

К 85-ЛЕТИЮ
Н.И. СИНИЦЫНА

УДК 538.915

**АВТОЭМИССИОННЫЕ НАНОЭМИТТЕРЫ
НА БАЗЕ Т-КОНТАКТНЫХ СОЕДИНЕНИЙ ИЗ ОДНОСЛОЙНЫХ
УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК И КОВАЛЕНТНО СВЯЗАННЫХ С НИМИ
ГРАФЕНОВЫХ ЗИГЗАГ-НАНОЛЕНТ**

© 2022 г. О. Е. Глухова^а, М. М. Слепченков^{а, *}

^аСаратовский национальный исследовательский государственный университет им. Н.Г. Чернышевского,
ул. Астраханская, 83, Саратов, 410012 Российская Федерация

*E-mail: slepchenkovi@mail.ru

Поступила в редакцию 30.03.2022 г.

После доработки 30.03.2022 г.

Принята к публикации 25.04.2022 г.

С помощью квантово-механических подходов исследованы электронные и электрофизические свойства Т-контактных соединений на основе тонких хиральных одностенных углеродных нанотрубок (ОУНТ) и графеновой зигзаг-наноленты с позиции их применения в качестве автоэмиссионных наноэммиттеров лезвийного типа с атомарной толщиной эмиттирующего лезвия. Установлен факт резкого уменьшения контактного электрического сопротивления на 87% для исследуемого трехполюсника (Т-контакта) со стороны двух контактов, в качестве которых выступают полубесконечные ОУНТ. Сопротивление графеновой зигзаг-наноленты, подключаемой перпендикулярно контактам из ОУНТ в составе трехполюсника, сравнимо с сопротивлением самой наноленты и составляет ~3.3 кОм. Показано, что ковалентные связи графеновых лент с нанотрубками определяют большую прочность на разрыв в сильных электрических полях, что обеспечивает целостность атомной структуры даже в электрических полях напряженностью $\sim 1.5 \times 10^8$ В/нм. Выявлено, что механическая сила электрического поля, составляющая 23...36 нН, вызывает периодические деформации атомного каркаса с частотой ~ 1.25 ТГц.

DOI: 10.31857/S0033849422100047

ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время интенсивно растет число областей с применением нитеобразных структур из атомов углерода – углеродных нанотрубок (УНТ). В электронике углеродные нанотрубки считаются перспективными кандидатами для создания пьезорезистивных элементов [1, 2], преобразователей солнечной энергии [3–5], накопителей энергии [6–9]. Одним из современных применений УНТ является создание проводящих каналов с высокой проводимостью [10, 11] благодаря их превосходным электрическим, термическим и оптическим свойствам [12–18].

Эти новые направления применений сопровождают продолжающееся развитие хорошего известного направления – создания на основе пленок из УНТ высокоэффективных автоэмиссионных катодов. Холодная эмиссия электронов углеродными нанотрубками была открыта в XX в. Успешные работы в этом направлении проводили научные группы Ю.В. Гуляева и Н.И. Сеницына [19–21]. Впервые были показаны высокие автоэмиссион-

ные характеристики пленок с вертикально ориентированными УНТ.

В настоящее время известно, что не менее перспективным наноматериалом для эмиссионной электроники является графен. Уникальные свойства графена и его производных позволяют рассматривать их как наиболее перспективные материалы для создания конденсаторов [22–24], аэрогелей и сенсоров [25–27]. Объединение УНТ и графена в гибридные структуры открывает пути для получения новых материалов с многообещающими свойствами, обусловленными синергетическим эффектом от сочетания структур разной размерности [28–34]. Усиление тех или иных свойств композитного графен-нанотрубного материала по сравнению с отдельными трубкой и графеном во многом зависит от технологии изготовления гибридных соединений графен/УНТ и типа их соединения. В частности, большой интерес представляют исследования, направленные на получение соединений из ковалентно-связанных нанотрубок и графена [35–40]. Такие соединения обладают улучшенными электрическими и меха-

ническими свойствами по сравнению со свойствами атомарно тонкого графена. Для их получения используются различные технологии: отжиг функционализированных УНТ на медной фольге без введения посторонних источников углерода [41], термическое химическое осаждение из газовой фазы графеновых пленок на медной фольге, покрытой УНТ [42]. Изготовленные пленки обладают поверхностным сопротивлением 300 Ом/квadrat и прозрачностью 96.4%, а созданные на их основе полевые транзисторы показали улучшенное отношение токов включения и выключения $I_{\text{вкл}}/I_{\text{выкл}}$ по сравнению с чистым графеном.

