показана исходная супер-ячейка квази-2D пленки графен-ОУНТТ (10,0)-графен, не содержащая дефектов одиночной вакансии, до оптимизации (рис. 1, a) и после оптимизации (рис. 1, b) атомной структуры. Хорошо видно, что в ходе оптимизации и листы графена, и нанотрубка (10,0) претерпели деформацию атомной сетки, результатами которой являются волнообразный изгиб графена и вытянутая эллипсоидальная форма

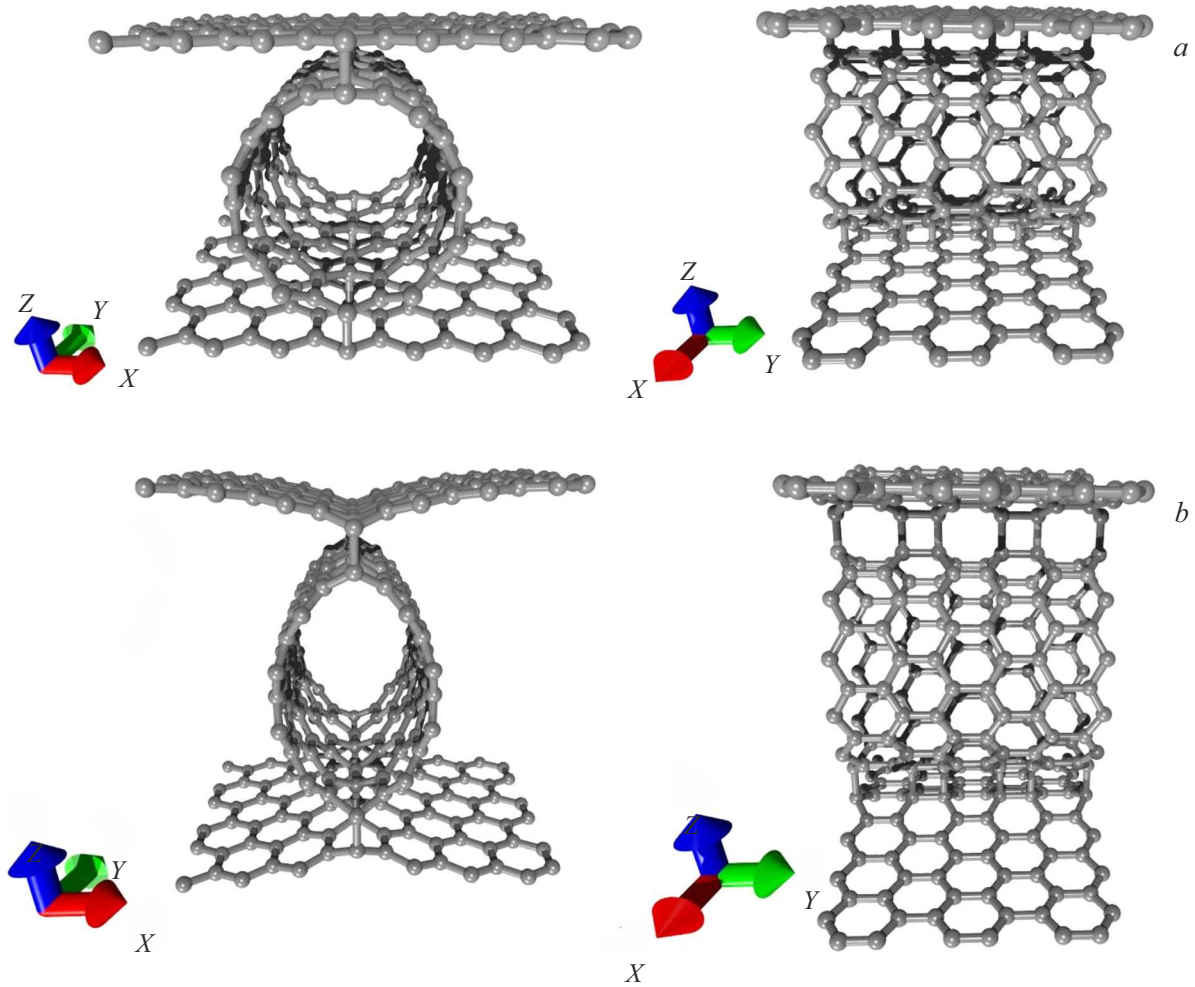

Рис. 1. Супер-ячейка гибридной пленки графен-ОУНТТ (10,0)-графен до оптимизации (a) и после оптимизации (b) атомной структуры. Слева показан вид спереди, справа — вид сбоку.

