

УДК 538.958

DOI 10.25587/SVFU.2022.89.60.006

Е. П. Шарин, Н. Я. Муксунوف

Структурные и электронные свойства гетероструктуры графен/силицен

СВФУ им. М.К. Аммосова, г. Якутск, Россия

E-mail: ep.sharin@s-vfu.ru

E-mail: muksunov97@mail.ru

Аннотация. В последнее время очень популярным стало расширение областей применения двумерных (2D) материалов за счет создания ван-дер-ваальсовых гетероструктур на основе графена. Обычно графен получают осаждением графена на кремниевую подложку, которое облегчает создание гетероструктуры графен/силицен. Создание таких гетероструктур представляет огромные перспективы развития для широкого спектра приложений, связанных прежде всего с пересмотром физических принципов построения и работы приборных структур с использованием графена в сочетании с другими материалами. Таким материалом может быть силицен. Между атомными плоскостями графена и силицена действуют слабые ван-дер-ваальсовские силы, что позволяет предположить, что силицен и графен могут использоваться в качестве идеальных подложек друг для друга с сохранением их внутренней электронной структуры. В этой работе проведено *ab initio* исследование структурных и электронных свойств вертикальной гетероструктуры графен/силицен в зависимости от расстояния между атомными плоскостями графена и силицена. Установлено, что при изменении расстояния между атомными плоскостями, содержащими атомы углерода и силицена, кристаллическая структура системы графен/силицен существенно не меняется. Запрещенные зоны, которые открываются в точках Дирака силицена и графена, сильно зависят от внешних условий, таких как электрические поля и межслойное расстояние. Это указывает на то, что гетероструктура графен/силицен может быть использована для производства высокопроизводительных полевых транзисторов и для создания электродов для литий-ионных батарей высокой емкости.

Ключевые слова: кристаллическая структура, двумерные материалы, ван-дер-ваальсовы гетероструктуры, графен, силицен, моделирование из первых принципов, межслойное расстояние, запрещенная зона, теория функционала плотности, зонная структура.

Для цитирования: Шарин, Е. П. Структурные и электронные свойства гетероструктуры графен/силицен / Е. П. Шарин, Н. Я. Муксунوف // Вестник СВФУ. 2022, №4(90). С. 48–55. <https://doi.org/10.25587/SVFU.2022.89.60.006>

E. P. Sharin, N. Y. Muksunov

Structural and electronic properties of the Graphene/Silicene heterostructure

M.K. Ammosov North-Eastern Federal University, Yakutsk, Russia

E-mail: ep.sharin@s-vfu.ru

E-mail: muksunov97@mail.ru

Abstract. Recently, it has become very popular to expand the scope of two-dimensional (2D) materials by creating van der Waals heterostructures. Graphene is usually obtained by deposition of graphene on a silicon substrate, which facilitates the creation of a Graphene/Silicene heterostructure. The synthesis of such heterostructures presents great development prospects for a wide range of applications, primarily related to the revision of the physical principles of construction and operation of device structures

using graphene in combination with other materials. Such material can be silicene. Weak van der Waals forces act between the atomic planes of graphene and silicene, which suggests that silicene and graphene can be used as ideal substrates for each other while maintaining their internal electronic structure. In this work, an ab initio study of the structural and electronic properties of a vertical Graphene/Silicene heterostructure was carried out, depending on the distance between the atomic planes of graphene and silicene. It has been established that with a change in the distance between the atomic planes containing carbon and silicene atoms, the crystal structure of the Graphene/Silicene system does not change significantly. The band gaps that open up at the Dirac points of silicene and graphene are highly dependent on external conditions such as electric fields and interlayer spacing. This indicates that the Graphene/Silicene heterostructure can be used to produce high-performance field-effect transistors and to create electrodes for high-capacity lithium-ion batteries.

Keywords: crystal structure, two-dimensional materials, van der Waals heterostructures, graphene, silicene, ab initio modeling, interlayer distance, bandgap, density functional theory, band structure.

