

М. С. Баранова, В. А. Скачкова, В. Р. Стемпицкий, Д. Ч. Гвоздовский

*Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники, Минск, Беларусь*

## ЭНЕРГЕТИЧЕСКАЯ ЗОННАЯ ДИАГРАММА СЛОИСТЫХ ГЕТЕРОСИСТЕМ ГРАФЕН–ZnO, ГРАФЕН–ZnS: КВАНТОВО-МЕХАНИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

**Аннотация.** Исследована возможность придания графеновым пленкам свойств полупроводника в структурах, состоящих из нескольких слоев (гетероструктуры): оксид цинка и графен (ZnO/графен), сульфид цинка и графен (ZnS/графен). Для изучения электронных свойств гетероструктур проведено квантово-механическое моделирование в программном пакете VASP. Посредством моделирования структурных свойств типичного представителя слоистых материалов (черного фосфора) определена эффективность использования поправок к DFT, учитывающих силы Ван-дер-Ваальса и реализованных в программе VASP и, таким образом, обоснован выбор функционала электронной плотности для гетероструктур. Определены межслоевые расстояния для изучаемых систем с подходящим функционалом электронной плотности (DFT-D2). Для черного фосфора это расстояние равно 3,1 Å, а для гетероструктур – 3,16 Å (ZnO/графен) и 3,45 Å (ZnS/графен). Проведено моделирование, конечной целью которого являлся расчет энергетических зонных диаграмм. Исследовано влияние подложки из цинксодержащих материалов на энергетическую зонную структуру графена. Установлено, что взаимодействие монослоя оксида цинка и графена в гетероструктуре ZnO/графен не приводит к возникновению энергетического зазора в зонной структуре графена. Запрещенная зона графена в структуре ZnS/графен составила 0,35 эВ. Поскольку применяемые для проведения моделирования ТФП-методы недооценивают ширину запрещенной зоны, ее экспериментальное значение для исследуемых структур может оказаться выше расчетного.

**Ключевые слова:** теория функционала плотности, силы Ван-дер-Ваальса, гетероструктура, графен, оксид цинка, сульфид цинка

**Для цитирования.** Энергетическая зонная диаграмма слоистых гетеросистем графен–ZnO, графен–ZnS: квантово-механическое моделирование / М. С. Баранова [и др.] // Вест. Нац. акад. наук Беларусі. Сер. фіз.-мат. навук. – 2017. – № 3. – С. 99–107.

M. S. Baranova, V. A. Skachkova, V. R. Stempitsky, D. C. Hvazdousky

*Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics, Minsk, Belarus*

## BAND STRUCTURE OF THE LAYERED GRAPHENE–ZnO, GRAPHENE–ZnS HETEROSYSTEMS: QUANTUM-MECHANICAL SIMULATION

**Abstract.** Graphene has semiconductor properties in several layers structures (heterostructure). Zinc oxide/graphene (ZnO/graphene) and zinc sulfide/graphene (ZnS/graphene) have been studied by quantum-mechanical simulation using the VASP software. The structural properties of a typical layered material (black phosphorus) have been simulated by different electron density functionals. Thus, the DFT electron density functional implemented in the VASP software was chosen to take into account the Van der Waals forces. Interlayer distances have been determined to study systems by a suitable electron density functional (DFT-D2). The distance is 3.1 Å for black phosphorus, 3.16 Å (ZnO/graphene) and 3.45 Å (ZnS/graphene) for heterostructures. Energy band structures have been calculated. Thus, the influence of a zinc-containing material on the graphene energy band structure has been registered. A band gap has been observed in ZnS/graphene (0.35 eV), but it is absent in ZnO/graphene. Taking into account that the DFT method underestimates the band gap width, this value may be larger in experimental works.

**Keywords:** density functional theory, Van der Waals force, heterostructure, graphene, zinc oxide, zinc sulfide

**For citation.** Baranova M. S., Skachkova V. A., Stempitsky V. R., Hvazdousky D. C. Band structure of the layered graphene–ZnO, graphene–ZnS heterosystems: quantum-mechanical simulation. *Vesti Natsyional'noi akademii nauk Belarusi. Seriya fizika-matematichnykh nauk = Proceedings of the National Academy of Sciences of Belarus. Physics and Mathematics series*, 2017, no. 3, pp. 99–107 (in Russian).

**Введение.** В стандартной конфигурации графен имеет нулевую ширину запрещенной зоны и с точки зрения проводимости является полуметаллом [1]. Это ограничивает возможность его эффективного применения в качестве элементов конструкции микро- и нанoeлектронных приборных структур. Существуют технологические и конструктивные решения, которые позволяют

увеличить ширину запрещенной зоны, т. е. придать графеновым пленкам свойства полупроводника. В частности, для образования запрещенной зоны в графене предлагается:

- формировать графеновые наноленты, в которых из-за квантовых ограничений образуется запрещенная зона [1];
- формировать структуры из нескольких слоев (гетероструктуры) [2];
- использовать легированный и напряженный графен [3];
- воздействовать внешним электрическим полем на многослойный графен [4].