нанотрубки (степень сжатия 1.62). Длина ковалентной связи между графеном и ОУНТ (10,0) составляет 1.62 A для оптимизированной супер-ячейки с векторами трансляции $L_x = 17.22$ A и $L_y = 12.78$ A.

Далее в атомную структуру супер-ячейки гибридной пленки графен-ОУНТ (10,0)-графен вносились дефекты одиночной вакансии. Дефекты формировались в атомной сетке листов графена. Были рассмотрены случаи с одним, двумя, тремя и четырьмя дефектами. На рис. 2 показаны оптимизированные супер-ячейки гибридной пленки графен-ОУНТТ (10,0)-графен с различным количеством вакансионных дефектов. Каждая из построенных супер-ячеек проходила проверку на термодинамическую устойчивость, которая оценивалась по величине энергии связи E_b, рассчитываемой согласно формуле

$$E_b = E_{hs} - (E_{gr} + E_{CNT}), \qquad (4)$$

где E_{hs} — энергия гибридной пленки графен-ОУНТТ (10,0)-графен, E_{gr} — энергия графеновых слоев, E_{CNT} — энергия ОУНТТ (10,0). Структура гибридной пленки конфигурировалась таким образом, чтобы ее полная энергия по абсолютной величине была меньше, чем сумма полных энергий листов графена и ОУНТТ (10,0). Результаты расчета, выполненные по формуле (4), показали, что величина E_b для супер-ячеек гибридной пленки графен-ОУНТТ (10,0)-графен с ростом количества дефектов одиночной вакансии меняется в диапазоне $-15.05 \div -6.23$ eV. Отрицательная величина энергии связи свидетельствует о том, что все супер-ячейки дефектной гибридной пленки являются термодинамически устойчивыми. Для супер-ячейки бездефектной гибридной пленки величина E_b составляет -15.06 eV. Следует отметить, что были рассмотрены и другие варианты размещения дефектов одиночной вакансии в атомной сетке листов графена: диагональное расположение одного дефекта на верхнем и одного дефекта на нижнем листах графена, два дефекта на верхнем листе графена и ни одного дефекта на нижнем листе, два дефекта на нижнем листе графена и ни одного дефекта на верхнем листе. Однако, именно представленные на рис. 2 случаи характеризуются наибольшей по

