11

Влияние деформации на оптические и оптоэлектронные свойства квази-2D ван-дер-ваальсовых гетероструктур на основе борофена

© М.М. Слепченков[1], Д.А. Колосов[1], О.Е. Глухова[1,2]

[1] Саратовский национальный исследовательский государственный университет им. Н.Г. Чернышевского, Саратов, Россия
[2] Первый Московский государственный медицинский университет им. И.М. Сеченова, Москва, Россия

e-mail: slepchenkovm@mail.ru

Поступила в редакцию 13.01.2025 г.
В окончательной редакции 20.01.2025 г.
Принята к публикации 07.04.2025 г.

Методами *ab initio* проведен прогностический анализ влияния деформации растяжения/сжатия на оптические и оптоэлектронные свойства ван-дер-ваальсовых квази-2D гетероструктур, образованных гофрированным борофеном с треугольной кристаллической решеткой и графеноподобными нитридом галлия GaN и оксидом цинка ZnO. Подробно рассматриваются случаи деформации, приводящие к появлению энергетической щели в электронном строении исследуемых ван-дер-ваальсовых гетероструктур: одноосное сжатие на 14% и двухосное сжатие на 4% в случае гетероструктуры борофен/GaN и одноосное растяжение на 10% и двухоосное сжатие на 6% в случае гетероструктуры борофен/ZnO. Показано, что при одноосных деформациях спектры поглощения обеих гетероструктур наиболее заметно изменяются в области ИК диапазона, демонстрируя увеличение коэффициента поглощения в несколько раз по сравнению с его значениями в отсутствие деформаций. Наибольшей величиной поглощения в ИК диапазоне характеризуется гетероструктура борофен/GaN при одноосном сжатии на 14%. В случае двухосных деформаций для гетероструктуры борофен/GaN также характерно увеличение коэффициента поглощения в ИК диапазоне, а для гетероструктуры борофен/ZnO помимо увеличения поглощения в ИК диапазоне обнаружено увеличение пика поглощения в области диапазона видимого излучения при двухосном сжатии на 6%. Показано, что осевая деформация растяжения/сжатия вызывает усиление генерации фототока у исследуемых гетероструктур в диапазонах ИК и видимого излучения за счет увеличения их коэффициента поглощения в указанных диапазонах длин волн.

Ключевые слова: борофеновые гетероструктуры, осевое растяжение/сжатие, теория функционала плотности, спектр поглощения, фототок.

DOI: 10.61011/OS.2025.05.60782.33-25

1. Введение

После открытия графена [1] заметно возрос интерес к экспериментальному получению и исследованию двумерных (2D) материалов [2]. По сравнению со своими объемными аналогами 2D-материалы имеют большую площадь поверхности и более высокую реакционную способность, что в сочетании с эффектом квантового ограничения приводит к их уникальным физическим и химическим свойствам [2]. Следом за графеном в фокусе исследований оказались другие 2D-материалы, такие как гексагональный нитрид бора (h-BN) [3], черный фосфор [4], силицен [5], станен [6], германен [7], представители дихалькогенидов переходных металлов [8]. В настоящее время семейство 2D-материалов продолжает пополняться новыми членами [9], однако лишь небольшая часть из них является моноэлементными. Среди наиболее интересных моноэлементных материалов выделяется 2D аллотропная форма бора, именуемая борофеном [10]. Этот материал обладает уникальными упругими, электронными, оптическими, термическими и транспортными свойствами [11–14], что говорит о многообещающих перспективах его использования в суперконденсаторах, устройствах хранения энергии, сенсорах, медицинском оборудовании и в оптоэлектронике [15]. Как известно, трехвалентный бор имеет множество аллотропных модификаций. Подобный полиморфизм присущ и борофену. Методами *ab initio* было предсказано существование различных атомных конфигураций 2D-наноструктур бора [16]. Помимо листов с гексагональной и треугольной решетками [17], а также гофрированных листов с треугольной решеткой [18], существуют и другие разновидности 2D-листов бора с гексагональными отверстиями [19], в том числе α-лист, β-лист, γ-лист. Экспериментально различные аллотропные формы борофена можно получать методами атомно-слоевого осаждения на металлических подложках [20]. В настоящее время успешно синтезируются такие конфигурации борофена как гофрированный с треугольной решеткой, гексагональный, $\beta 12$ и χ^3 [14]. Согласно результатам расчетов *ab initio*, наибольшей энергетической стабильностью обладает гофрированный

борофен с треугольной кристаллической решеткой [21]. Кроме того, данная аллотропная модификация борофена является сильно анизотропным металлом с высоким модулем Юнга вдоль его направления armchair, превышающим модуль Юнга графена [22], и характеризуется заметной анизотропией теплопроводности [23]. Благодаря присущему борофену полиморфизму он обладает хорошей возможностью образовывать гетероструктуры (вертикальные или латеральные) с различными 2*D*-материалами [24]. Первыми экспериментально были реализованы борофен-графеновые вертикальные гетероструктуры [25–27], продемонстрировавшие хорошую структурную стабильность. Подобные гетероструктуры уже применяются для создания датчика влажности, показавшего чувствительность примерно в 700 раз выше, чем у обычного графена, и в 27 раз выше, чем у индивидуального борофена [26]. Вертикальные 2*D*-гетероструктуры борофен-MoS_2 рассматриваются как перспективный материал для разработки газовых сенсоров [28] и датчиков влажности, имеющих высокую чувствительность и быстрый отклик [29]. Методами *ab initio* прогнозируется создание вертикальных гетероструктур борофен/*g*-C_2N [30], борофен/MX_2 (M = Mo, W и X = S, Se) [31] и борофен/InSe [32], которые являются перспективными кандидатами для реализации контакта металл-полупроводник с барьером Шоттки.

В настоящей работе рассматриваются борофеновые ван-дер-ваальсовые квази-2*D*-гетероструктуры двух типов — борофен/GaN и борофен/ZnO, предсказанные нами ранее методами *ab initio* [33]. Для их построения использовались гофрированный борофен с треугольной решеткой и графеноподобные слои GaN и ZnO. Целью исследования является выявление закономерностей влияния деформации растяжения/сжатия на оптические и оптоэлектронные свойства этих гетероструктур.