Используя зависимость электронных характеристик графена от энергетического влияния другого материала, можно эффективно управлять его свойствами для внедрения в качестве конструктивного элемента полевого транзистора. Предполагается, что формирование гетероструктуры типа графен–цинксодержащий материал приводит к возникновению энергетического зазора в зонной диаграмме графена. В настоящей работе цинксодержащие материалы представляют собой монослой гексагональных структур ZnO и ZnS. Ограничение размерности по кристаллографическому направлению приводит к формированию графеноподобных монослоев ZnO и ZnS [5]. Возможность получения таких систем подтверждена экспериментально [6–9]. В [10] также подтверждается, что для некоторых гетероструктур на основе графена, наряду с возникновением полупроводниковых свойств, у графена сохраняется высокое значение подвижности носителей заряда, что позволяет считать такие системы перспективными для использования во многих областях нанoeлектроники. В [11] исследуется влияние графена на электронные свойства оксида цинка, но не отмечается модификация зонной структуры графена, находящегося под влиянием ZnO.

Таким образом, настоящее исследование ставит своей целью изучение особенностей электронного энергетического спектра графена, являющегося компонентом гетеросистемы. На основании результатов квантово-механического моделирования исследована зависимость электронных свойств графена от энергетического влияния цинксодержащих графеноподобных материалов (ZnS и ZnO).

**Особенности моделирования слоистых структур. Выбор функционала.** Исследуемые системы представляют собой гетероструктуры, в которых сильные ковалентные связи в плоскости формируют атомные слои, удерживающиеся между собой слабыми силами – силами Ван-дер-Ваальса [12].

Для адекватного описания физических процессов в системе графен–цинксодержащий материал на начальном этапе необходимо обосновать выбор функционала электронной плотности, используемого при квантово-механическом моделировании в программном комплексе VASP (Vienna Ab initio Simulation Package), который учитывает значительный для данного класса структур вклад сил Ван-дер-Ваальса. Пренебрежение данным этапом, как будет показано далее, приводит к недостоверным результатам.

В современном представлении теории функционала электронной плотности (ТФП) полная энергия записывается следующим образом:

$$E = T_s - V_{ne} + J + E_{xc}, \quad (1)$$

где  $T_s$  – кинетическая энергия невзаимодействующей системы,  $V_{ne}$  – взаимодействие электронов и ядер;  $J$  – классический вклад в энергию межэлектронного отталкивания. Последний член уравнения  $E_{xc}$  – обменно-корреляционный функционал, который включает в себе всю разницу между реальной и фиктивной системами.

Теория функционала электронной плотности обеспечивает высокую адекватность описания кристаллов при условии корректного представления обменно-корреляционного функционала. Для обменно-корреляционной энергии, как правило, выбирается наиболее подходящая аппроксимация, которая и обуславливает эффективность теории Кона – Шэма [13] при практических применениях. Одним из подходов является локальная аппроксимация плотности – LDA (условное обозначение, используемое в программном комплексе VASP), предполагающая, что локальная электронная плотность представляет собой однородный электронный газ. Обменно-корреляционный функционал записывается в виде интеграла от некоторой функции пространственных

переменных, определяющихся электронной плотностью и спиновой поляризацией в данной точке:

$$E_{xc} = \int dr v_{xc}(n(r))n(r), \quad (2)$$

где  $v_{xc}(n)$  – обменно-корреляционная энергия на одну частицу однородного электронного газа,  $r$  – радиус-вектор.

Аппроксимация локальной плотности является грубым приближением, т. е. необходимо применять методы более точного описания функционала локальной плотности. Например, приближение обобщенного градиента, в котором помимо электронной плотности используется информация о неоднородности путем включения абсолютного значения градиента плотности – GGA (условное обозначение, используемое в программном комплексе VASP).

В данном подходе выражение для обменно-корреляционной энергии разлагается по степеням градиента плотности. Выражение для разложения имеет вид

$$E_{xc}^{GGA} = E_{xc}^{LDA} + \int dr f(n(r), |\nabla n(r)|)n(r), \quad (3)$$

где  $f(n(r), |\nabla n(r)|)$  – некоторая функция, для которой получено приближенное выражение [14].

Локальные и полулокальные функционалы электронной плотности не описывают силы Ван-дер-Ваальса, так как для этого необходимо использовать нелокальный функционал. Возникает необходимость введения специфических (гибридных) функционалов, которые включают нелокальные дисперсионные взаимодействия, – DFT-D2 (условное обозначение, используемое в программном комплексе VASP):

$$E_{DFT} = E_{KS-DFT} + E_{disp}. \quad (4)$$

В уравнении (4) полная энергия системы представляется в виде двух слагаемых: первое отвечает функционалу электронной плотности в рамках формализма Кона – Шэма [15], а второе – дисперсионная поправка. Одним из приближенных методов расчета коррекционной поправки является так называемый метод Гримма [16], в котором дисперсионный член имеет вид

$$E_{dis} = -s_6 \sum_{i=1}^{N_{atom}} \sum_{j=1}^{N_{atom}} \frac{C_6^{ij}}{R_{ij}^6} f_{dmf}(R_{ij}). \quad (5)$$

Здесь  $N_{atom}$  – число атомов в системе;  $C_6^{ij}$  – дисперсионный коэффициент для пары атомов  $i$  и  $j$ ;  $S_6$  – масштабирующий фактор;  $R_{ij}$  – межатомное расстояние;  $f_{dmf}$  – демпфирующая функция.