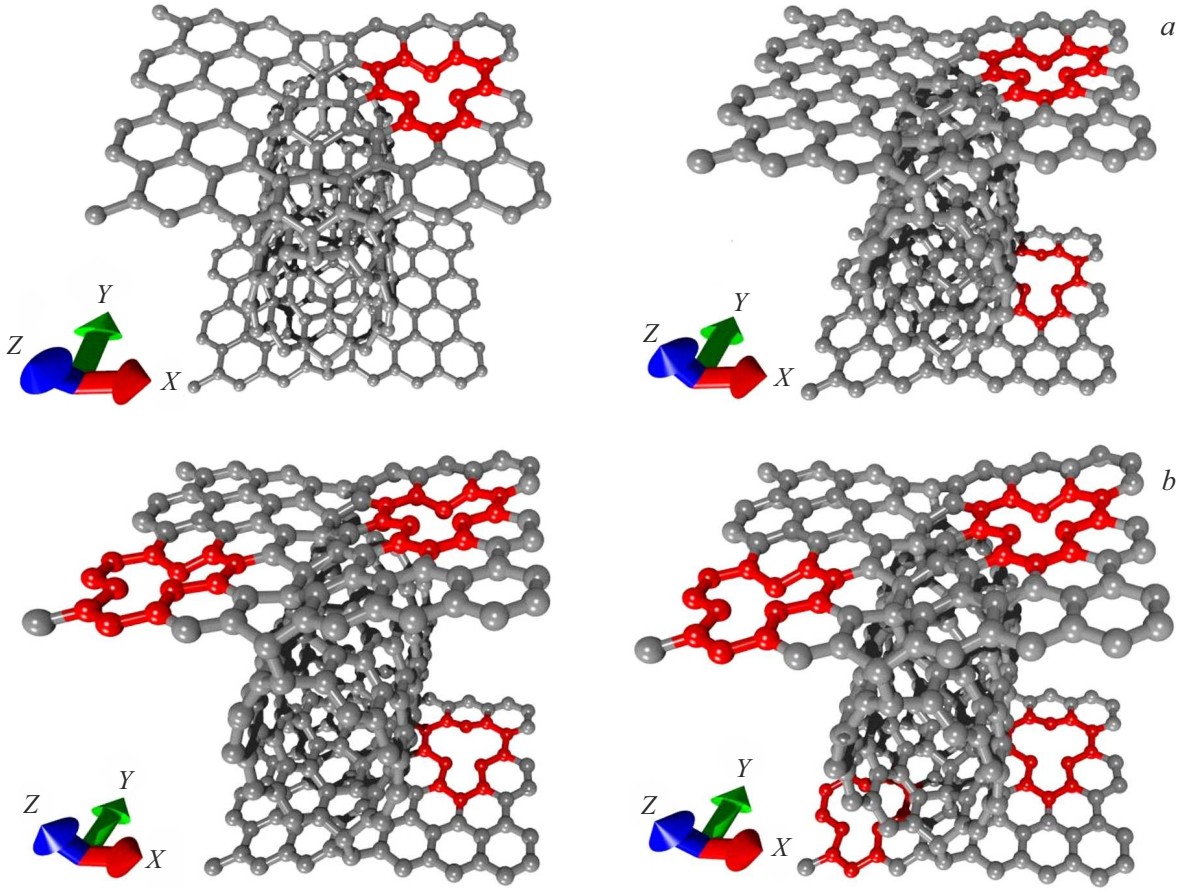

Рис. 2. Супер-ячейка гибридной пленки графен-ОУНТТ (10,0)-графен с дефектами типа одиночная вакансия, формируемыми в атомной сетке листов графена: один (*a*), два (*b*), три (*c*) и четыре (*d*) дефекта. Красным цветом выделены области локализации дефекта.

модулю величиной E_b, поэтому они и были выбраны для дальнейшего анализа электронных и электрофизических свойств гибридных пленок графен-ОУНТТ (10,0)-графен.

Электронные свойства гибридных пленок графен-ОУНТТ (10,0)-графен анализировались на основе распределений DOS, построенных по результатам расчета зонной структуры. Все расчеты проводились в *sp*-базисе атомных орбиталей, поскольку в рассматриваемых гибридных пленках с ковалентно связанными нанотрубкой и графеном присутствуют состояния с sp^3-гибридизацией. На рис. 3 приведены графики DOS для супер-ячеек пленок графен-ОУНТТ (10,0)-графен с разными числом дефектов одиночной вакансии и для бездефектных пленок (во вставке). Для демонстрации выбран интервал энергий вблизи уровня Ферми E_F, поскольку определяющий вклад в проводящие свойства наноматериала вносят именно электронные состояния на уровне Ферми. Значения уровня Ферми E_F каждой из рассчитываемых супер-ячеек представлены в табл. 1. Как видно из рис. 2, и бездефектная, и содержащая дефекты одиночной вакансии гибридные пленки графен-ОУНТТ (10,0)-графен характеризуются наличием интервала энергий с нулевой DOS вблизи уровня Ферми, свидетельствующего об открытии энергетической щели между валентной зоной и зоной проводимости в зонной структуре. Появление энергетической щели обусловлено наличием sp^3-гибридизованных атомов углерода, участвующих в образовании ковалентной связи между графеном и ОУНТТ (10,0). Величина энергетической щели E_{gap} бездефектной и дефектной пленок приведена в табл. 1. Из рис. 3 и табл. 1 следует, что с появлением дефекта типа одиночная вакансия в атомной сетке графена энергетическая щель гибридной пленки сужается, причем при наличии даже одного дефекта она уменьшается более, чем в 2 раза, а при наличии трех и четырех дефектов — в 3 раза. Уровень Ферми с появлением дефектов смещается по оси энергий влево, оставаясь при этом в середине сужающейся запрещенной зоны.