Для изготовления гибридных графен-нанотрубных углеродных пленок с настраиваемыми автоэмиссионными свойствами разработан метод, основанный на низковакуумном отжиге ацетата целлюлозы на никелевой поверхности [43]. Изготовленные с помощью этого метода гибридные пленки обладают низким значением напряженности электрического поля включения 2.12 В/мкм при плотности тока эмиссии 10 мкА/см², что превосходит аналогичные характеристики пленок из УНТ [43]. Изготовление гибридных композитных материалов графен/УНТ с улучшенными автоэмиссионными свойствами — одна из актуальных современных задач [44–49]. В работе [47] показано, что благодаря оптимальному массовому соотношению УНТ к графену (5 : 1) удалось значительно улучшить автоэмиссионные характеристики гибридных структур УНТ/графен, в том числе добиться следующих показателей: электрическое поле включения 0.79 В/мкм, пороговое электрическое поле 1.05 В/мкм, максимальная плотность тока 0.1 мА/см² и коэффициент усиления поля $\sim 1.3 \times 10^4$.

В то же время для успешного применения графен/УНТ структур в эмиссионной электронике необходимо исследовать их поведение при критических электрических полях, приводящих к механическому разрушению. Подобных экспериментальных исследований на данный момент не проводилось, поэтому прогностический теоретический анализ поведения графен/УНТ-структур в сильных полях очень важен. Эффективным инструментом такого анализа является компьютерное молекулярное моделирование, которое ранее успешно применялось для прогнозирования электронных, электрических и эмиссионных свойств графен/УНТ различной топологии [50, 51].

Цель данной работы — исследовать композитные пленки на основе графена и однослойных углеродных нанотрубок (ОУНТ) с ковалентными связями нанотрубка–графен, формирующими Т-образные соединения в составе пленки.

1. АТОМНАЯ СТРУКТУРА, ЭЛЕКТРОННОЕ СТРОЕНИЕ И ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТЬ СУПЕРЪЯЧЕЙКИ ГРАФЕН/УНТ С Т-ОБРАЗНЫМ КОНТАКТОМ

Для исследования атомного и электронного строения графен/ОУНТ-наноструктур с Т-образным контактом был применен метод функционала плотности на базе сильной связи с самосоглашением по заряду (SCC DFTB). Этот метод реализован в оригинальной программе KvaZar/Mizar [52, 53]. Для нахождения равновесной конфигурации суперъячейки квази-1D-структуры с регулярными Т-образными контактами графен/ОУНТ необходимо было решить минимаксную задачу. Отыскиваемый глобальный минимум полной энергии суперъячейки с соответствующими периодическими граничными условиями отвечает равновесной энергетически стабильной атомной конфигурации. Варьируемыми параметрами являются все координаты всех атомов и длина вектора трансляции.

Атомная структура полученной равновесной суперъячейки представлена на рис. 1а. Суперъячейка содержит 722 атома, из которых 364 атома образуют каркас хиральной трубки (6,5). Если период индивидуальной нанотрубки (6,5) составляет 4.064 нм, то период суперъячейки составляет 4.9 нм. Отметим, что трубка (6,5) выбрана не случайно, поскольку по статистике именно этот тип ОУНТ составляет большую долю среди всего массива ОУНТ, получаемого в ходе синтеза. Графен в этой структуре представлен чешуйкой длиной 3.92 нм и шириной 2.4 нм. Размеры графеновой чешуйки не могут точно соответствовать длине ОУНТ (6,5) из-за ее хиральности, поэтому длина чешуйки была взята несколько меньше, чем длина ОУНТ. Контактная область нанотрубка–графен образована ковалентными связями, обеспечивающими особую прочность такого контакта. Длина С–С-связей в этой области составляет ~ 0.157 нм. В области соединения трубки с графеном в суперъячейке образуются пяти- и семиугольники.

Для исследования электронных свойств полученного Т-образного контакта предложена эквивалентная схема трехполюсника (рис. 1б). Она представлена тремя сопротивлениями R_1 , R_2 и R_3 , для расчета которых предварительно вычисляются величины электропроводности в трех направлениях 1–2, 1–3 и 2–3. К Т-образному контакту присоединяются две полубесконечные в направлениях $-Y$ и $+Y$ нанотрубки (6,5) и полубесконечная в направлении $+X$ графеновая зигзаг-нанолента. Полубесконечные нанотрубки и графеновая нанолента выступают в качестве электродов. Для Т-образного контакта рассчитаны электронный спектр, энергия Ферми и энергетическая щель с учетом указанных полубесконечных электродов. Те же характеристики рассчитаны и для квази-