В работе [4] было предложено новое представление обменно-корреляционного потенциала – функционал Диона – vdW-DF (условное обозначение, используемое в программном комплексе VASP):

$$E_{xc} = E_x^{PBE} + E_c^{LDA} + E_c^{nl}, \quad (6)$$

где первое слагаемое – обменная энергия, полученная с помощью функционала Пердю – Бурке – Эрнцерахофа, второе – энергия корреляции в приближении локальной плотности, и третье слагаемое – нелинейная корректирующая функция;

$$E_c^{nl} = \iint dr dr' n(r)\phi(r, r')n(r'), \quad (7)$$

где  $\phi(r, r')$  – функция, определяющая дисперсионную составляющую многоэлектронной системы.

Для выбора поправок к ТФП, учитывающих силы Ван-дер-Ваальса, проведено моделирование структурных свойств типичного представителя слоистых материалов – черного фосфора [17]. В расчетах использовались функционалы как учитывающие силы Ван-дер-Ваальса (DFT-D2, vdW-DF), так и не принимающие их во внимание (LDA-функционал, основанный на локальной

аппроксимации плотности; GGA-функционал, базирующийся на приближении обобщенного градиента). Взаимодействие между атомными остовами и валентными электронами для каждого метода учета обменно-корреляционной энергии описывалось на языке присоединенных плоских волн (PAW) [18, 19].

Структурная оптимизация считалась достигнутой при разнице полной энергии менее  $1 \cdot 10^{-6}$  эВ между двумя последними шагами. Значения энергии обрезания и количества  $k$ -точек выбиралось исходя из тестовых расчетов по достижении критерия сходимости.

При моделировании структурных свойств черного фосфора интегрирование в импульсном пространстве проводилось по сетке  $k$ -точек  $9 \times 4 \times 8$ , сгенерированной по Гамма-схеме. Энергия обрезания составляла 450 эВ. Результаты структурной оптимизации приведены в таблице.

**Структурные характеристики объемного черного фосфора**  
**Structure parameters of bulk black phosphorus**

Параметр Parameter	LDA	GGA-PBE	DFT-D2	vdW-DF	Эксперимент [20] Experiment [20]
$a$ , Å	3,3061	3,3063	3,3229	3,3559	3,3136
$b$ , Å	10,1407	11,2648	10,4693	11,4060	10,478
$c$ , Å	4,1434	4,5603	4,4257	4,6829	4,3763
$u$ , Å	0,1064	0,0940	0,1021	0,0938	0,10168
$v$ , Å	0,07176	0,0868	0,0826	0,0893	0,08056
$\alpha_1$ , град	96,4387	96,000	96,5476	96,2240	96,34
$\alpha_2$ , град	100,1920	103,5518	102,4382	104,0713	102,09
$d$ , Å	2,92	3,54	3,10	3,57	3,11

Результаты проведенных расчетов показали, что обменно-корреляционный функционал LDA недооценивает значения параметров элементарной ячейки. Установлено, что параметры  $b$  и  $d$ , для адекватного описания которых важно проводить моделирование с учетом сил Ван-дер-Ваальса, значительно переоценены при расчете функционалами GGA и vdW-DF. Наилучшие результаты относительно геометрической структуры дает функционал DFT-D2, расхождение с экспериментальными данными не превышает 2,5 % [20].

**Результаты моделирования структурных и электронных свойств гетероструктур.** Модель гетероструктуры ZnO/графен формировалась из  $4 \times 4$  элементарных ячеек графена и  $3 \times 3$  элементарных ячеек ZnO (рис. 1).

Несоответствие решеток составило менее 2 %. Поскольку программный комплекс VASP транслирует заданную ячейку по всем направлениям, для исключения энергетического влияния двухслойных структур друг на друга был задан слой вакуума  $20 \text{ \AA}$  вдоль нормали к поверхности гетероструктуры.

Значения энергии обрезания и количества  $k$ -точек выбиралось исходя из тестовых расчетов по достижении критерия сходимости. Энергия обрезания базисного набора плоских волн составляла 500 эВ. Интегрирование в импульсном пространстве проводилось по сетке  $k$ -точек  $8 \times 8 \times 1$ , сгенерированной по Гамма-схеме. Поскольку ТФП со стандартными методами описания функционала обменно-корреляционной энергии недооценивает корреляционную составляющую, моделирование систем с атомами, в которых суммарный вклад данной составляющей в значение полной энергии системы существенен, проводилось с учетом Хаббард-коррекции (условное обозначение, используемое в программном комплексе VASP, LDA+U) [21].

В результате оптимизации атомной структуры постоянная решетки оксида цинка уменьшилась на 1,85 %, а постоянная решетки графена не изменилась.