Сужение энергетической щели гибридной пленки графен-ОУНТТ (10,0)-графен с появлением дефектов можно объяснить с позиции трансфера заряда в системе графен-ОУНТТ (10,0)-графен. На рис. 4 показаны рассчитанные распределения парциального заряда по Малликену для атомов супер-ячеек бездефектной и дефектной (содержащей 1 дефект) гибридных пленок. Видно, что в отсутствие дефектов (рис. 4, *a*) наибольшее

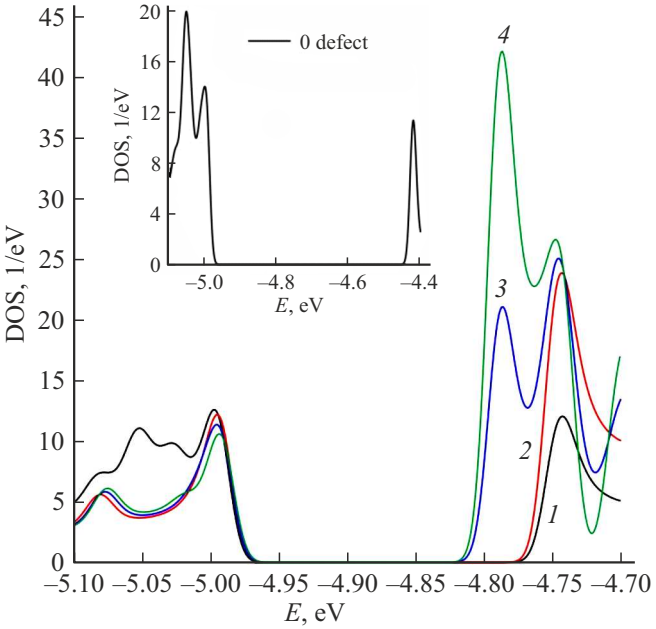

Рис. 3. Графики DOS супер-ячеек гибридной пленки графен-ОУНТТ (10,0)-графен с дефектами типа одиночная вакансия, формируемыми в атомной сетке листов графена: кривая *1* — один дефект, *2* — два дефекта, *3* — три дефекта и кривая *4* — четыре дефекта. Во вставке к рисунку показан график DOS для супер-ячейки бездефектной гибридной пленки графен-ОУНТТ (10,0)-графен.

Таблица 1. Электронно-энергетические характеристики бездефектной и дефектной гибридной пленки графен-ОУНТТ (10,0)-графен

Количество дефектов	E_F, eV	E_{gap}, eV
0	−4.70	0.57
1	−4.87	0.24
2	−4.87	0.23
3	−4.89	0.19
4	−4.89	0.19

Таблица 2. Электрическая проводимость бездефектной и дефектной гибридной пленки графен-ОУНТТ (10,0)-графен в направлениях токопереноса zigzag (G_x) и armchair (G_y) гексагональной решетки графена

Количество дефектов	G_x, μSm	G_y, μSm
0	25.3	51.2
1	40.3	121.3
2	42.1	154.2
3	59.5	159.6
4	75.2	167.9