For citation: Sharin, E. P. Structural and electronic properties of the Graphene/Silicene heterostructure / E. P. Sharin, N. Y. Muksunov // Vestnik of NEFU. 2022, No. 4(90). Pp. 48–55. <https://doi.org/10.25587/SVFU.2022.89.60.006>

Введение

Современная микроэлектроника по-прежнему строится на кремниевой основе. Это связано с тем, что переход на углеродные технологии, основанные на использовании графена, не так уж и прост. Поэтому ученые по всему миру ищут аналоги графена. Одним из таких аналогов мог бы стать силицен, представляющий собой атомарный слой кремния. Впервые силицен был получен методом молекулярно-лучевой эпитаксии на серебряной подложке. Свойства силицена схожи со свойствами его углеродного «родственника» графена. Например, носители заряда обладают таким же линейным законом дисперсии, как и в графене. Важным свойством силицена является большая химическая стабильность по сравнению с графеном. Другими словами, у графеновой полоски атомы углерода, находящиеся на краях, химически более активны, чем такие же атомы в полоске кремния. Это означает, что разрушить силицен намного сложнее, чем графен.

Силицен, двумерная форма кремния, аналогичная графену, в последние годы привлекла к себе всеобщее внимание. Долгое время не удавалось получить силицен, поскольку очень быстро вслед за силиценом образовывался кремний. Оказалось, что кристаллическая структура кремния с энергетической точки зрения более выгодна, чем сотовая (силицена). Однако вскоре ab initio расчетами было подтверждено существование динамически стабильного силицена. В кристалле силицена атомы кремния образуют сотовые конструкции с небольшими искривлениями. Несмотря на геометрию с искривлениями, силицен обладает большинством из уникальных электронных свойств плоского графена, таких как «конус Дирака», высокая скорость Ферми (от 105 до 106 м/с) и подвижность носителей заряда $2.57 \times 10^5 \frac{\text{cm}^2}{\text{Vc}}$ [1–6]. Силицен имеет несколько заметных преимуществ перед графеном: гораздо более сильная спин-орбитальная связь, которая может привести к реализации квантового спинового эффекта Холла при экспериментально достижимой температуре; можно как угодно менять ширину запрещенной зоны, который подходит для создания эффективного полевого транзистора (FET), работающего при температуре окружающей среды; большое спин-орбитальное взаимодействие и отсутствие инверсионной симметрии приводят к образованию запрещенной зоны с двумя впадинами и сильной спин-долинной связью, что пригодно для изучения валлитроники.

В последнее время успешно синтезированы различные монослойные силициновые сверхструктуры на различных подложках, включая поверхности $\text{Ag}(111)$, $\text{Ir}(111)$, $\text{ZrB}_2(0001)$, $\text{ZrC}(111)$ и MoS_2 [7–11]. Экспериментальные достижения вдохновили исследователей на изучение внутренних свойств, а также потенциальных применений силицена в устройствах, включая квантовый спиновый эффект Холла, квантовый аномальный эффект Холла, эффект Холла в квантовой долине, сверхпроводимость, проектирование зон, магнетизм, термоэлектрический эффект, датчик газа, туннелирование. Недавно был изготовлен полевой транзистор на основе силицена, который демонстрирует предсказуемый амбиполярный перенос заряда по Дираку, подобно графену, и открывает путь к наноэлектронике на основе силицена [12]. Свободный силицен обладает электронными свойствами, подобными свойствам графена. До сих пор удается получать силицен только на различных подложках. При этом свойства силицена сильно изменяются за счет влияния поверхности подложки. В результате электронная структура и свойства могут значительно отличаться от теоретически предсказанных для свободного силицена [13]. Нужно учесть, что атомы кремния очень активны, поэтому подобрать подходящую подложку силицену затруднительно. Наиболее подходящей подложкой мог бы быть графен. Предполагается, что обладающий уникальными электронными свойствами графен не будет значительно ухудшать свойства силицена [13, 14]. Однако при создании гетероструктуры графен/силицен нужно иметь в виду, что слишком близкое расстояние между плоскостями, содержащими графен и силицен, ведет к сильному взаимодействию между атомами углерода и кремния, т. е. гетероструктура не будет иметь ван-дер-ваальсовский вид, как это предполагалось в [14]. С другой стороны, слишком большие расстояния между плоскостями не дадут ожидаемого эффекта. Таким образом, возникает проблема выбора наиболее оптимального расстояния между плоскостями, содержащими атомы углерода и кремния.