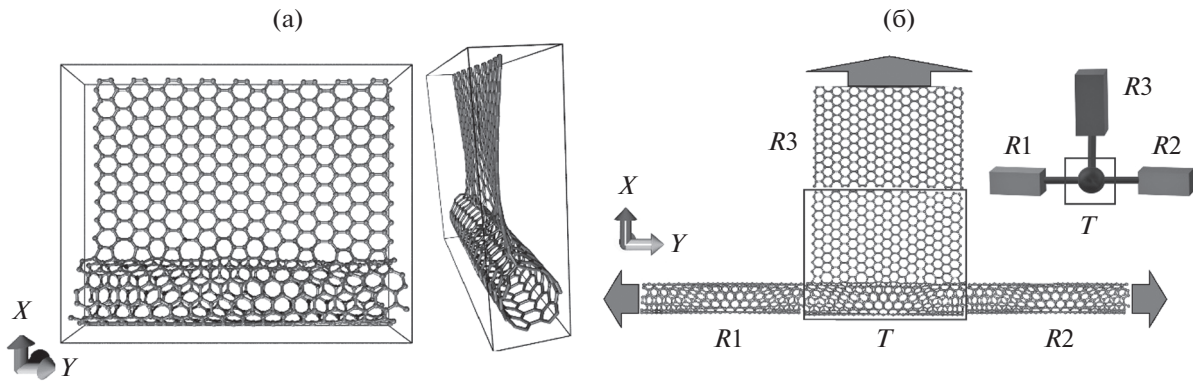


Рис. 1. Структура T-образного соединения графен/ОУНТ: а – суперъчейка T-образного контакта; б – эквивалентная схема трехполюсного контакта T , к которому подсоединены две полубесконечные нанотрубки (6,5) и полубесконечная графеновая нанолента.

1D-структур с регулярными T-образными контактами графен/ОУНТ. В табл. 1 представлены метрические, энергетические и электронные параметры для индивидуальной ОУНТ (6,5), индивидуальной графеновой зигзаг-ленты, T-образного контакта в трех направлениях, а также для квази-1D-структур с регулярными T-образными контактами.

Из данных таблицы видно, что если для T-образного контакта как 0D-объекта характерно значение уровня Ферми -5.46 эВ, то у бесконечной 1D-структуры значение уровня Ферми поднялось до -4.52 эВ, что сравнимо со значением для ОУНТ (6,5). Однако если ОУНТ характеризовалась большой щелью ~ 1 эВ, то 1D-графен/ОУНТ-структура не имеет щели вообще, т.е. ее проводимость имеет металлический характер.

Для расчета сопротивления применяется известный подход к численной оценке электропроводности, использующий формализм Ландауэра-Буттикера и выражение следующего вида:

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

где $T(E)$ – функция пропускания электронов, характеризующая квантово-механическую прозрач-

ность проводящего канала в зависимости от энергии движущегося по нему электрона (проводящий канал – структура, заключенная между двумя контактами), E_F – энергия Ферми материала контактов, e – заряд электрона, h – постоянная Планка, e^2/h – квант проводимости для единственного канала проводимости. Это значение удваивается в связи с учетом спина электронов. Функция теплового уширения $F_T(E)$ рассчитывается по формуле

$$F_T(E) = \frac{1}{4k_B T} \operatorname{sech}^2 \frac{E}{2k_B T}, \quad (2)$$

где k_B – постоянная Больцмана, T – температура. Интеграл, представленный в формуле (1), рассматривается на небольшом интервале энергии из-за функции теплового уширения. При этом наибольший вклад в величину функции пропускания вносят значения энергии вблизи энергии Ферми в интервале $[E_F - \alpha, E_F + \alpha]$ ($\alpha = 0.2, 0.3$ эВ). Функция пропускания электронов определяется выражением

$$T(E) = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \operatorname{Tr}(\Gamma_s(E) G^A(E) \Gamma_d(E) G^R(E)), \quad (3)$$

где $G^A(E)$, $G^R(E)$ – соответственно опережающая и запаздывающая функции Грина, описыва-

Таблица 1. Метрические, энергетические и электронные параметры исследуемых углеродных наноструктур

Структуры	L , нм	E_F , эВ	E_g , эВ	R , кОм
1D – УНТ (6,5)	Y: 4.064	-4.50	0.95	368.31
1D – зигзаг-нанолента	X: 0.246	-4.70	0.00	3.16
T1 (УНТ в направлении - Y)	-Y: 4.090	-5.46	0.00	18.50
T2 (УНТ в направлении + Y)	+Y: 4.090	-5.46	0.00	18.50
T3 (нанолента в направлении + X)	+X: 0.246	-5.46	0.00	15.40
1D – УНТ/графен	Y: 4.090	-4.52	0.00	4.19

Примечание: L – длина вектора трансляции, E_F – уровень Ферми, E_g – ширина энергетической щели; R – значения электрического сопротивления.