2. Методы исследования

Расчеты исследуемых гетероструктур проводились в рамках формализма теории функционала плотности (*DFT*) в программном пакете *SIESTA* [34] с использованием базисного набора поляризационных функций *DZP* и обменно-корреляционного функционала *GGA* (обобщенная градиентная аппроксимация) в формулировке Пердью, Бурке и Эрнзерхофа (*PBE*) [35]. Наличие сил Ван-дер-Ваальса между слоями гетероструктуры учитывалось введением дисперсионных поправок Гримма [36]. Нахождение равновесной конфигурации супер-ячеек гетероструктур выполнялось путем минимизации полной энергии электронной системы с помощью алгоритма Бройдена-Пулая [37]. Релаксация структуры проводилась до тех пока, силы, действующие на каждый атом, не становились менее 0.025 eV/Å. Для того чтобы исключить влияние слоев гетероструктуры друг на друга в не периодичном направлении, величина вакуумного промежутка выбиралась равной 20 Å. Кинетическая энергия отсечки в расчетах составляла 150 Ry. Разбиение зоны Бриллюэна проводилось по схеме Монхорст-Пака [38] с сеткой $12 \times 6 \times 1$ из *k*-точек.

Максимальное значение фототока рассчитывается формуле:

$$I_{\max} = e \int_{\omega_1}^{\omega_2} \frac{A(\omega) Power_{\text{solar}}(\omega)}{h\nu}\, d\omega, \tag{1}$$

где e — заряд электрона; $A(\omega)$ — коэффициент поглощения; $Power_{\text{solar}}(\omega)$ — мощность солнечного излучения; $h\nu$ — энергия кванта солнечного излучения.

Коэффициент поглощения рассчитывается в рамках нестационарной теории возмущений первого порядка [39]:

$$A(\omega) = \frac{\omega}{cn(\omega)}\, \varepsilon_2(\omega), \tag{2}$$

где $\varepsilon_2(\omega)$ — мнимая часть комплексной диэлектрической проницаемости, $n(\omega)$ — показатель преломления, c — скорость света, ω — частота электромагнитного излучения. Мнимая часть диэлектрической проницаемости $\varepsilon_2(\omega)$ определяется по формуле вида:

$$\varepsilon_2(\omega) = \frac{e^2}{\pi m^2 \omega^2} \sum_{v,c} \int_{BZ} d\vec{k} |\langle |\psi_{ck}| \hat{\mathbf{e}}, \mathbf{p} |\psi_{vk}\rangle|^2 \times \delta(E_c(k) - E_v(k) - \hbar\omega), \tag{3}$$

где суммирование проводится по каждой паре состояний валентной (заполненной) зоны и зоны проводимости (незанятой), а интегрирование — по всем *k*-точкам в зоне Бриллюэна, индексы c и v относятся к электронным состояниям в зоне проводимости и валентной зоне соответственно, $E(c, v)(k)$ и $\psi(c, v), k$ — энергии и собственные функции этих состояний. Матричный элемент электронного дипольного перехода находится между заполненным и незанятым состояниями, где $\hat{\mathbf{e}}$ — вектор поляризации, а $\mathbf{P}$ — оператор импульса. Оптические параметры исследуемых ван-дер-ваальсовых гетероструктур рассчитывались для двух разных направлений поляризации света (вектор $\mathbf{E}$ параллелен оси X и параллелен оси Y) в диапазоне длин волн $0.28 - 2\,\mu$m. Расчет оптических характеристик исследуемых гетероструктур проводился при разбиении зоны Бриллюэна с размером сетки *k*-точек $960 \times 480 \times 1$.

3. Атомистические модели борофеновых ван-дер-ваальсовых гетероструктур при деформациях сжатия и растяжения

Подробное описание процесса получения супер-ячеек гетероструктур борофен/GaN и борофен/ZnO содержится в работе [33]. На рис. 1 показаны их равновесные конфигурации. Векторы трансляции супер-ячейки гетероструктуры борофен/GaN — $L_x = 3.35$ Å и $L_y = 6.10$ Å;

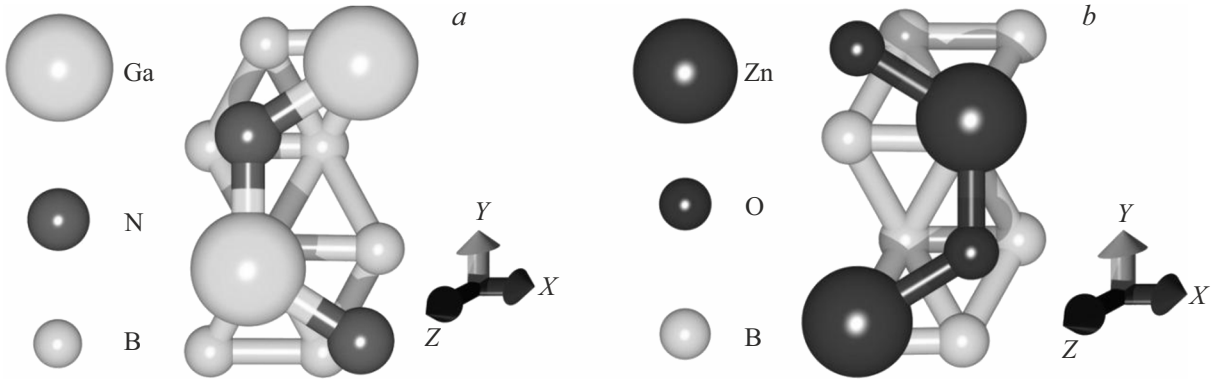

Рис. 1. Супер-ячейки борофеновых ван-дер-ваальсовых гетероструктур: (*a*) борофен/GaN; (*b*) борофен/ZnO.

векторы трансляции супер-ячейки гетероструктуры борофен/ZnO — $L_x = 3.28$ Å и $L_y = 5.83$ Å. Расстояние между слоями борофена и GaN вдоль оси Z составило 2.91 Å, между слоями борофена и ZnO — 2.51 Å.

По результатам проведенных ранее исследований электронного строения гетероструктур борофен/GaN и борофен/ZnO [33] было установлено, что они имеют бесщелевую зонную структуру, что обусловлено определяющим вкладом гофрированного борофена с треугольной решеткой в формирование зоны проводимости. Как известно, для эффективного применения ван-дер-ваальсовых гетероструктур в устройствах фотовольтаики, в частности, для солнечных батарей, необходимо обеспечить наличие у них энергетической щели между валентной зоной и зоной проводимости. Одним из возможных способов открытия энергетической щели в зонной структуре наноматериала является деформация. В рамках нашего предыдущего исследования *ab initio* ван-дер-ваальсовые гетероструктуры борофен/GaN и борофен/ZnO подвергались одноосной и двухосной деформации сжатия/растяжения [40]. Рассматривались случаи одноосной деформации сжатия и растяжения вдоль оси Y (вдоль зигзагообразного края листа борофена) на 1–14 % и двухосной деформации сжатия и растяжения вдоль осей X (поперек зигзагообразного края листа борофена) и Y на 1–10 %. По результатам проведенных численных экспериментов было установлено, что у гетеростуктуры борофен/GaN энергетическая щель появляется в случаях одноосного сжатия на 14 % (0.028 eV) и двухосного сжатия на 4 % (0.018 eV), а у гетероструктуры борофен/ZnO она появляется при одноосном растяжения на 10 % (0.063 eV) и двухоосном сжатии на 6 % (0.012 eV). Причем для открытия щели необходимо обеспечить наличии нулевой плотности электронных состояний (DOS) вблизи уровня Ферми в распределениях DOS электронных орбиталей и атомов борофена, и атомов GaN/ZnO. Именно отмеченные выше случаи деформации и были нами отобраны для анализа оптических и оптоэлектронных свойств деформированных ван-дер-ваальсовых гетероструктур борофен/GaN и борофен/ZnO.