В настоящей работе с помощью расчетов из первых принципов мы изучаем структурные и электронные свойства вертикальной гетероструктуры графен/силицен в зависимости от расстояния между плоскостями графена и силицена. Результаты расчета показывают, что можно подобрать оптимальное расстояние, при котором сохраняется высокая подвижность носителей тока, что способствует повышению транспортных свойств.

Методика вычисления

Все расчеты выполнены в рамках теории функционала плотности (DFT) с использованием метода псевдопотенциала на основе плоских волн, реализованного в пакете Quantum Espresso. При проведении расчетов по структурной оптимизации и вычислении зонной структуры гетероструктуры графен/силицен обменные и корреляционные эффекты учитывались с помощью приближения локальной плотности (LDA) [3, 15, 16]. Для учета взаимодействия между ионными ядрами и валентными электронами используется модель псевдопотенциалов фон Варта-Кара (Von Barth-Cara, VBC). В разложении волновой функции были учтены плоские волны с энергией до 612 eV, которые обеспечивают хорошую сходимость полной энергии. Выборка электронных состояний в зоне Бриллюэна аппроксимируется с помощью наборов специальных k -точек, соответствующих сетке Монкхорста-Парка ($12 \times 12 \times 1$) для монослоя графена и монослоя силицена, а также сетки Монкхорста-Парка ($9 \times 9 \times 1$) для предлагаемой гетероструктуры Gr/Si. Чтобы минимизировать взаимодействия между двумя суперячейками данной гетероструктуры, суперячейки разделены вакуумным буферным пространством в 20 Å в направлении z , которое перпендикулярно плоскости гетерослоя. Равновесная структура определена минимизацией полной энергии относительно параметров решетки, а внутренние параметры структуры оптимизированы с помощью сил Гельмана–Фейнмана. Процесс минимизации осуществлялся до тех пор, пока остаточные силы на атомах не станут ниже 0.003 эВ/А.

Результаты и обсуждение

Графен представляет собой один слой графита, который имеет плоскую кристаллическую решетку. При этом кристаллическая решетка состоит из атомов углерода, образующих шестиугольники, плотно связанные между собой. Такая структура обусловлена sp^2 -гибридизацией. На внешней оболочке атома углерода расположены четыре электрона. При sp^2 -гибридизации три из них вступают в связь с соседними атомами, а четвертый находится в состоянии, которое образует энергетические зоны. Расстояние между соседними атомами углерода в графене равно 1.42 Å. Как и графен, силицен имеет кристаллическую решетку типа пчелиных сот, но в отличие от графена атомы двух подрешеток этого материала располагаются в разных плоскостях, сдвинутых относительно друг друга на некоторое расстояние. По разным расчетам это расстояние составляет 0.44–0.53 Å [17]. Атомы кремния в силицене связаны посредством смешанной sp^2 - и sp^3 -гибридизации. Расстояние между соседними атомами кремния в силицене равно 2.3 Å. Из этих двух кристаллических структур мы создали ван-дер-ваальсовскую вертикальную гетероструктуру графен/силицен (рис. 1). Постоянные решеток графена и силицена разительно отличаются между собой: так, постоянная решетки у графена равна 2.456 Å, тогда как у силицена – 3.89 Å. Поэтому совместить эти кристаллические решетки трудно. В литературе дается много вариантов совмещения решеток. Для наших расчетов для графена мы взяли суперячейку размером 3x3, а для силицена – суперячейку размером 2x2. Постоянная кристаллической решетки гетероструктуры составляет $a = 7.368$ Å. Следует заметить, что здесь имеется небольшое несоответствие решеток – примерно 2.5%. Это несоответствие решеток такое же, как и в [14, 18], где рассматривался один слой силицена, находящийся между двумя слоями графена. На рис. 1 показана исходная кристаллическая структура системы графен/силицен, которая была построена в пакете Vesta [19]. Минимальное расстояние между слоями, содержащими атомы углерода и кремния, составляет 3.0 Å. Атомы подрешеток в слое силицена сдвинуты относительно друг друга на расстояние 0.44 Å (рис. 1(a)). В исходных кристаллических структурах расстояние между соседними атомами углерода в графене одинаково и составляет 1.418 Å, и в силицене расстояние между ближайшими атомами кремния – 2.2886 Å (рис. 1(b)).