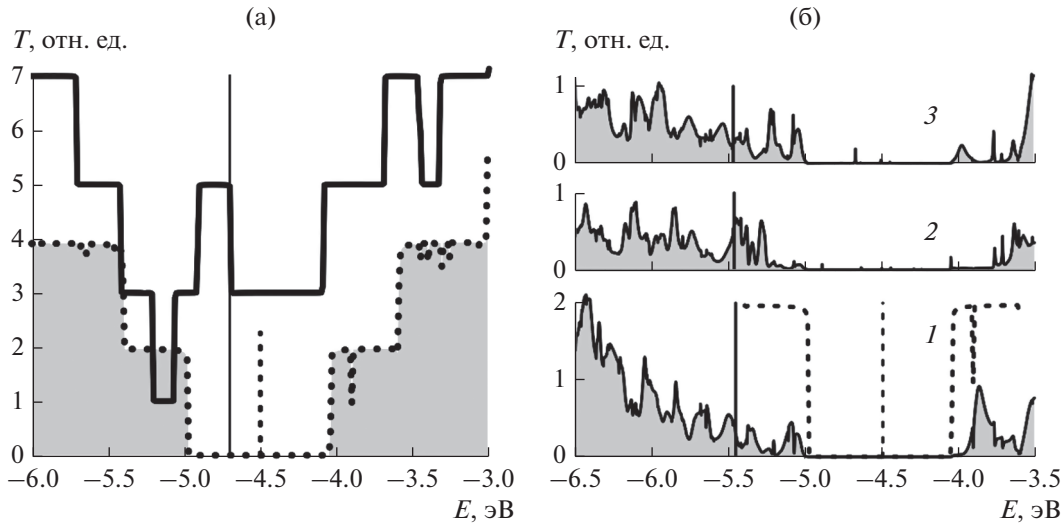


Рис. 2. Функция пропускания индивидуальной ОУНТ (6,5) (пунктирная кривая) и графеновой наноленты (сплошная кривая) (а), а также трехполосника, представленного Т-образным контактом графен/ОУНТ (б): для полубесконечной ОУНТ, контактирующей с Т-образным соединением в направлении $-Y$ (1) и $+Y$ (2), и для контакта полубесконечной графеновой зигзаг-наноленты с графеновой чешуйкой Т-образного соединения в направлении $+X$ (3). Сплошные вертикальные линии – уровни Ферми графеновой наноленты (а) и Т-образного соединения (б), пунктирные вертикальные линии – уровни Ферми нанотрубки (а, б).

ющие контакт с электродами, T_g – след матрицы передачи, $\Gamma_s(E)$, $\Gamma_d(E)$ – матрицы уширения уровней для истока s и стока d . Физический смысл функции пропускания $T(E)$ заключается в вероятности перехода через проводящий канал электрона с энергией E , (в случае нескольких каналов проводится суммирование по всем каналам проводимости). Функция $T(E)$ отыскивается суммированием по всем точкам первой зоны Бриллюэна (N – число точек обратного пространства). Точность расчета $T(E)$ определяется разбиением обратного пространства. Эффективным разбиением является то, которое обеспечивает сходимость функции пропускания (с увеличением числа точек пространства k функция $T(E)$ не меняется). В данной работе применяется аппарат функций Грина–Келдыша, который позволяет решать нестационарное уравнение Шредингера для сложных систем. Матрицы Грина рассчитываются в виде

$$G^R(E) = \left(E^+ S_C - H_C - \sum_i \Sigma_i(E) \right)^{-1}, \quad (4)$$

где E^+ – единичная матрица (ранг определяется рангом матрицы перекрытий S_C атомных орбиталей проводящего канала), которая умножена на величину энергии электрона E и к которой добавлена бесконечно малая комплексная добавка; H_C – гамильтониан проводящего канала, а Σ_i – матрица собственных энергий i -го контакта. Матрицы собственных энергий – поправки к га-

мильтониану, которые обусловлены взаимодействием проводящего канала с контактами:

$$\Sigma_i(E) = \left(E^+ S_i^+ - \tau_i^+ \right) G_0^i(E) \left(E^+ S_i - \tau_i \right), \quad (5)$$

где τ_i – часть гамильтониана системы, характеризующая взаимодействие проводящего канала и i -го контакта, G_0^i – матрица Грина для изолированного i -го контакта. Матрицы собственных энергий являются комплексными, в которых действительная часть связана со сдвигом энергетических уровней проводящего канала, а мнимая – с уширением уровней; матрицы уширения уровней для каждого из контактов представляют собой удвоенные мнимые части матриц собственных энергий тех же контактов:

$$\Gamma_i(E) = i \left(\Sigma_i(E) - \Sigma_i^*(E) \right). \quad (6)$$

Расчет электропроводности реализован в оригинальной программе Kvarzar/Mizar [52, 53].

В первую очередь были рассчитаны функции пропускания электронов $T(E)$ ОУНТ(6,5) и графеновой зигзаг-наноленты. Профили этих функций, нормированные на квант проводимости e^2/h , представлены на рис. 2а. Обе 1D-структуры характеризуются ступенчатым профилем функции пропускания. Значения уровня Ферми представлены в табл. 1, как и вектора трансляции L , там же указано направление трансляции. Из рис. 2а видно, что графеновая нанолента характеризуется пиком интенсивности на уровне Ферми, а нанотрубка имеет нулевую проводимость в интервале