Проведены самосогласованные расчеты, использующие обменно-корреляционный функционал с учетом сил Ван-дер-Ваальса (DFT-D2), эффективность применения которого была подтверждена выше на примере черного фосфора. Показано, что адгезия графена на графеноподобном оксиде цинка происходит при межслоевом расстоянии  $3,16 \text{ \AA}$  (рис. 2).

Для анализа энергетической зонной диаграммы гетероструктуры ZnO/графен выполнялся несамосогласованный расчет по контуру, соединяющему точки высокой симметрии M-K-G-M,

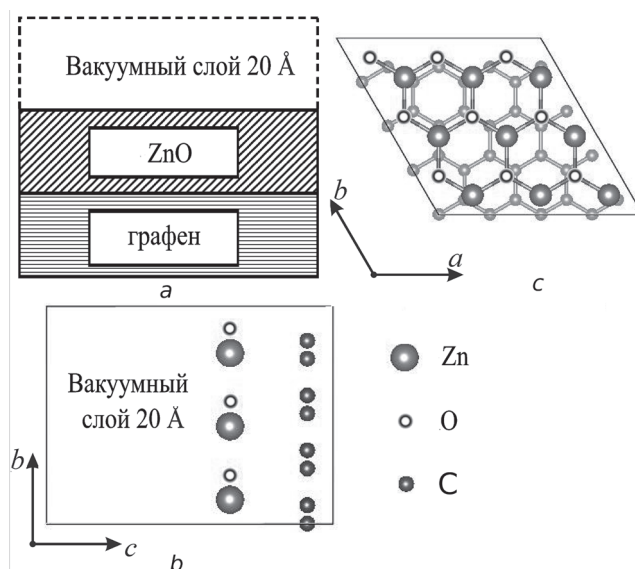


Рис. 1. Гетероструктура ZnO/графен: *a* – схематическое представление; *b* – вид суперячейки (0001); *c* – вид суперячейки (10 $\bar{1}0$ )

Fig. 1. Heterostructure of ZnO/graphene: *a* – layered structure; *b* – supercell (0001); *c* – supercell (10 $\bar{1}0$ )

первой зоны Бриллюэна графеноподобных материалов. Характерной особенностью зонной диаграммы графена является наличие особенных точек, так называемых точек Дирака (точки К), в которых валентная зона и зона проводимости при нормальных условиях соприкасаются [22]. Вблизи этих точек зонная диаграмма графена приобретает вид конусов (выполняется линейный закон дисперсии для носителей заряда).

По результатам моделирования характер энергетических зон по сравнению со структурированным графеном не изменился: в точке Дирака они имеют вид двух конусов, между которыми наблюдается незначительная энергетическая щель шириной 0,0001 эВ (рис. 3), что является

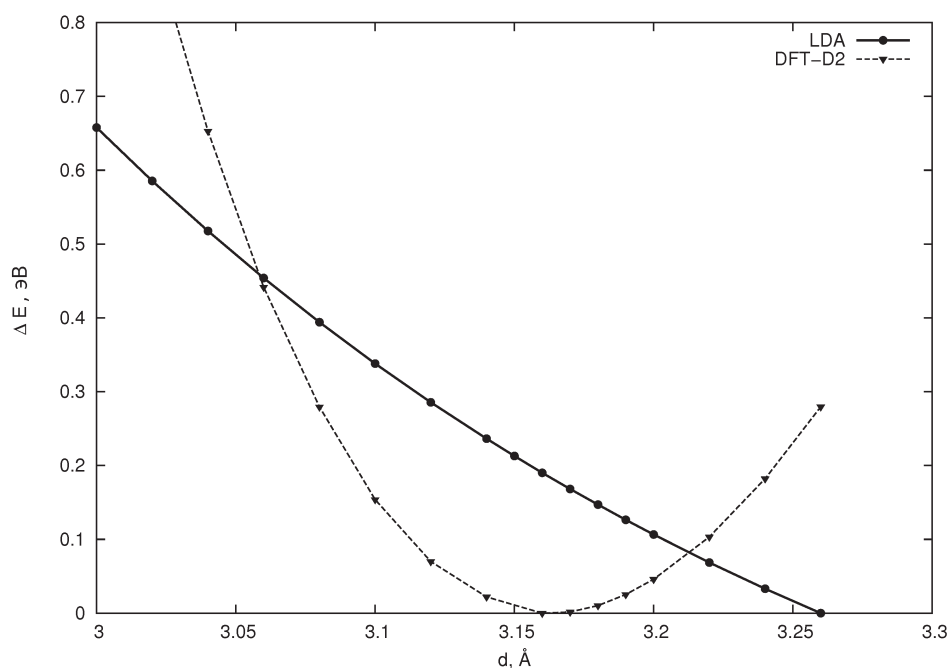


Рис. 2. Зависимость изменения общей энергии системы от расстояния между слоями для гетероструктуры ZnO/графен

Fig. 2. Total energy of the system vs. the interlayer distance for various functionals (ZnO/graphene)