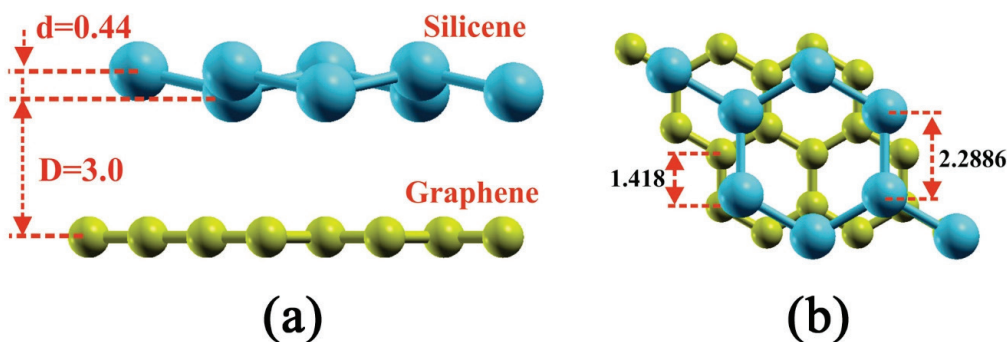


Рис. 1. Кристаллическая структура гетероструктуры графен/силицен: желтые и синие шары представляют собой атомы углерода (C) и кремния (Si) соответственно. Все расстояния даны в Å

Fig. 1. Crystal structure of the graphene/silicene heterostructure: yellow and blue balls represent carbon (C) and silicon (Si) atoms, respectively. All distances are given in Å

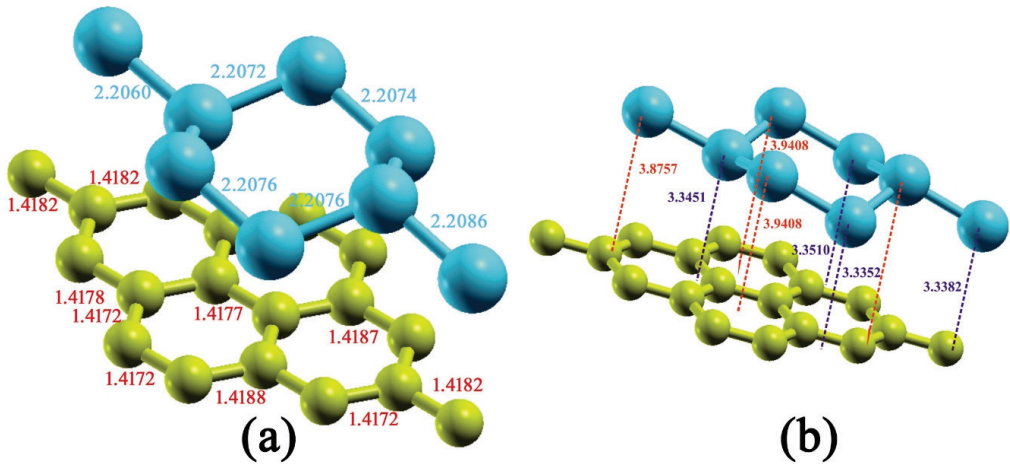


Рис. 2. Оптимизированная кристаллическая структура гетероструктуры графен/силицен: желтые и синие шары представляют собой атомы углерода (C) и кремния (Si), соответственно. Все расстояния даны в Å