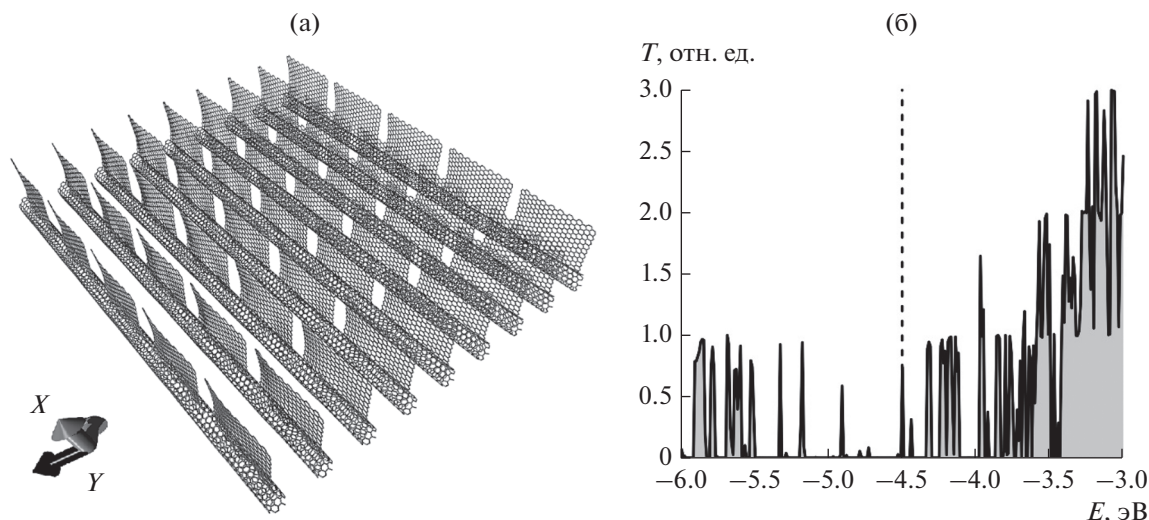


Рис. 3. Пленка на основе квази-1D-структур с регулярными T-образными контактами: а – атомное строение; б – функция пропускания электронов.

(−5.0; −4.05) эВ. На основе функций $T(E)$ рассчитаны электрические сопротивления R (см. табл. 1). На уровне Ферми графеновая зигзаг-нанолента имеет пик проводимости, что характерно для данного типа нанолент из-за краевого эффекта, и это предопределяет малое сопротивление 3.16 кОм. Сопротивление нанотрубки более чем в 100 раз превышает сопротивление графеновой наноленты, поскольку ОУНТ (6,5) является полупроводниковой.

Также были рассчитаны сопротивления контактов трехполюсника R_1, R_2, R_3 (см. рис. 16). На рис. 26 приведены профили соответствующих функций пропускания. Для анализа рассчитанных профилей функции пропускания трехполюсника на рис. 26 показан профиль ОУНТ (6,5), уровень Ферми T-образного соединения и уровень Ферми нанотрубки. Видно, что в результате образования графен/ОУНТ-контакта уровень Ферми сдвигается влево. При этом щель функции пропускания для ОУНТ четко просматривается, но она находится правее на 0.5 эВ от уровня Ферми трехполюсника. В табл. 1 приведены рассчитанные сопротивления подключения полубесконечных ОУНТ к трехполюснику одинаковы и их значения меньше по сравнению с сопротивлением подключения полубесконечной графеновой наноленты. Все три значения сопротивления в ~5 раз больше сопротивления наноленты, но в ~20 раз меньше сопротивления ОУНТ (6,5). Таким образом, установлена высокая электропроводность T-образного соединения графен/ОУНТ, что обуславливается ковалентными связями между графеновой структурой и нанотрубкой.

Далее была рассчитана электропроводность квази-1D-структуры с регулярными T-образными контактами. Подобные структуры в составе пленки образуют матричный катод с регулярно расположенными графеновыми наноэмиттерами атомарной толщины (рис. 3а). Профиль функции пропускания квази-1D-структуры значительно отличается от профиля для T-образного контакта. На уровне Ферми −4.52 эВ находится пик интенсивности ~0.8 кванта проводимости. Наличие пика интенсивности обуславливает низкое сопротивление подобной структуры (см. табл. 1). Ее сопротивление 4.19 кОм только в 1.3 раза больше сопротивления индивидуальной графеновой ленты.