4. Оптические и оптоэлектронные свойства борофеновых ван-дер-ваальсовых гетероструктур при деформациях сжатия и растяжения

Для исследуемых ван-дер-ваальсовых гетероструктур проводились расчеты спектров поглощения и спектров фототока в диапазоне длин волн электромагнитного излучения 0.28–2 μm. Рассчитанные спектры поглощения для недеформированной и деформированной гетероструктуры борофен/GaN представлены на рис. 2. Численная оценка коэффициента поглощения выполнялась для двух случаев поляризации электромагнитного излучения: вдоль оси X (поперек зигзагообразного края листа борофена) и вдоль оси Y (вдоль зигзагообразного края листа борофена). Из графиков на рис. 2, *a* видно, что для недеформированной гетероструктуры борофен/GaN характерна анизотропия коэффициента поглощения. Как показано в нашей предыдущей работе [41], наблюдаемая анизотропия объясняется тем, что при поляризации света вдоль оси X определяющий вклад в оптические свойства гетероструктуры борофен/GaN вносит слой GaN, а при поляризации света вдоль оси Y — борофен. При этом в обоих случаях поляризации пик поглощения приходится на область среднего УФ излучения, но его величина при поляризации света вдоль оси Y в 3 раза выше, чем при поляризации вдоль оси X. Рисунки 2, *b* и 2, *c*, наглядно показывают, что и одноосное, и двухосное сжатие вносят существенные изменения в спектр поглощения гетероструктуры борофен/GaN, что обусловлено, в первую очередь, появлением энергетической щели в ее зонной структуре. Одноосная деформация сжатия на 14 % (рис. 2,b) вызвала увеличение высоты пика поглощения в области ИК диапазона в 3.5 раза при поляризации света вдоль оси X (с 4.5 % до 15.8 %) и в 13 раз при поляризации света вдоль оси Y (с 1 до 13.2 %). В УФ диапазоне пик поглощения смещается по шкале длин волн из области среднего УФ в область ближнего УФ с сохранением

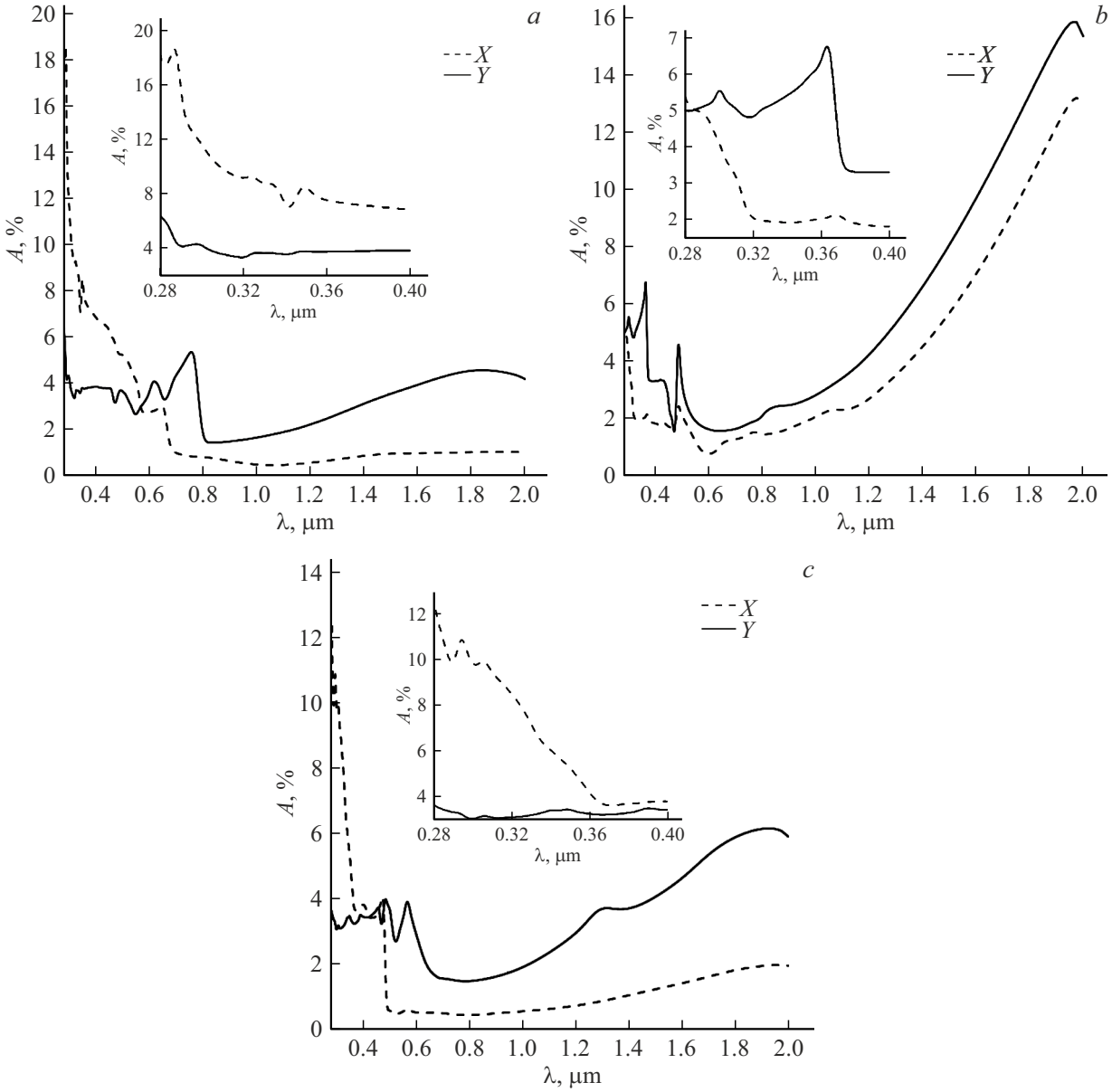

Рис. 2. Коэффициент оптического поглощения ван-дер-ваальсовой гетероструктуры борофен/GaN при поляризации света вдоль осей X и Y: (a) в отсутствие деформации; (b) при одноосном сжатии на 14%; (c) при двухосном сжатии на 4%. На вставках к рисункам показаны фрагменты спектров поглощения в УФ диапазоне длин волн.