Fig. 2. Optimized crystal structure of graphene/silicene heterostructure: yellow and blue spheres represent carbon (C) and silicon (Si) atoms, respectively. All distances are given in Å

На рис. 2 показана оптимизированная кристаллическая структура вертикально уложенной структуры графен/силицен. Если говорить о структуре графен/силицена, то после оптимизации геометрия системы изменяется незначительно. Однако расстояния между отдельными атомами меняются разительно. Из рис. 2(a) видно, что расстояния между атомами кремния значительно сокращаются и меняются от 2.060 Å до 2.2086 Å. При этом до оптимизации расстояние между ближайшими соседними атомами кремния было равно 2.2886 Å. Межатомные расстояния в слое, содержащем атомы углерода, изменяются незначительно от 1.4172 Å до 1.4188 Å. Таким образом, в целом геометрическая структура системы графен/силицен изменяется незначительно. Здесь следует учесть, что расстояния между атомами кремния в силиcene значительно больше, чем расстояния между атомами углерода в графене, в силу этого происходит вертикальное смещение атомов кремния. Вследствие этого лист силицена не будет в точности повторять форму листа графена, т. е. появятся дополнительные неровности поверхности в листе кремния (рис. 2(b)).

На рис. 3 показана зависимость энергии от волнового вектора гетероструктуры графен/силицен: (a) – расстояние между слоями, содержащими атомы C и Si, составляет 2 Å, (b) – межслоевое расстояние равно 4 Å и (c) – межслоевое расстояние равно 6 Å. Из рис. 3 видно, что точки Дирака графена и силицена все еще сохраняются. Скорости Ферми в точках Дирака практически не изменяются в гетероструктуре графен/силицен по сравнению с тем, что мы имеем отдельно в графене и силиcene ($v_F = 0.8 \cdot 10^6 \text{ мс}^{-1}$ для графена и $v_F = 0.5 \cdot 10^6 \text{ мс}^{-1}$ для силицена) [20]. Небольшие запрещенные зоны открываются в точках Дирака: 50 meV для графена и силицена (рис. 3(a)), 51 meV для графена и 44 meV для силицена (рис. 3 (b)). Однако в случае, когда межслоевое расстояние равно 6 Å, этого не происходит. Это видимо связано с тем, что на таких расстояниях взаимодействие между слоями становится пренебрежимо малым.

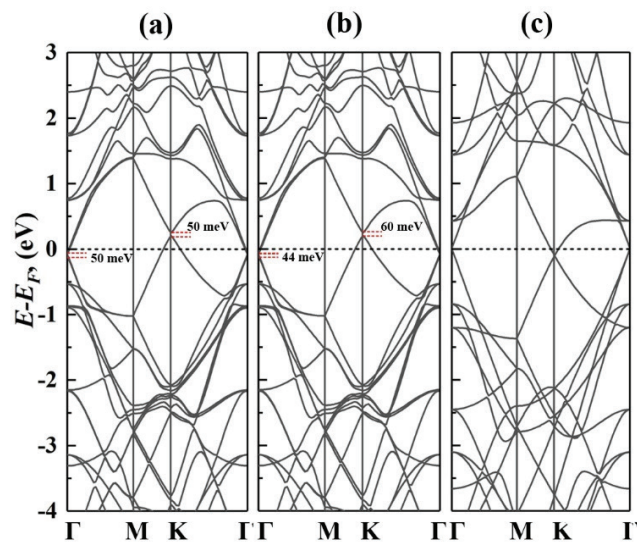


Рис. 3. Зонная структура гетероструктуры графен/силицен: (а) – зонная структура гетероструктуры графен/силицен, когда расстояние между слоями равно 2 Å, (б) зонная структура графен/силицен, когда расстояние между слоями равно 4 Å, (с) – зонная структура графен/силицен, когда расстояние между слоями равно 6 Å