2. ПОВЕДЕНИЕ КВАЗИ-1D-СТРУКТУРЫ С РЕГУЛЯРНЫМИ T-КОНТАКТАМИ В СИЛЬНЫХ ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ПОЛЯХ

Для моделирования поведения исследуемых графен/ОУНТ структур в сильных электрических полях с напряженностью $10^7 \dots 10^8$ В/см была использована квантовая молекулярная динамика Борна–Оппенгеймера на основе метода SCC DFTB с применением расширенного лагранжиана [54]. Этот подход сочетает в себе лучшие достижения подхода Кар–Парринелло и Борна–Оппенгеймера. Расчеты проводились с временным шагом 0.5 фс. Направление силовых линий поля было выбрано вдоль оси X, т.е. максимум напряженности поля приходился на краевые атомы графеновой компоненты. Обнаружено, что частичное разрушение начинается при напряженности поля 1.5×10^8 В/см уже в течение первой пикосекунды с момента появления внешнего поля. При этом графен практически полностью отрывается полем от нано-

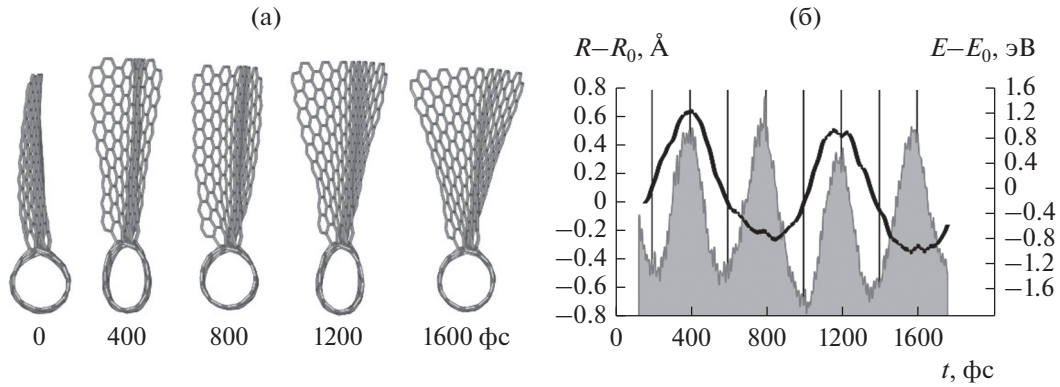


Рис. 4. Поведение квази-1D-структуры с регулярными Т-образными контактами графен/ОУНТ в поле напряженностью 10^8 В/см: а – периодические изменения атомного каркаса суперъячейки во времени; б – осцилляции радиуса ОУНТ (сплошная кривая) и потенциальной энергии (контур серой области).

трубки, и сама нанотрубка в месте отрыва терпит локальные разрывы ковалентных связей.

Важным моментом поведения графен/ОУНТ-структур в сильных полях является не только их разрушение, но и закономерности деформаций атомного остова. Для раскрытия этих закономерностей была проведена серия молекулярно-динамических симуляций поведения структур во внешних полях $10^7 \dots 10^8$ В/см (с шагом 1 В/нм) в течение первых 3...5 пс с момента появления поля. Обнаружено, что при напряженностях поля $10^7 \dots 4 \times 10^7$ В/см атомный каркас квази-1D-структур испытывает незначительные деформации. Однако при увеличении напряженности до 5×10^7 В/см и более в поведении атомного каркаса начинают наблюдаться четкие периодические изменения радиуса ОУНТ и, соответственно, размеров графеновой чешуйки. На рис. 4а показан атомный каркас суперъячейки в разные моменты времени. Видна периодическая деформация, сопровождающаяся осцилляцией каркаса трубки и разворотом графеновой чешуйки. На рис. 4б показаны графики изменения радиуса нанотрубки R и ее потенциальной энергии E относительного равновесного положения системы (значения R_0 и E_0 соответственно) при напряженности электрического поля 10^8 В/см. Радиус трубки осциллирует с периодом ~ 800 фс. Потенциальная энергия осциллирует с периодом в два раза меньше, ее максимумы соответствуют моментам максимального сжатия/растяжения каркаса нанотрубки.

Анализ осцилляций потенциальной энергии E и радиуса R нанотрубки показал, что при напряженности поля в интервале $(5 \dots 10) \times 10^7$ В/см частота колебаний радиуса трубки находится в интервале 1.25...1.26 ТГц. Далее при увеличении напряженности до 2×10^8 В/см частота колебаний уменьшается, поскольку каркас как бы все труднее сопротивляется полю и начинает разрушаться. На

основе полученных знаний о растяжении/сжатии рассчитана пондеромоторная сила. Ее величина находится в пределах 23...36 нН.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Установлено, что графен/ОУНТ-структуры на основе полупроводниковой ОУНТ (6,5) обладают низким сопротивлением и металлическим типом проводимости, который обеспечивается частичным перетеканием заряда с нанотрубки на графеновую наноленту, вызванным sp^3 -гибридизацией электронных облаков атомов в области контакта графен–нанотрубка. Область контакта рассмотрена как трехполюсник, к которому с двух сторон подсоединяются полубесконечные одинаковые ОУНТ (6,5), к третьей – графеновая полубесконечная нанолента. Сопротивления Т-образного контакта составляют для направления с трубками 18.5 кОм, для наноленты – 15.4 кОм. Для бесконечной структуры в виде ОУНТ с регулярными Т-образными контактами сопротивление значительно меньше и составляет 4.19 кОм. При такой высокой электронной проводимости и работе выхода электронов 4.52 эВ подобные структуры очень перспективны в качестве нанолезвийных автоэмиссионных катодов.