своей высоты для случая поляризации света вдоль оси X и уменьшается по высоте в 3.5 раза, но остается попрежнему в пределах области среднего УФ в случае поляризации света вдоль оси Y. Наконец, присутствующий у недеформированной гетероструктуры в видимом диапазоне пик на длине волны $0.75\,\mu$m для случая поляризации света вдоль оси X после деформации смещается в сторону УФ диапазона, занимая длину волны $0.48\,\mu$m и теряя при этом менее 1% высоты. При двухосном сжатии на 4% картина изменений в спектре поглощения гетероструктры борофен/GaN не столь радикальна, как в описанном выше случае одноосной деформации, однако также затрагивает УФ, видимый и ИК диапазоны электромагнитного излучения. Наблюдается снижение высоты пика поглощения в УФ диапазоне с 6.4% до 3.6% для света, поляризованного вдоль оси X, и с 18.2 до 12.8% для света, поляризованного вдоль оси Y. В ИК диапазоне, наоборот, пик поглощения возрастает для обоих случаев поляризации света: с 4.5 до 6% для поляризации вдоль оси X, с 1 до 2% для поляризации вдоль оси Y. В видимом диапазоне при поляризации света вдоль оси X пик поглощения расщепляется на два пика высотой $\sim 3.8\%$ (длины волн $0.56\,\mu$m и $0.45\,\mu$m), которая уступает высоте пика недеформированной гетероструктуры на 1.5%. В целом можно отметить, что при поляризации света вдоль оси Y одноосная деформация

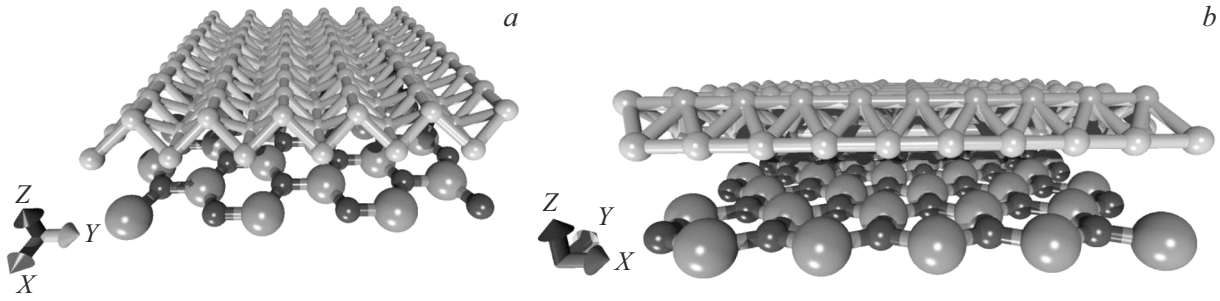

Рис. 3. Расширенный фрагмент гетероструктуры борофен/GaN, состоящий из пяти супер-ячеек: (a) вид спереди; (b) вид сбоку.

сильнее влияет на количественные изменения коэффициента поглощения гетероструктуры борофен/GaN.

Причиной наблюдаемых различий между направлениями поляризации света являются особенности атомного строения 2D-листа борофена с треугольной кристаллической решеткой. Рассмотрим их на примере расширенного фрагмента гетероструктуры борофен/GaN, состоящего из пяти супер-ячеек, изображенных на рис. 1, a. Построенный фрагмент показан на рис. 3 в двух проекциях: вид спереди (рис. 3, a) и вид сбоку (рис. 3, b). Видно, что вдоль оси Y атомы бора формируют зигзагообразные цепочки со множеством поперечных связей, оказывающих высокое сопротивление деформации сжатия, действующей в направлении этой же оси, в то время как в направлении оси X атомы выстраиваются вдоль прямых линий.

Перейдем к обсуждению влияния деформации на спектры поглощения гетероструктуры борофен/ZnO, представленные на рис. 4. Из рис. 4, a видно, что для недеформированной гетероструктуры также свойственна анизотропия коэффициента поглощения при выборе направления поляризации света, как и для гетероструктуры борофен/GaN. Как было показано в нашей предыдущей работе [41], в области УФ и видимого диапазонов основной вклад в формирование спектральных профилей поглощения в направлении оси X вносит ZnO, в направлении оси Y борофен, а в области ИК диапазона проявляется синергетический эффект сочетания борофена и ZnO в составе слоистой структуры. При одноосном растяжении на 10 % наибольшие изменения происходят в области ИК диапазона (рис. 4, b): максимум поглощения возрастает в 2 раза для случая поляризации света вдоль оси X и в 5 раз при поляризации света вдоль оси Y. В последнем случае обращает на себя внимание появление характерного пика максимальной интенсивности на длине волны 1.35 μm, что обусловлено упомянутым выше синергетическим эффектом от взаимодействия борофена и ZnO в гетероструктуре, проявляющемся в виде возрастающего участка характеристик действительной и мнимой частей комплексной диэлектрической проницаемости в области ИК диапазона [41]. В УФ диапазоне максимум поглощения в области ближнего УФ снижается с 3.7 до 3 % для света, поляризационного вдоль оси X, и возрастает с 8.4 до 11.8 % для света, поляризованного вдоль оси Y. В видимом диапазоне наблюдается увеличение максимума поглощения менее, чем на 1 %, и смещение его по длинам волн в сторону УФ диапазона при поляризации света вдоль оси X, а также троекратное увеличение в 3 раза при поляризации света вдоль оси Y. Разница между направлениями поляризации света может быть объяснена тем, что в случае поляризации света вдоль оси X в значительной степени проявляются оптические свойства ZnO, в случае оси Y — борофена. Двухосное сжатие на 6 % приводит к возрастанию максимума поглощения во всех трех рассматриваемых диапазонах электромагнитного излучения при поляризации света вдоль оси X: на 1 % в УФ диапазоне, на 3 % (почти вдвое) в видимом диапазоне и на 2 % (почти вдвое) в ИК диапазоне. При поляризации света вдоль оси Y заметных качественных изменений в профиле спектра поглощения не происходит. Наблюдаются количественные изменения в значениях максимума поглощения в УФ диапазоне (снижение с 8.4 до 6.2 %) и ИК диапазоне (увеличение на 0.2 %). В случае одноосной деформации растяжения можно отметить большую чувствительность оптических свойств гетероструктуры борофен/ZnO при поляризации света вдоль оси Y, что, как и в случае с гетероструктурой борофен/GaN, объясняется геометрическими особенностями 2D-листа борофена в этом направлении (формирование зигзагообразных цепочек со множеством поперечным связей). Эти геометрические особенности можно увидеть из рис. 5, где в двух проекциях показан расширенный фрагмент гетероструктуры борофен/ZnO, состоящий из пяти супер-ячеек, изображенных на рис. 2, a.