перераспределение парциального заряда наблюдается в области формирования ковалентной связи между листами графена и нанотрубкой. При этом с нанотрубки на листы графена перетекает суммарный заряд величиной порядка $0.09e$ (e — заряда электрона). Наличие даже одного дефекта (рис. 4, *b*) приводит к тому, что наибольшее перераспределение парциального заряда происходит в области формирования одиночной вакансии. Интенсивнее происходит и трансфер заряда между графеном и нанотрубкой в составе гибридной пленки: на графен переходит суммарный заряд величиной $0.16e$. С ростом числа дефектов величина переданного на графен парциального заряда возрастает: при двух дефектах она составляет $0.21e$, при трех дефектах — $0.25e$, при четырех дефектах — $0.28e$. Картина распределения парциального заряда по Малликену по атомам супер-ячеек гибридной пленки с двумя, тремя и четырьмя дефектами аналогична случаю с одним дефектом.

Электрофизические свойства исследуемых гибридных пленок графен-ОУНТТ (10,0)-графен оценивались по величине электрической проводимости, рассчитанной для двух направлений токопереноса: zigzag (G_x)

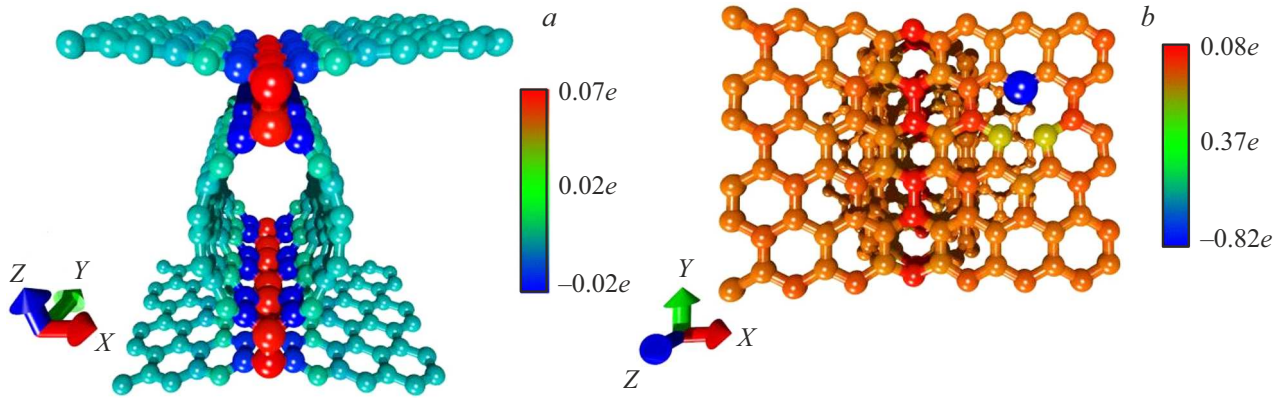

Рис. 4. Распределения парциального заряда по Малликену для атомов супер-ячеек бездефектной (*a*) и содержащей 1 дефект типа одиночная вакансия (*b*) гибридных пленок графен-ОУНТТ (10,0)-графен. На цветовой шкале e означает заряда электрона.

и armchair (G_y) гексагональной решетки графена. Рассчитанные значения электрической проводимости бездефектной и дефектной гибридных пленок приведены в табл. 2. Проанализировав табличные данные, можно отметить, что гибридным пленкам графен-ОУНТТ (10,0)-графен, также как и графену, свойственна анизотропия проводимости: величина G_y бездефектной пленки вдвое больше, чем величина G_x. Более высокая проводимость гибридной пленки в направлении оси Y объясняется вкладом нанотрубки (10,0), которая является токопроводящей именно вдоль своей оси. С ростом числа дефектов наблюдается рост электрической проводимости в обоих направлениях токопереноса, что связано с описанными выше явлениями трансфера электрического заряда в системе графен-ОУНТТ (10,0)-графен. Увеличивается и разница в значениях G_x и G_y. В зависимости от числа дефектов она составляет 2.5−3 раза.

Таким образом, варьируя числом дефектов типа одиночная вакансия, можно усиливать анизотропию электрической проводимости в гибридных пленках графен-ОУНТТ-графен, что важно для их потенциального применения в устройствах полупроводниковой электроники, в частности, диодах и транзисторах.