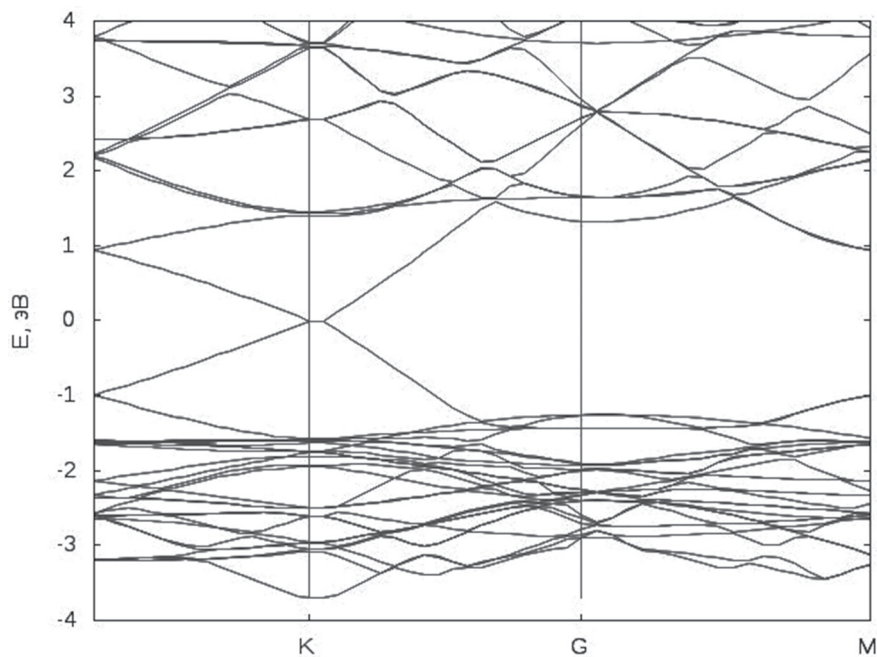


Рис. 3. Зонная диаграмма ZnO/графен

Fig. 3. Band structure of ZnO/graphene

недостаточным, и можно говорить об отсутствии запрещенной зоны в данной гетероструктуре. Энергия связи между слоем графена и оксида цинка составляет 0,5 эВ.

Модель гетероструктуры ZnS/графен формировалась из  $3 \times 3$  элементарных ячеек графена и  $2 \times 2$  элементарных ячеек ZnS. Несоответствие ячеек составило 1,72 %. Интегрирование обратного энергетического пространства выполнялось по сетке  $8 \times 8 \times 1$ . Расчеты проводились с использованием локального функционала DFT-D2 с учетом Хаббард-коррекции. Согласно расчетам межслоевое расстояние в гетероструктуре ZnS/графен составило 3,45 Å (см. рис. 2).

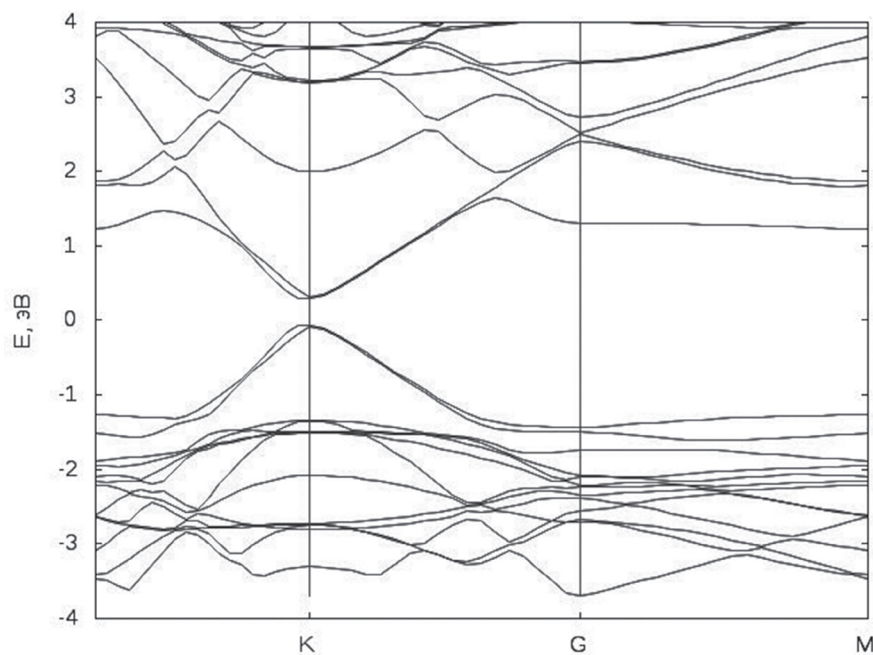


Рис. 4. Зонная диаграмма ZnS/графен

Fig. 4. Band structure of ZnS/graphene

На рис. 4 представлены результаты моделирования зонной структуры для ZnS/графен. Несамосогласованный расчет проводился по контуру M-K-G-M. В энергетической структуре образуется зазор 0,35 эВ. Зоны приобретают параболический характер, но кривизна около точки Дирака сохраняется, что свидетельствует о небольшой потере в значении подвижности, вызванной энергетическим влиянием графеноподобного ZnS. Энергия связи между листом графена и ZnS принимает значение 0,45 эВ. Таким образом, под энергетическим влиянием монослоя ZnS на графен в последнем образуется запрещенная зона.