Fig. 3. Band structure of the graphene/silicene heterostructure: (a) band structure of the graphene/silicene heterostructure when the distance between layers is 2 Å, (b) band structure of graphene/silicene when the distance between layers is 4 Å, (c) band structure graphene/silicene structure when the distance between layers is 6 Å

Заключение

В рамках метода теории функционала плотности изучены зависимости структурных и электронных свойств гетероструктуры графен/силицен от расстояния между слоями. Расстояние между слоями, содержащими атомы углерода и силицена, варьировалось от 2 до 6 Å. Установлено, что геометрия гетероструктуры графен/силицен существенно не меняется.

Расстояния между атомами в силиcene значительно больше, чем расстояния между атомами углерода в графене, в силу этого происходит вертикальное смещение атомов кремния от начальных положений. Вследствие этого лист силицена не будет в точности повторять форму листа графена, т. е. появятся неровности поверхности в листе кремния. Между силиценом и графеном преобладают слабые ван-дер-ваальсовские взаимодействия, что позволяет предположить, что силицен и графен могут использоваться в качестве идеальных подложек друг для друга с сохранением их внутренней электронной структуры. Индуцированные запрещенные зоны в точках Дирака силицена и графена сильно зависят от внешних условий, таких как электрические поля и межслойное разделение, что указывает на большой потенциал для использования в высокопроизводительных полевых транзисторах и для создания электродов для литий-ионных батарей большой емкости.