Исследовано поведение структур в постоянном электрическом поле напряженностью 1...20 В/нм с силовыми линиями, направленными вдоль графена, но перпендикулярно оси нанотрубки. Установлены критические значения напряженности электрического поля, приводящие к разрушению рассматриваемых квази-1D-структур. Выявлено, что частичное разрушение структуры в виде отрыва графеновых фрагментов от нанотрубки и локального разрыва связей между атомами нанотрубки начинается при напряженности поля 1.5×10^8 В/см. Обнаружены механические осцилляции

атомного каркаса, заключающиеся в периодическом сжатии/растяжении радиуса нанотрубки и, соответственно, вытягивания/сжатия каркаса структуры вдоль силовых линий. Установлено, что при напряженности поля 5...10 В/м колебания являются строго периодическими с частотой 1.25...1.26 ТГц. Определена механическая сила электрического поля, индуцирующая механические осцилляции атомного каркаса. Ее величина составляет 23...36 нН. В полях с меньшим значением напряженности механическая сила уменьшается, частота осцилляций увеличивается, а амплитуда уменьшается. Таким образом, подобные структуры могут быть применены в перспективе при конструировании ТГц-излучателей.

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

ФИНАНСИРОВАНИЕ РАБОТЫ

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации в рамках выполнения государственного задания (проект № FSRR-2020-0004, исследование поведения композитных структур графен/ОУНТ в электрических полях) и Совета по грантам Президента РФ для молодых ученых – кандидатов наук (проект МК-2289.2021.1.2, исследование электронных и электропроводящих свойств Т-образного контакта графен/ОУНТ).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Ramalingame R., Lakshmanan A., Müller F. et al. // J. Sens. Sens. Syst. 2019. V. 8. № 1. P. 87.*
2. *Chen J., Tran V.-T., Du H. et al. // Micromachines. 2021. V. 12. № 5. P. 504.*
3. *Wang G., Liu J., Chen K. et al. // J. Colloid Interface Sci. 2019. V. 555. P. 180.*
4. *Jeon I., Matsuo Y., Maruyama S. // Top. Curr. Chem. (Z). 2018. V. 376. № 1. P. 4.*
5. *Wu X., Xie L., Lin K. et al. // J. Mater. Chem. A. 2019. V. 7. № 19. P. 12236.*
6. *Putra N., Rawi S., Amin M. et al. // J. Energy Storage. 2019. V. 21. P. 32.*
7. *Yan H., Xue X., Fu Y. et al. // Ceram. Int. 2020. V. 46. № 7. P. 9729.*
8. *Wang Y., Wei H., Lv H. et al. // ACS Nano. 2019. V. 13. № 10. P. 11235.*
9. *Sun L., Wang X., Wang Y., Zhang Q. // Carbon. 2017. V. 122. P. 462.*
10. *Li M., Zhou X., Ma X. et al. // Chem. Eng. J. 2021. V. 409. P. 128164.*
11. *Yu J., Ma T., Liu S. // Phys. Chem. Chem. Phys. 2011. V. 13. № 8. P. 3491.*
12. *Fuhrer M.S., Nygård J., Shih L. et al. // Sci. 2000. V. 288. № 5465. P. 494.*
13. *Close G.F., Yasuda S., Paul B. et al. // Nano Lett. 2008. V. 8. № 2. P. 706.*
14. *Park W.J., Choi K.J., Kim M.H. et al. // ACS Appl. Mater. Interfaces. 2013. V. 5. № 15. P. 6802.*
15. *Malapanis A., Perebeinos V., Sinha D.P. et al. // Nano Lett. 2013. V. 13. № 1. P. 3531.*
16. *Franklin A.D., Koswatta S.O., Farmer D.B. et al. // Nano Lett. 2013. V. 13. № 6. P. 2490.*
17. *Cretu O., Botello-Mendez A.R., Janowska I. et al. // Nano Lett. 2013. V. 13. № 8. P. 3487.*
18. *Jiang H., Moon K., Wong C.P. // Microelectron. Reliab. 2013. V. 53. P. 1968.*
19. *Glukhova O.E., Zhbanov A.I., Torgashov G.V. et al. // Appl. Surf. Sci. 2003. V. 215. № 1–4. P. 149.*
20. *Sinitsyn N.I., Gulyaev Yu.V., Torgashov G.V. et al. // Appl. Surf. Sci. 1997. V. 111. P. 145.*
21. *Gulyaev Yu.V., Sinitsyn N.I., Torgashov G.V. et al. // J. Vacuum Sci. Technol.: B. 1997. V. 15. № 2. P. 422.*
22. *Miller J.R., Outlaw R.A., Holloway B.C. // Sci. 2010. V. 329. № 5999. P. 1637.*
23. *Hong J., Park S.-J., Kim S. // Electrochim. Acta. 2019. V. 311. P. 62.*
24. *Hao Y., Wang S., Shao Y. et al. // Adv. Energy Mater. 2019. V. 10. P. 1902836.*
25. *Farmani A., Mir A. // IEEE Photonics Technol. Lett. 2019. V. 31. № 8. P. 643.*
26. *Patil P.O., Pandey G.R., Patil A.G. et al. // Biosens Bioelectron. 2019. V. 139. P. 111324.*
27. *Tahernejad-Javazmi F., Shabani-Nooshabadi M., Karimi-Maleh H. // Compos. B: Eng. 2019. V. 172. P. 666.*
28. *Dang V.T., Nguyen D.C., Cao T.T. et al. // Adv. Nat. Sci.: Nanosci. Nanotechnol. 2016. V. 7. № 3. P. 033002.*
29. *Li Y., Ai Q., Mao L. et al. // Sci. Rep. 2021. V. 11. P. 21006.*
30. *Ghosh R., Maruyama T., Kondo H. et al. // Chem. Commun. 2015. V. 51. № 43. P. 8974.*
31. *Shi E., Li H., Yang L. et al. // Adv. Mater. 2015. V. 27. № 4. P. 682.*
32. *Чернозатонский Л.А., Сорокин П.Б., Артюх А.А. // Успехи химии. 2014. V. 83. № 3. P. 251.*
33. *Gorkina A.L., Tsapenko A.P., Gilshteyn E.P. et al. // Carbon. 2016. V. 100. P. 501.*
34. *Du W., Ahmed Z., Wang Q. et al. // 2D Mater. 2019. V. 6. № 4. P. 042005.*
35. *Dimitrakakis G.K., Tylianakis E., Froudakis G.E. // Nano Lett. 2008. V. 8. № 10. P. 3166.*
36. *Wang W., Ozkan M., Ozkan C.S. // J. Mater. Chem. A. 2016. V. 4. № 9. P. 3356.*
37. *Zhao M.Q., Liu X.F., Zhang Q. et al. // ACS Nano. 2012. V. 6. № 12. P. 10759.*
38. *Zhu Y., Li L., Zhang C. et al. // Nat. Commun. 2012. V. 3. P. 1225.*
39. *Du F., Yu D., Dai L. et al. // Chem. Mater. 2011. V. 23. № 21. P. 4810.*
40. *Hassani A., Mosavian M.T.H., Ahmadpour A., Farhadian N. // J. Chem. Phys. 2015. V. 142. № 23. P. 234704.*
41. *Tristán-López F., Morelos-Gómez A., Vega-Díaz S.M. et al. // ACS Nano. 2013. V. 7. № 12. P. 10788.*
42. *Kim S.H., Song W., Jung M.W. et al. // Adv. Mater. 2014. V. 26. № 25. P. 4247.*