4. Заключение

Установлены закономерности влияния дефектов типа одиночная вакансия на электронные и электрофизические свойства квази-2D гибридных пленок графен-ОУНТТ (10,0)-графен. При наличии вакансионных дефектов гибридные пленки сохраняют энергетическую щель между валентной зоной и зоной проводимости, обусловленную ковалентным характером связи листов графена и ОУНТТ, однако величина щели уменьшается в 3 раза (с 0.57 до 0.19 eV) по мере увеличения числа дефектов от одного до четырех. Появление дефектов в атомной сетке графена усиливает трансфер заряда между ним и ОУНТТ, в ходе которого заряд частично перетекает с нанотрубки на листы графена, что приводит к росту электрической проводимости гибридных графен-нанотрубных пленок в обоих направлениях токопереноса (zigzag и armchair гексагональной решетки графена) в 3 раза по сравнению с бездефектной пленкой. Наличие вакансионных дефектов также усиливает анизотропию электрической проводимости в гибридных пленках графен-ОУНТТ (10,0)-графен, увеличивая отношение G_y/G_x с 2 до 3 раз. Выявленные закономерности свидетельствуют о возможности управления электронными и электрофизическими свойствами квази-2D гибридных углеродных пленок за счет точечных дефектов, что важно учитывать при их использовании в устройствах полупроводниковой наноэлектроники, в том числе диодах и транзисторах.

Финансирование работы

Работа выполнена при поддержке гранта Российского научного фонда (проект № 24-79-10316, https://rscf.ru/project/24-79-10316/, построение атомистических моделей, исследование электронных и электрофизических свойств бездефектных гибридных углеродных наноструктур) и государственного задания Минобрнауки РФ (проект FSRR-2023-0008, исследование влияния дефектов на электронные и электрофизические свойства гибридных углеродных наноструктур).

Конфликт интересов

Автор заявляет об отсутствии конфликта интересов.

Список литературы

[1] 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).
[2] Ю.А. Баимова, Р.Р. Мулюков. Графен, нанотрубки и другие углеродные наноструктуры. РАН, М. (2018). 212 с.
[3] Е.Ф. Шека, Л.А. Чернозатонский, А.А. Артюх. Письма в ЖЭТФ **89**, *7*, 412 (2009).
[4] A.A. Artyukh, L.A. Chernozatonskii, P.B. Sorokin. Phys. Status Solidi B **247**, *11–12*, 2927 (2010).
[5] 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**, *3*, 033002 (2016).
[6] W. Du, Z. Ahmed, Q. Wang, C. Yu, Z. Feng, G. Li, M. Zhang, C. Zhou, R. Senegor, C.Y. Yang. 2D Mater. **6**, *4*, 042005 (2019).
[7] A. Gbaguidi, S. Namilae, D. Kim. Nanotechnology **31**, *25*, 255704 (2020).
[8] J. Sheng, Z. Han, G. Jia, S. Zhu, Y. Xu, X. Zhang, Y. Yao, Y. Li. Adv. Funct. Mater. **33**, *43*, 2306785 (2023).
[9] I.N. Kholmanov, C.W. Magnuson, R. Piner, J.Y. Kim, A.E. Aliev, C. Tan, T.Y. Kim, A.A. Zakhidov, G. Sberveglieri, R.H. Baughman, R.S. Ruoff. Adv. Mater. **27**, 3053 (2015).
[10] S. Pyo, Y. Eun, J. Sim, K. Kim, J. Choi. Micro and Nano Syst. Lett. **10**, 9 (2022).
[11] B. Liu, J. Sun, J. Zhao, X. Yun. Adv. Compos. Hybrid Mater. **8**, 1 (2025).
[12] S. Wang, J. Yang, X. Zhou, J. Xie, L. Ma, B. Huang. J. Electroanal. Chem. **722**, 141 (2014).
[13] Z. Rezaei, M.R. Golobosnafard. J. Ultrafine Grained Nanostructured Mater. **55**, *1*, 45 (2022).
[14] M. Fikry, M. Abbas, A. Sayed, A. Nouh, A. Ibrahim, A.S. Mansour. J. Mater. Sci.: Mater. Electron. **83**, *7*, 391 (2022).
[15] G.K. Maron, J.H. Alano, B.d.S. Noremberg, L.d.S. Rodrigues, V. Stolojan, S.R.P. Silva, N.L. Villarreal Carreno. J. Alloys Compd. **836**, 155408 (2020).
[16] L. Chen, D. Li, X. Zheng, L. Chen, Y. Zhang, Z. Liang, J. Feng, P. Si, J. Lou, L. Ci. J. Electroanal. Chem. **842**, 74 (2019).
[17] J.P. John, M.N. T.E., B.S. T.K. Mater. Adv. **2**, 6816 (2021).