На основе полученных спектров поглощения и спектров солнечного излучения на поверхности Земли (AM1.5) и вне земной атмосферы (AM0) для исследуемых ван-дер-ваальсовых гетероструктур рассчитывались спектры фототока. Спектры солнечного излучения AM0 и AM1.5 были взяты с сайта *National Renewable Energy Laboratory* [42], где приведены солнечные спектры в диапазоне длин волн 0.28–2 μm. Рассчитанные спектры фототока недеформированной и деформированной ван-дер-ваальсовой гетероструктуры борофен/GaN показаны на рис. 6. Значения фототока приведены для площади

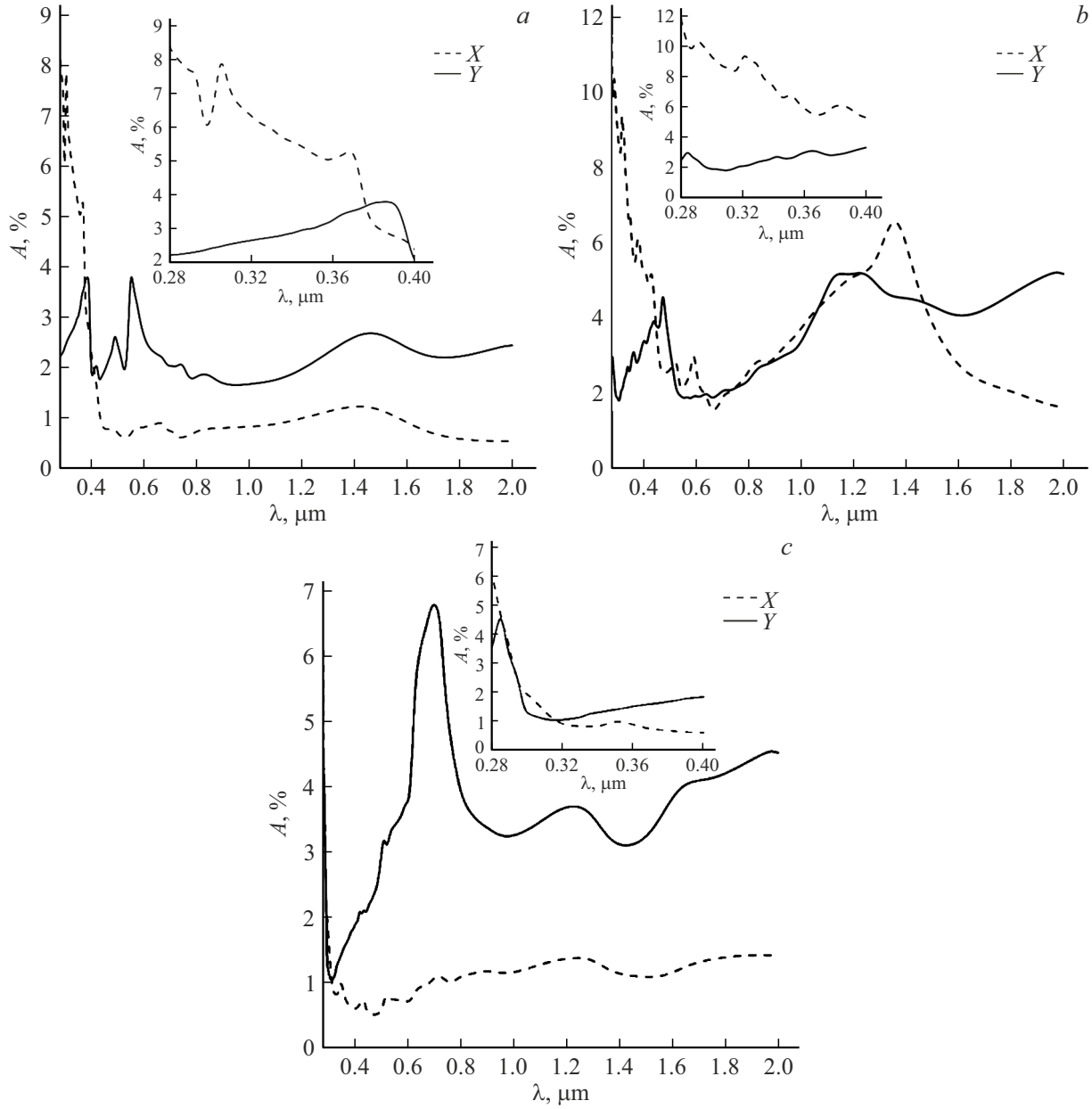

Рис. 4. Коэффициент оптического поглощения ван-дер-ваальсовой гетероструктуры борофен/ZnO при поляризации света вдоль осей X и Y: (a) в отсутствие деформации; (b) при одноосном растяжении на 10 %; (c) при двухосном сжатии на 6 %. На вставках к рисункам показаны фрагменты спектров поглощения в УФ диапазоне длин волн.

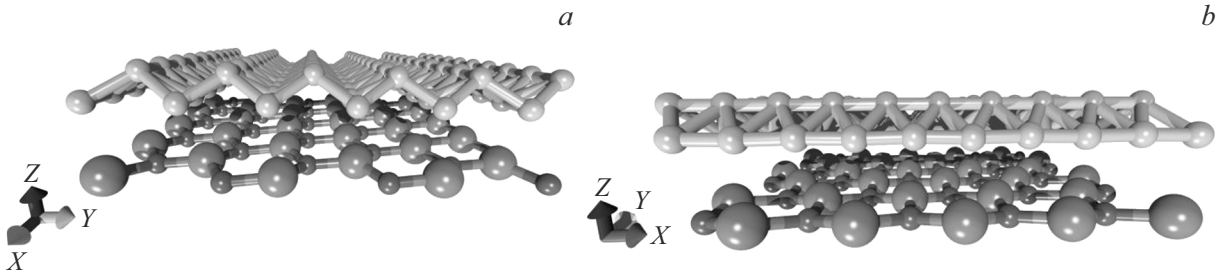

Рис. 5. Расширенный фрагмент гетероструктуры борофен/ZnO, состоящий из пяти супер-ячеек: (a) вид спереди; (b) вид сбоку.