**Заключение.** На основании результатов моделирования структурных свойств объемного черного фосфора проведено сравнение различных подходов к описанию обменно-корреляционного функционала. Показана необходимость учета сил Ван-дер-Ваальса при *ab initio* моделировании слоистых структур. Для дальнейших расчетов использовался только обменно-корреляционный функционал DFT-D2, поскольку он дает лучшие значения структурных параметров. Определены межслоевые расстояния для изучаемых слоистых систем. Для черного фосфора это расстояние равно 3,1 Å, а для гетероструктур – 3,16 Å (ZnO/графен) и 3,45 Å (ZnS/графен).

Квантово-механические расчеты электронных свойств гетероструктур ZnO/графен и ZnS/графен показали, что из-за влияния монослоя графеноподобного сульфида цинка на графен в последнем наблюдается образование запрещенной зоны, в то время как в структуре ZnO/графен этого не происходит. Ширина запрещенной зоны для графена в структуре ZnS/графен составила 0,35 эВ.

Принимая во внимание то, что теория функционала электронной плотности со стандартными методами описания функционала обменно-корреляционной энергии недооценивает корреляционную составляющую, моделирование систем с атомами, в которых суммарный вклад данной составляющей в значение полной энергии системы существенен, проводилось с учетом Хаббард-коррекции. Данный подход приводит к увеличению значения ширины запрещенной зоны. Однако в сильнокоррелированных системах достичь экспериментальных значений не удастся [23]. Таким образом, полученное в настоящей работе значение ширины запрещенной зоны может оказаться бóльшим. Приобретение графеном свойства полупроводника открывает возможности для его использования в конструкциях приборов микро- и нанoeлектроники.

**Благодарности.** Представленные результаты получены в рамках обеспечения задач задания 3.02 ГПНИ «Конвергенция». Для проведения компьютерного моделирования использовался вычислительный кластер учреждения образования «Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники».

**Acknowledgments.** The presented results were obtained within the framework of Task 3.02 of the GPSR “Convergence”. The BSUIR computing cluster was used for computer simulation.

### Список использованных источников

1. Young-Woo Son. Energy gaps in graphene nanoribbons / Young-Woo Son, M. L. Cohen, S. G. Louie // *Phys. Rev. Lett.* – 2006. – Vol. 97, № 21. – P. 216803(1–4).
2. Tunable MoS<sub>2</sub> bandgap in MoS<sub>2</sub>-graphene heterostructures / A. Ebnonnasir [et al.] // *Appl. Phys. Lett.* – 2014. – Vol. 105, № 3. – P. 031603(1–5).
3. Under pressure: Control of strain, phonons and bandgap opening in rippled graphene / U. Monteverde [et al.] // *Carbon.* – 2015. – Vol. 91. – P. 266–274.
4. Kaoru Kanayama. Gap state analysis in electric-field-induced band gap for bilayer graphene / Kaoru Kanayama, Kosuke Nagashio // *Scientific Reports.* – 2015. – Vol. 5, № 1. – P. 15789 (1–8).
5. Ивановский, А. Л. Графеновые и графеноподобные материалы / А. Л. Ивановский // *Успехи химии.* – 2012. – Т. 81, № 7. – С. 571–605.
6. Baojun Li. ZnO@graphene composite with enhanced performance for the removal of dye from water / Baojun Li, Huaqiang Cao // *J. Mater. Chem.* – 2011 – Vol. 21, № 10. – P. 3346–3349.
7. Microwave-assisted synthesis of ZnO-graphene composite for photocatalytic reduction of Cr(VI) / Xinyuan Liu [et al.] // *Catal. Sci. Technol.* – 2011 – Vol. 1, № 7. – P. 1189–1193.
8. Pan, S. ZnS-Graphene nanocomposite: Synthesis, characterization and optical properties / S. Pan, X. Liu // *J. Solid State Chem.* – 2012 – Vol. 191. – P. 51–56.
9. The structure control of ZnS/graphene composites and their excellent properties for lithium-ion batteries / M. Mao [et al.] // *J. Mater. Chem. A.* – 2015. – Vol. 3. – P. 13384–13389.