Л и т е р а т у р а

1. Evidence of silicene in honeycomb structures of silicon on Ag(111) / B. Feng, Z. Ding, S. Meng, Y. et. al. // Nano Lett. – 2012. – V. 12. – P. 3507-3511. DOI: 10.1021/nl301047g.
2. Silicene: compelling experimental evidence for graphene like two dimensional silicon / P. Vogt, P. De Padova, C. Quaresima, et. al. // Phys. Rev. Lett. – 2012. – V. 108. – P. 155501. DOI: 10.1103/PhysRevLett.108.155501.
3. Muksunov, N. Y. Electronic properties of hybrid graphene/silicene nanocomposite / N. Y. Muksunov, E. P. Sharin // AIP Conference Proceedings. – AIP Publishing LLC, 2022. – 2528. – №. 1. – P. 020041.
4. Two- and one-dimensional honeycomb structures of silicon and germanium / S. Cahangirov, M. Topsakal, E. Akturk et. al. // Phys. Rev. Lett. – 2009. – V. 102. – P. 236804. DOI:10.1103/PhysRevLett.102.236804.
5. Ezawa, M. Valley-polarized metals and quantum anomalous hall effect in silicene / M. Ezawa // Phys. Rev. Lett. – 2012. – V. 109. – P. 055502. DOI:10.1103/PhysRevLett.109.055502.
6. Liu, C.-C. Quantum spin hall effect in silicene and two-dimensional germanium / C.-C. Liu, W. Feng, Y. Yao // Phys. Rev. Lett. – 2011. – V. 107. – P. 076802. DOI:10.1103/PhysRevLett.107.076802.
7. Silicene on zirconium carbide (111) / T. Aizawa, S. Suehara, S. Otani // The Journal of Physical Chemistry C. – 2014. – Vol. 118, no. 40. – P. 23049-23057.
8. Buckled silicene formation on Ir (111) / L. Meng, Y. Wang, L. Zhang, et. al. // Nano letters. 2013. – Vol. 13, no. 2. – P. 685-690.
9. Experimental evidence for epitaxial silicene on diboride thin films / A. Fleurence, R. Friedlein, et. al. // Physical review letters. – 2012. – Vol. 108, no. 24. – P. 245501.
10. Silicene: compelling experimental evidence for graphenelike two-dimensional silicon / P. Vogt, P. De Padova, C. Quaresima, et. al. // Physical review letters. – 2012. – Vol. 108, no. 15. – P. 155501.
11. Two-Dimensional Si Nanosheets with Local Hexagonal 104 Structure on a MoS2 Surface / D. Chiappe, E. Scalise, E. Cinquanta, et. al. // Advanced Materials. – 2014. – Vol. 26, no. 13. – P. 2096-2101.
12. Silicene field-effect transistors operating at room temperature / Tao L. et. al. // Nature nanotechnology. – 2015. – Vol. 10. – №. 3. – P. 227-231.
13. Галашев, А. Е. Применение дефектного силицена и графена для анода литий-ионных батарей: компьютерный эксперимент / А. Е. Галашев, О. Р. Рахманова, Ю. П. Зайков // Физика твердого тела. – 2016, том 58, вып. 9. – С. 1786–1793.
14. Neek-Amal, M. Realization of Free-Standing Silicene Using Bilayer Graphene / M. Neek-Amal, A. Sadeghi, G.R. Berdiyrov et. al. // Appl. Phys. Lett. – 2013. – Vol. 103. – P. 261904. DOI: 10.1063/1.4852636.
15. Sharin, E. P. Electronic properties of boron doped single-layer graphene / E. P. Sharin, R. S. Tikhonov // AIP Conference Proceedings. – 2018. – 2041. – P. 020020–1–4. <https://doi.org/10.1063/1.5079351>
16. Sharin, E. P. Effect of doping on the electronic properties of graphene / E. P. Sharin, K. V. Evseev // Magnetic resonance in solids. – 2019. – 21. – P. 1–7.
17. Spencer, M. Silicene: Structure, Properties and Applications / M. Spencer, T. Morishita. – Springer. – 2016. – 283 p.
18. Hu, W. Structural, Electronic, and Optical Properties of Hybrid Silicene and Graphene Nanocomposite / W. Hu, Z. Li, J.J. Yang // Chem. Phys. – 2013. – V. 139. – P. 154704. DOI: 10.1063/1.4824887.
19. URL: <https://jp-minerals.org/vesta/en/>
20. Qin, R. First-principles calculations of mechanical and electronic properties of silicene under strain / R. Qin, C.-H. Wang, W. Zhu, et. al. // AIP Adv. – 2012. – Vol. 2. – P. 022159. DOI: 10.1063/1.4732134.

R e f e r e n c e s

1. Evidence of silicene in honeycomb structures of silicon on Ag(111) / B. Feng, Z. Ding, S. Meng, Y. et. al. // Nano Lett. – 2012. – V. 12. – P. 3507-3511. DOI: 10.1021/nl301047g.
2. Silicene: compelling experimental evidence for graphene like two dimensional silicon / P. Vogt, P. De Padova, C. Quaresima, et. al. // Phys. Rev. Lett. – 2012. – V. 108. – P. 155501. DOI: 10.1103/PhysRevLett.108.155501.
3. Muksunov, N. Y. Electronic properties of hybrid graphene/silicene nanocomposite / N. Y. Muksunov, E. P. Sharin // AIP Conference Proceedings. – AIP Publishing LLC, 2022. – 2528. – №. 1. – P. 020041.