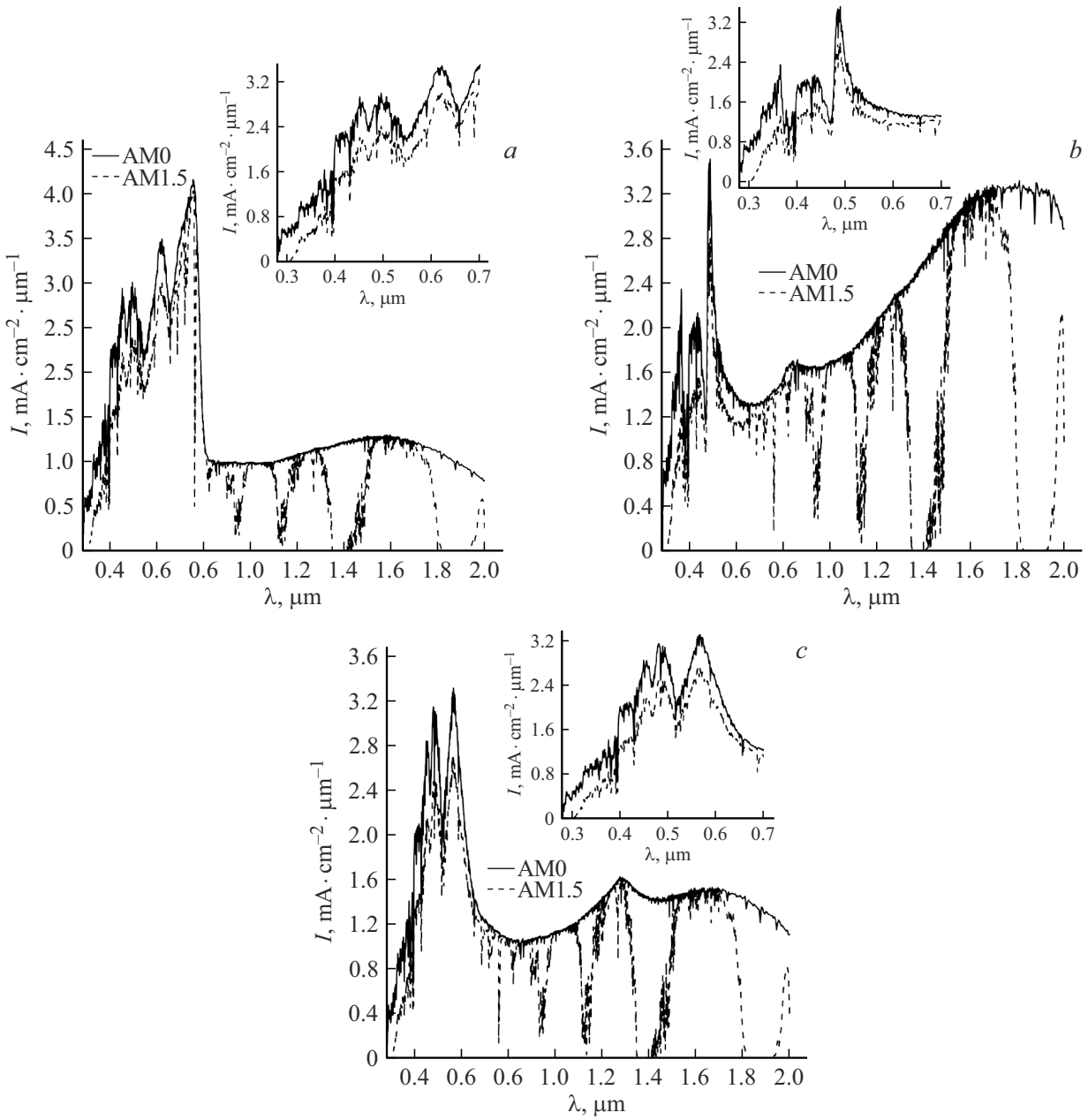

Рис. 6. Спектры фототока на поверхности Земли (AM1.5) и за пределами земной атмосферы (AM0) для гетероструктур борофен/GaN: (*a*) в отсутствие деформации; (*b*) при одноосном сжатии на 14%; (*c*) при двухосном сжатии на 4%. На вставках к рисункам показаны фрагменты спектров фототока в диапазоне длин волн $0.28 - 0.7\,\mu$m.

поверхности, равной $1\,\text{cm}^2$. Как видно из рис. 6, *a*, наибольшая интенсивность интегральной величины фототока наблюдается в области видимого и УФ излучения. Начиная с длины волны $0.8\,\mu$m (ИК диапазон) наблюдается спад величины интегрального фототока, обусловленный, во-первых, малым коэффициентом поглощения гетероструктур в этом диапазоне, во-вторых, меньшей мощностью солнечного излучения (максимум приходится на длину волны $550\,\mu$m). При деформации сжатия как одноосной (рис. 6, *b*), так и двухосной (рис. 6, *c*) наблюдается рост максимального интегрального фототока в области ИК диапазона, причем в случае одноосного сжатия на 14% происходит троекратное увеличение максимума фототока на длине волны $\sim 2\,\mu$m по сравнению с недеформированной структурой (рис. 6, *a*). При этом характерные пики в области видимого диапазона сохраняются для обоих случаев деформации.

На рис. 7 показаны спектры фототока недеформированной и деформированной ван-дер-ваальсовой гетероструктуры борофен/ZnO. В отсутствие деформации можно наблюдать закономерности изменения коэффициента поглощения (рис. 7, *a*), схожие со случаем недефор-