10. Integration of graphene/ZnS nanowire film hybrid based photodetector arrays for high-performance image sensors / Congjun Wu [et al.] // *2D Materials*. – 2017. – Vol. 4, № 2. – P. 025113.
11. Tu, Z. C. First-principles study on physical properties of a single ZnO monolayer with graphene-like structure / Z. C. Tu // *J. Comput. Theor. Nanosci.* – 2010 – Vol. 7, № 6. – P. 1182–1186.
12. Антонова, И. В. Вертикальные гетероструктуры на основе графена и других монослойных материалов / И. В. Антонова // *Физика полупроводников*. – 2016. – Т. 50, № 1. – С. 67–82.
13. Kohn, W. Self-consistent equations including exchange and correlation effects / W. Kohn, L. J. Sham // *Phys. Rev.* – 1965. – Vol. 140, № 4A. – P. A1133–A1138.
14. Арбузников, А. В. Гибридные обменно-корреляционные функционалы и потенциалы: развитие концепции / А. В. Арбузников // *Журн. структур. химии*. – 2007. – Т. 48. – С. S5–S38.
15. Grimme, S. Semiempirical GGA-type density functional constructed with a long-range dispersion correction / S. Grimme // *J. Comp. Chem.* – 2006. – Vol. 27, № 15. – P. 1787–1799.
16. Van der Waals density functional for general geometries / M. Dion [et al.] // *Phys. Rev. Lett.* – 2004. – Vol. 92, № 92. – P. 246401-1-4.
17. Morita, A. Semiconducting black phosphorus / A. Morita // *Appl. Phys. A. Solids and Surfaces*. – 1986. – Vol. 39, № 4. – P. 227–242.
18. Blöchl, P. E. Projector augmented-wave method / P. E. Blöchl // *Phys. Rev.* – 1994. – Vol. 50, № 24. – P. 17953.
19. Kresse, G. From ultrasoft pseudopotentials to the projector augmented wave method / G. Kresse, J. Joubert // *Phys. Rev. B*. – 1999. – Vol. 59, № 3. – P. 1758–1775.
20. Brown, A. Refinement of the crystal structure of black phosphorus / A. Brown, S. Rundqvist // *Acta Crystallogr.* – 1965. – Vol. 19, № 4. – P. 684–685.
21. Hubbard, J. Electron correlations in narrow energy bands / J. Hubbard // *Proc. R. Soc. London: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*. – 1963. – Vol. 276, № 1365. – P. 238–257.
22. Two-dimensional gas of massless Dirac fermions in graphene / K. S. Novoselov [et. al.] // *Nature*. – 2005. – Vol. 438, № 7065. – P. 197–200.
23. Perdew, J. P. Density functional theory and the band gap problem / J. P. Perdew // *Int. J. of Quantum Chem.* – 1985. – Vol. 28, № S19. – P. 497–523.

## References

1. Young-Woo Son, Cohen M. L., Louie S. G. Energy gaps in graphene nanoribbons. *Physical Review Letters*, 2006, vol. 97, no. 21, pp. 216803(1–4). Doi: 10.1103/PhysRevLett.97.216803
2. Ebnonnasir A., Narayanan B., S. Kodambaka, Ciobanu C. V. Tunable MoS<sub>2</sub> bandgap in MoS<sub>2</sub>-graphene heterostructures. *Applied Physics Letters*, 2014, vol. 105, no. 3, pp. 031603(1–5). Doi: 10.1063/1.4891430
3. Monteverde U., Pal J., Migliorato M. A., Missous M., Bangert U., Zan R., Kashtiban R., Powell D. Under pressure: Control of strain, phonons and bandgap opening in rippled grapheme. *Carbon*, 2015, vol. 91, pp. 266–274. Doi: 10.1016/j.carbon.2015.04.044
4. Kaoru Kanayama, Kosuke Nagashio. Gap state analysis in electric-field-induced band gap for bilayer grapheme. *Scientific Reports*, 2015, vol. 5, no. 1, pp. 15789 (1–8). Doi: 10.1038/srep15789
5. Ivanovskii A. L. Graphene-based and graphene-like materials. *Russian Chemical Reviews*, 2012, vol. 81, no. 7, pp. 571–605. Doi: 10.1070/rc2012v081n07abeh004302
6. Baojun Li, Huaqiang Cao. ZnO@graphene composite with enhanced performance for the removal of dye from water. *Journal of Materials Chemistry*, 2011, vol. 21, no. 10, pp. 3346–3349. Doi: 10.1039/c0jm03253k
7. Xinjuan Liu, Likun Pan, Tian Lv, Ting Lu, Guang Zhu, Zhuo Sun, Changqing Sun. Microwave-assisted synthesis of ZnO-graphene composite for photocatalytic reduction of Cr(VI). *Catalysis Science & Technology*, 2011, vol. 1, no. 7, pp. 1189–1193. Doi: 10.1039/c1cy00109d
8. Pan S., Liu X. ZnS-Graphene nanocomposite: Synthesis, characterization and optical properties. *Journal of Solid State Chemistry*, 2012, vol. 191, pp. 51–56. Doi: 10.1016/j.jssc.2012.02.048
9. Mao M., Jiang L., Wu L., Zhang M., Wang T. The structure control of ZnS/graphene composites and their excellent properties for lithium-ion batteries. *Journal of Materials Chemistry A*, 2015, vol. 3, pp. 13384–13389. Doi: 10.1039/c5ta01501d
10. Congjun Wu, Fei Wang, Caoyuan Cai, Zhihao Xu, Yang Ma, Fan Huang, Feixiang Jia, Min Wang. Integration of graphene/ZnS nanowire film hybrid based photodetector arrays for high-performance image sensors. *2D Materials*, 2017, vol. 4, no. 2, pp. 025113. Doi: 10.1088/2053-1583/aa735f
11. Tu Z. C. First-principles study on physical properties of a single ZnO monolayer with graphene-like structure. *Journal of Computational and Theoretical Nanoscience*, 2010, vol. 7, no. 6, pp. 1182–1186. Doi: 10.1166/jctn.2010.1470
12. Antonova I. V. Vertical heterostructures based on graphene and other 2D materials. *Semiconductors*, 2016, vol. 50, no. 1, pp. 66–82. Doi: 0.1134/s106378261601005x
13. Kohn W., Sham L. J. Self-consistent equations including exchange and correlation effects. *Physical Review*, 1965, vol. 140, no. 4A, pp. A1133–A1138. Doi: 10.1103/physrev.140.a1133
14. Arbuznikov A. V. Hybrid exchange correlation functionals and potentials: Concept elaboration. *Journal of Structural Chemistry*, 2007, vol. 48, pp. S1–S31. Doi: 10.1007/s10947-007-0147-0
15. Grimme S. Semiempirical GGA-type density functional constructed with a long-range dispersion correction. *Journal of Computational Chemistry*, 2006, vol. 27, no. 15, pp. 1787–1799. Doi: 10.1002/jcc.20495