4. Two- and one-dimensional honeycomb structures of silicon and germanium / S. Cahangirov, M. Topsakal, E. Akturk et. al. // *Phys. Rev. Lett.* – 2009. – V. 102. – P. 236804. DOI:10.1103/PhysRevLett.102.236804.
5. Ezawa, M. Valley-polarized metals and quantum anomalous hall effect in silicene / M. Ezawa // *Phys. Rev. Lett.* – 2012. – V. 109. – P. 055502. DOI:10.1103/PhysRevLett.109.055502.
6. Liu, C.-C. Quantum spin hall effect in silicene and two-dimensional germanium / C.-C. Liu, W. Feng, Y. Yao // *Phys. Rev. Lett.* – 2011. – V. 107. – P. 076802. DOI:10.1103/PhysRevLett.107.076802.
7. Silicene on zirconium carbide (111) / T. Aizawa, S. Suehara, S. Otani // *The Journal of Physical Chemistry C*. – 2014. – Vol. 118, no. 40. – P. 23049-23057.
8. Buckled silicene formation on Ir (111) / L. Meng, Y. Wang, L. Zhang, et. al. // *Nano letters*. 2013. – Vol. 13, no. 2. – P. 685-690.
9. Experimental evidence for epitaxial silicene on diboride thin films / A. Fleurence, R. Friedlein, et. al. // *Physical review letters*. – 2012. – Vol. 108, no. 24. – P. 245501.
10. Silicene: compelling experimental evidence for graphenelike two-dimensional silicon / P. Vogt, P. De Padova, C. Quaresima, et. al. // *Physical review letters*. – 2012. – Vol. 108, no. 15. – P. 155501.
11. Two-Dimensional Si Nanosheets with Local Hexagonal 104 Structure on a MoS₂ Surface / D. Chiappe, E. Scalise, E. Cinquanta, et. al. // *Advanced Materials*. – 2014. – Vol. 26, no. 13. – P. 2096-2101.
12. Silicene field-effect transistors operating at room temperature / Tao L. et. al. // *Nature nanotechnology*. – 2015. – Vol. 10. – №. 3. – P. 227-231.
13. Galashev A. E. Application of defective silicene and graphene for lithium-ion battery anode: computer experiment / A. E. Galashev, O. R. Rakhmanova, Y. P. Zaikov // *Solid State Physics*. – 2016, vol. 58, issue 9. – P. 1786–1793.
14. Neek-Amal, M. Realization of Free-Standing Silicene Using Bilayer Graphene / M. Neek-Amal, A. Sadeghi, G.R. Berdiyorov et. al. // *Appl. Phys. Lett.* – 2013. – Vol. 103. – P. 261904. DOI: 10.1063/1.4852636.
15. Sharin, E. P. Electronic properties of boron doped single-layer graphene / E. P. Sharin, R. S. Tikhonov // *AIP Conference Proceedings*. – 2018. – 2041. – P. 020020–1–4. <https://doi.org/10.1063/1.5079351>
16. Sharin, E. P. Effect of doping on the electronic properties of graphene / E. P. Sharin, K. V. Evseev // *Magnetic resonance in solids*. – 2019. – 21. – P. 1–7.
17. Spencer, M. Silicene: Structure, Properties and Applications / M. Spencer, T. Morishita. – Springer. – 2016. – 283 p.
18. Hu, W. Structural, Electronic, and Optical Properties of Hybrid Silicene and Graphene Nanocomposite / W. Hu, Z. Li, J.J. Yang // *Chem. Phys.* – 2013. – V. 139. – P. 154704. DOI: 10.1063/1.4824887.
19. URL: <https://jp-minerals.org/vesta/en/>
20. Qin, R. First-principles calculations of mechanical and electronic properties of silicene under strain / R. Qin, C.-H. Wang, W. Zhu, et. al. // *AIP Adv.* – 2012. – Vol. 2. – P. 022159. DOI: 10.1063/1.4732134.

ШАРИН Егор Петрович – к. ф.-м. н., доцент кафедры теоретической физики Северо-Восточного федерального университета им. М.К. Аммосова.

E-mail: ep.sharin@s-vfu.ru

SHARIN Egor Petrovich – Cand. Sc. Physics and Mathematics, Docent of the Theoretical Physics Department, M.K. Ammosov North-Eastern Federal University.

МУКСУНОВ Никита Янович – студент гр. МФ-21-1 Физико-технического института Северо-Восточного федерального университета им. М.К. Аммосова.

E-mail: muksunov97@mail.ru

MUKSUNOV Nikita Yanovich – student Physical Technical Institute of M.K. Ammosov North-Eastern Federal University.