43. Yan Z., Peng Z., Casillas G. et al. // ACS Nano. 2014. V. 8. № 5. P. 5061.
44. Yang X., Yu D., Cao B., To A.C. // ACS Appl. Mater. Interfaces. 2017. V. 9. № 1. P. 29.
45. Duan K., Li L., Hu Y., Wang X. // Sci. Rep. 2017. V. 7. P. 14012.
46. Pedrielli A., Taioli S., Garberoglio G., Pugno N.M. // Microporous Mesoporous Mater. 2018. V. 257. P. 222.
47. Chen J., Walther J.H., Koumoutsakos P. // Nanotechnology. 2016. V. 27. P. 465705.
48. Liu Y., Liu Y., Qin S. et al. // Nano Res. 2016. V. 10. № 6. P. 1880.
49. Cai B., Yin H., Huo T. et al. // J. Mater. Chem. C. 2020. V. 8. № 10. P. 3386.
50. Liu B., Alamri M., Walsh M. et al. // ACS Appl. Mater. Interfaces. 2020. V. 12. № 47. P. 53115.
51. Kim H., Kim J., Jeong H.S. et al. // Chem. Commun. 2018. V. 54. № 41. P. 5229.
52. Глухова О.Е., Савостьянов Г.В., Шмыгин Д.С. Многопроцессорный программно-информационный комплекс моделирования молекулярных систем для супер-ЭВМ “KVAZAR II” / Свидетельство о гос. регистрации программы для ЭВМ № 2016619185. Оpubл. офиц. бюл. “Программы для ЭВМ. Базы данных. Топологии интегральных микросхем” № 9 от 20.09.2016.
53. Глухова О.Е., Савостьянов Г.В. Многопроцессорный программно-информационный комплекс моделирования кристаллических структур для супер-ЭВМ “Mizar” / Свидетельство о гос. регистрации программы для ЭВМ № 2016612893. Оpubл. офиц. бюл. “Программы для ЭВМ. Базы данных. Топологии интегральных микросхем” № 4 от 20.04.2016.
54. Aradi B., Niklasson A.M.N., Frauenheim T. // J. Chem. Theory Comput. 2015. V. 11. № 7. P. 3357.