[18] R.T. Lv, E. Cruz-Silva, M. Terrones. ACS Nano **8**, *5*, 4061 (2014).
[19] K.L. Routray, S.J.D. Saha. Mater. Res. Bull. **150**, 111698 (2024).
[20] J. Cao, Y.X. Zou, X. Gong, P. Gou, J. Qian, R.J. Qian, Z.H. An. Appl. Phys. Lett. **113**, 061112 (2018).
[21] M. Alamri, B. Liu, C. Berrie, M. Walsh, J.Z. Wu. Nano Ex. **3**, *3*, 035004 (2020).
[22] S. Lepak-Kuc, K.Z. Milowska, S. Boncel, M. Szybowicz, A. Dychalska, I. Jozwik, K.K. Koziol, M. Jakubowska, A. Lekawa-Raus. ACS Appl. Mater. Interfaces. **11**, *36*, 33207 (2019).
[23] Б.Ю. Валеев, А.Н. Токсумаков, Д.Г. Квашнин, Л.А. Чернозатонский. Письма в ЖЭТФ **115**, *2*, 103 (2022).
[24] J. Srivastava, A. Gaur. J. Chem. Phys. **155**, 244104 (2021).
[25] M.D. Bhatt, H. Kim, G. Kim. RSC Adv. **12**, *33*, 21520 (2022).
[26] V.V. Mitrofanov, M.M. Slepchenkov, G. Zhang, O.E. Glukhova. Carbon **115**, 803 (2017).
[27] M. Li, X.Liu, X. Zhao, F. Yang, X. Wang, Y. Li. Top. Curr. Chem. **375**, 29 (2017).
[28] M. Elstner, D. Porezag, G. Jungnickel, J. Elsner, M. Haugk, Th. Frauenheim, S. Suhai, G. Seifert. Phys. Rev. B **58**, *11*, 7260 (1998).
[29] B. Hourahine, B. Aradi, V. Blum, F. Bonafé, A. Buccheri, C. Camacho, C. Cevallos, M.Y. Deshaye, T. Dumitrică, A. Dominguez, S. Ehlert, M. Elstner, T. van der Heide, J. Hermann, S. Irle, J.J. Kranz, C. Köhler, T. Kowalczyk, T. Kubař, I.S. Lee, V. Lutsker, R.J. Maurer, S.K. Min, I. Mitchell, C. Negre, T.A. Niehaus, A.M.N. Niklasson, A.J. Page, A. Pecchia, G. Penazzi, M.P. Persson, J. Řezáč, C.G. Sánchez, M. Sternberg, M. Stöhr, F. Stuckenberg, A. Tkatchenko, V. W.-z. Yu, T. Frauenheim. J. Chem. Phys. **152**, 124101 (2020).
[30] A. Zobelli, V. Ivanovskaya, P. Wagner, I. Suarez-Martinez, A. Yaya, C. Ewels. Phys. Status Solidi B **249**, *2*, 276 (2012).
[31] R.S. Mulliken. J. Chem. Phys. **23**, 1833 (1955).
[32] S. Datta. *Quantum Transport: Atom to Transistor* (Cambridge University Press: Cambridge, London, UK, 2005), p. 404.

Редактор Т.Н. Василевская