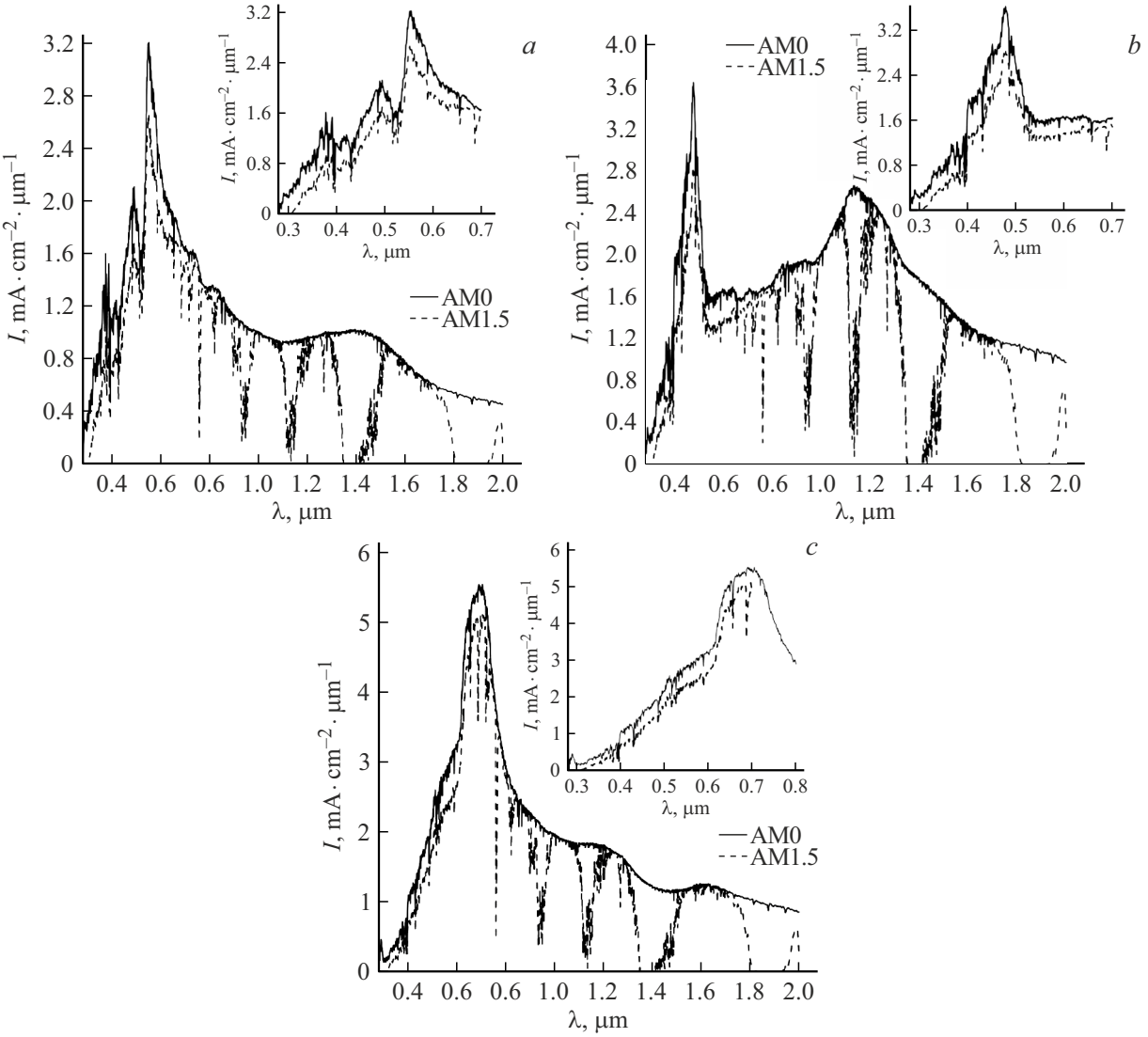

Рис. 7. Спектры фототока на поверхности Земли (AM1.5) и за пределами земной атмосферы (AM0) для гетероструктур борофен/ZnO: (*a*) в отсутствие деформации; (*b*) при одноосном растяжении на 10%; (*c*) при двухосном сжатии на 6%. На вставках к рисункам показаны фрагменты спектров фототока в диапазоне длин волн $0.28 - 0.7\,\mu$m.

мированной гетероструктуры борофен/GaN (рис. 6, *a*). Одноосная деформация растяжения на 10% приводит к двухкратному росту максимального интегрального фототока в ближнем ИК диапазоне (длина волны $1.2\,\mu$m) с сохранением максимума фототока в диапазоне видимого излучения (рис. 7, *b*). Двухосная деформация сжатия на 6% вызывает увеличение интегральной величины фототока во всем рассматриваемом интервале длин волн ИК диапазона и почти двухкратное увеличение максимума фототока в области диапазона видимого излучения (рис. 7, *c*). В целом, можно отметить, что выявленные закономерности изменения коэффициента поглощения в рассматриваемом диапазоне длин волн для исследуемых гетероструктур в присутствии деформации проявляются и в спектрах поглощения, рассчитываемых на основе спектров поглощения.

5. Заключение

Таким образом, с помощью одноосной и двухосной деформации растяжения и сжатия возникает возможность управления оптическими (коэффициент поглощения) и оптоэлектронными (интегральная величина фототока) характеристиками ван-дер-ваальсовых гетероструктур борофен/GaN и борофен/ZnO на основе гофрированного борофена с треугольной кристаллической решеткой. Появление энергетической щели между валентной зоной и зоной проводимости в электронном строении у борофеновых гетероструктур приводит к росту коэффициента поглощения и интегральной величины фототока в области ИК диапазона, особенно заметному для случая одноосной деформации сжатия гетероструктуры борофен/GaN на 14%. В направлении поляриза-

ции света вдоль зигзагообразного края листа борофена влияние одноосных деформаций на количественные изменения коэффициента поглощения и, как следствие, интегральной величины фототока более ощутимое ввиду того, что атомы борофена в этом направлении формируют зигзагообразные цепочки со множеством поперечным связей, оказывающих заметное сопротивление деформации в этом направлении. Прогнозируется, что ван-дер-ваальсовые гетероструктуры борофен/GaN и борофен/ZnO при наличии деформаций растяжения и сжатия, приводящих к появлению энергетической щели в их зонной структуре, могут быть перспективны в качестве чувствительных элементов солнечных батарей ИК диапазона, работающих как на поверхности Земли, так и за ее пределами, а также в качестве эффективных детекторов ИК излучения.

Финансирование работы

Работа выполнена при поддержке гранта Российского научного фонда (проект № 21-72-00082, https://rscf.ru/project/21-72-00082/) и государственного задания Минобрнауки FSRR-2023-0008.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