16. Dion M., Rydberg H., Schroder E., Langreth D. C., Lundqvist B. I. Van der Waals density functional for general geometries. *Physical Review Letters*, 2004, vol. 92, no. 24, pp. 246401. Doi: 10.1103/physrevlett.92.246401
17. Morita A. Semiconducting black phosphorus. *Applied Physics A. Solids and Surfaces*, 1986, vol. 39, no. 4, pp. 227–242. Doi: 10.1007/BF00617267
18. Blöchl P. E. Projector augmented-wave method. *Physical Review B*, 1994, vol. 50, no. 24, pp. 17953–17979. Doi: 10.1103/physrevb.50.17953
19. Kresse G., Joubert J. From ultrasoft pseudopotentials to the projector augmented wave method. *Physical Review B*, 1999, vol. 59, no. 3, pp. 1758–1775. Doi: 10.1103/physrevb.59.1758
20. Brown A., Rundqvist S. Refinement of the crystal structure of black phosphorus. *Acta Crystallographica*, 1965, vol. 19, no. 4, pp. 684–685. Doi: 10.1107/s0365110x65004140
21. Hubbard J. Electron correlations in narrow energy bands. *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*. 1963, vol. 276, no. 1365, pp. 238–257. Doi: 10.1098/rspa.1963.0204
22. Novoselov K. S., Geim A. K., Morozov S. V., Jiang D., Katsnelson M. I., Grigorieva I. V., Dubonos S. V., Firsov A. A. Two-dimensional gas of massless Dirac fermions in grapheme. *Nature*, 2005, vol. 438, no. 7065, pp. 197–200. Doi: 10.1038/nature04233
23. Perdew J. P. Density functional theory and the band gap problem. *International Journal of Quantum Chemistry*, 1985, vol. 28, no. S19, pp. 497–523. Doi: 10.1002/qua.560300314

### Информация об авторах

**Баранова Мария Сергеевна** – аспирант, младший научный сотрудник научно-исследовательской лаборатории 4.4 научно-исследовательской части БГУИР, Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники (ул. П. Бровки, 6, 220013, г. Минск, Республика Беларусь). E-mail: baranova@bsuir.by

**Скачкова Вероника Андреевна** – аспирант, младший научный сотрудник научно-исследовательской лаборатории 4.4 научно-исследовательской части БГУИР, Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники (ул. П. Бровки, 6, 220013, г. Минск, Республика Беларусь). E-mail: skachkova@bsuir.by

**Стемпицкий Виктор Романович** – кандидат технических наук, доцент кафедры микро- и нанoeлектроники БГУИР, заведующий научно-исследовательской лабораторией 4.4 научно-исследовательской части БГУИР, Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники (ул. П. Бровки, 6, 220013, г. Минск, Республика Беларусь). E-mail: vstem@bsuir.by

**Гвоздовский Дмитрий Чеславович** – магистрант, Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники (ул. П. Бровки, 6, 220013, г. Минск, Республика Беларусь). E-mail: mitya.gvozдовskiy@mail.ru

### Information about the authors

**Maryia S. Baranova** – Postgraduate, Junior Researcher of SRL 4.4 SRP BSUIR, Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics (6, P. Brovka Str., 220013, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: baranova@bsuir.by

**Veranika A. Skachkova** – Postgraduate, Junior Researcher of SRL 4.4 SRP BSUIR, Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics (6, P. Brovka Str., 220013, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: skachkova@bsuir.by

**Viktor R. Stempitsky** – Ph. D. (Engineering), Assistant Professor of the Department of Micro- and Nanoelectronics, Head of SRL 4.4 SRP BSUIR, Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics (6, P. Brovka Str., 220013, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: vstem@bsuir.by

**Dmitryi C. Hvazdousky** – Undergraduate, Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics (6, P. Brovka Str., 220013, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: mitya.gvozдовskiy@mail.ru