[1] K.S. Novoselov, A.K. Geim, S.V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S.V. Dubonos, I.V. Grigorieva, A.A. Firsov. Science, **306** 666 (2004). DOI: 10.1126/science.110289
[2] P. Ares, K.S. Novoselov. Nano Mater. Sci., **4**, 3 (2021). DOI: 10.1016/j.nanoms.2021.05.002
[3] M. Corso, W. Auwarter, M. Muntwiler, A. Tamai, T. Greber, J. Osterwalder. Science, **303**, 217 (2004). DOI: 10.1126/science.10919
[4] L. Li, Y. Yu, G.J. Ye, Q. Ge, X. Ou, H. Wu, D. Feng, X.H. Chen, Y. Zhang. Nat. Nanotechnol., **9**, 372 (2014). DOI: 10.1038/nnano.2014.35
[5] L. Tao, E. Cinquanta, D. Chiappe, C. Grazianetti, M. Fanciulli, M. Dubey, A. Molle, D. Akinwande. Nat. Nanotechnol., **10**, 227 (2015). DOI: 10.1038/nnano.2014.325
[6] F.F. Zhu, W.J. Chen, Y. Xu, C.L. Gao, D.D. Guan, C.H. Liu, D. Qian, S.C. Zhang, J.F. Jia. Nat Mater., **14**, 1020 (2015). DOI: 10.1038/nmat4384
[7] M. Davila, L. Xian, S. Cahangirov, A. Rubio, G. Le Lay. New J. Phys., **16**, 095002 (2014). DOI: 10.1088/1367-2630/16/9/095002
[8] S. Manzeli, D. Ovchinnikov, D. Pasquier, O.V. Yazyev, A. Kis. Nat. Rev. Mater., **2**, 17033 (2017). DOI: 10.1038/natrevmats.2017.33
[9] M.M. Uddin, M.H. Kabir, M.A. Ali, M.M. Hossain, M.U. Khandaker, S. Mandal, A. Arifutzzaman, D. Jana. RSC Adv., **13**, 33336 (2023). DOI: 10.1039/d3ra04456d
[10] Y.V. Kaneti, D.P. Benu, X. Xu, B. Yuliarto, Y. Yamauchi, D. Golberg. Chem. Rev., **122**, 1000 (2021). DOI: 10.1021/acs.chemrev.1c00233
[11] C. Hou, G. Tai, Z. Wu, J. Hao. Chempluschem., **85**, 2186 (2020). DOI: 10.1002/cplu.202000550
[12] K. Wang, S. Choyal, J.F. Schultz, J. McKenzie, L. Li, X. Liu, N. Jiang. Chempluschem., **89**, e202400333 (2024). DOI: 10.1002/cplu.202400333
[13] P. Ranjan, J.M. Lee, P. Kumar, A. Vinu. Adv. Mater., **32**, 2000531 (2020). DOI: 10.1002/adma.202000531
[14] G.H. Gupta, S. Kadakia, D. Agiwal, T. Kesharia, S. Kumar. Mater. Adv., **5**, 1803 (2024). DOI: 10.1039/D3MA00829K
[15] P. Kumar, G. Singh, R. Bahadur, Z. Li, X. Zhang, C.I. Sathish, M.R. Benzigar, T.K.A. Tran, N.T. Padmanabhan, S. Radhakrishnan, J.C. Janardhanan, C.A. Biji, A.J. Mathews, H. John, E. Tavakko, A. Vinu. Prog. Mater. Sci., **146**, 101331 (2024). DOI: 10.1016/j.pmatsci.2024.101331
[16] Z. Luo, X. Fan, Y. An. Nanoscale Res. Lett., **12**, 514 (2017). DOI: 10.1186/s11671-017-2282-7
[17] X.B. Li, S.Y. Xie, H. Zheng, W.Q. Tian, H.B. Sun. Nanoscale, **7**, 18863 (2015). DOI: 10.1039/c5nr04359j
[18] K.C. Lau, R. Pati, R. Pandey, A.C. Pineda. Chem. Phys. Lett., **418**, 549 (2006). DOI: https://doi.org/10.1016/j.cplett.2005.10.104
[19] X. Wu, J. Dai, Y. Zhao, Z. Zhuo, J. Yang, X.C. Zeng. ACS Nano, **6**, 7443 (2012). DOI: 10.1021/nn302696v
[20] D. Li, J. Gao, P. Cheng, J. He, Y. Yin, Y. Hu, L. Chen, Y. Cheng, J. Zhao. Adv. Funct. Mater., **30**, 1904349 (2019). DOI: 10.1002/adfm.201904349
[21] A. Horri, R. Faez. Micro Nano Lett., **14**, 992 (2019). DOI: 10.1049/mnl.2019.0023
[22] 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. Yacaman, A. Ponce, A.R. Oganov, M.C. Hersam, N.P. Guisinger. Science, **350**, 1513 (2015). DOI: 10.1126/science.aad1080
[23] H. Sun, Q. Li, X.G. Wan. J. Am. Chem. Soc., **18**, 14927 (2016). DOI: 10.1039/C6CP02029A
[24] R. Yanga, M. Sun. J. Mater. Chem. C, **11**, 6834 (2023). DOI: 10.1039/D3TC00974B
[25] S. Wang, Q. Li, K. Hu, Q. Liu, X. Liu, X. Kong. Compos — A: Appl. Sci. Manuf., **138**, 106033 (2020). DOI: 10.1016/j.compositesa.2020.106033
[26] C. Hou, T. Ga, B. Liu, Z. Wu, Y. Yin. Nano Res., **14**, 2337 (2021). DOI: 10.1007/s12274-020-3232-8
[27] J. Yu, M. Zhou, M. Yang, Y. Zhang, B. Xu, X. Li, H. Tao. Adv. Mater. Interfaces, **9**, 2102088 (2022). DOI: 10.1002/admi.202102088
[28] J. Shen, Z. Yang, Y. Wang, L.C. Xu, R. Liu, X. Liu. Appl. Surf. Sci., **504**, 144412 (2020). DOI: 10.1016/j.apsusc.2019.144412
[29] C. Hou, G. Tai, Y. Liu, Z. Wu, Z. Wua, X. Liang. J. Mater. Chem. A, **9**, 13100 (2021). DOI: 10.1039/D1TA01940F
[30] 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
[31] N. Katoch, A. Kumar, R. Sharma, P.K. Ahluwalia, J. Kumar. Phys. E: Low-Dimens. Syst. Nanostructures, **120**, 113842 (2020). DOI: 10.1016/j.physe.2019.113842
[32] 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
[33] M.M. Slepchenkov, D.A. Kolosov, O.E. Glukhova. Materials, **15**, 4084 (2022). DOI: 10.3390/ma15124084
[34] J.M. Soler, E. Artacho, J.D. Gale, A. García, J. Junquera, P. Ordejón, D. Sánchez-Portal. J. Phys.: Condens. Matt., **14**, 2745 (2002). DOI: 10.1088/0953-8984/14/11/302

[35] 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
[36] S. Grimme. J. Comput. Chem., **27**, 1787 (2006). DOI: 10.1002/jcc.20495
[37] P. Pulay. Chem. Phys. Lett., **73**, 393 (1980). DOI: 10.1016/0009-2614(80)80396-4
[38] H.J. Monkhorst, J.D. Pack. Phys. Rev. B, **13**, 5188 (1976). DOI: 10.1103/PhysRevB.13.5188
[39] E.N. Economou. *Green's Functions in Quantum Physics*, 3rd ed. (Springer, Berlin, 1983), pp. 55–75. DOI: 10.1007/3-540-28841-4_4
[40] М.М. Слепченков, Д.А. Колосов, О.Е. Глухова. ЖТФ, **94** (3), 419 (2024). DOI: 10.61011/JTF.2024.03.57380.7-24 [M.M. Slepchenkov, D.A. Kolosov, O.E. Glukhova. Technical Physics, **69** (3), 397 (2024). DOI: 10.21883/0000000000].
[41] М.М. Слепченков, Д.А. Колосов, О.Е. Глухова. Опт. и спектр., **131** (6), 754 (2023). DOI: 10.21883/OS.2023.06.55909.115-23 [M.M. Slepchenkov, D.A. Kolosov, O.E. Glukhova. Opt. Spectrosc., **131** (6), 712 (2023). DOI: 10.61011/EOS.2023.06.56658.115-23].
[42] *National Renewable Energy Laboratory (NREL)*. [Электронный ресурс]. URL: https://www.nrel.gov/.