

GaP/SiH 范德华异质结构的可调谐电子和光学特性的第一性原理研究

郭鑫^{1,2}, 马永强^{1,2}, 鲍爱达^{1,2}, 邓蕊³, 秦丽^{1,2}, 张文琦^{1,2}, 徐厚敦^{1,2}

(1. 中北大学电子测试技术国家重点实验室,
2. 仪器科学与动态测试教育部重点实验室, 太原 030051;
3. 武警工程大学密码工程学院, 西安 710086)

摘要 预测并构建了一种II型的GaP/SiH异质结构, 并对其结构特性、电子特性和光学特性进行了研究. 结果表明, 该GaP/SiH异质结构属于典型的II型范德华异质结构, 展现出卓越的能量稳定性. GaP/SiH异质结构的带隙为2.24 eV, II型能带结构的排列有效抑制了光生载流子的复合. 通过施加不同的双轴应变和垂直应变, 可以对异质结的电子结构进行一定范围内的精确调控. GaP/SiH异质结构在可见光和紫外光区也表现出优异的光吸收性能, 吸收率可达 $2.34 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$. GaP/SiH异质结构表现出的优异性能为光电子器件的设计提供了参考.

关键词 第一性原理; GaP/SiH 范德华异质结构; 光吸收

中图分类号 O641; O482; G312 文献标志码 A doi: 10.7503/cjcu20240410

First Principles Study of Tunable Electronic and Optical Properties of GaP/SiH van der Waals Heterostructure

GUO Xin^{1,2}, MA Yongqiang^{1,2}, BAO Aida^{1,2*}, DENG Rui³, QIN Li^{1,2},
ZHANG Wenqi^{1,2}, XU Houdun^{1,2}

(1. National Key Laboratory for Electronic Measurement Technology,
2. Key Laboratory of Instrument Science & Dynamic Measurement of Ministry of Education,
North University of China, Taiyuan 030051, China;
3. College of Cryptography Engineering, Engineering University of PAP, Xi'an 710086, China)

Abstract In this study, a type-II GaP/SiH heterostructure was predicted and constructed, with an in-depth investigation into its structural, electronic and optical properties. The research revealed that the GaP/SiH heterostructure was a typical van der Waals heterostructure, exhibiting excellent energy and thermodynamic stability. It had a bandgap of 2.24 eV, and the arrangement of the type-II band structure effectively suppressed the recombination of photogenerated charge carriers. Furthermore, it was found that the electronic structure of the heterojunction can be precisely modulated within a certain range by applying different biaxial and uniaxial strains. The GaP/SiH heterostructure also demonstrated excellent light absorption performance in the visible and ultraviolet regions, with an absorption coefficient reaching up to $2.34 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$. The outstanding performance exhibited by the GaP/SiH heterostructure provides a reference for the design of optoelectronic devices.

Keywords First principle; GaP/SiH van der Waals heterostructure; Optical absorption

收稿日期: 2024-08-30. 网络首发日期: 2024-10-14.

联系人简介: 鲍爱达, 男, 博士, 副教授, 主要从事第一性原理研究. E-mail: baoaida@126.com

基金项目: 国家自然科学基金(批准号: 62204232)资助.

Supported by the National Natural Science Foundation of China(No.62204232).

2004年, Novoselov 和 Geim 等^[1]首次通过机械剥离的方法成功制备出单原子层石墨烯, 其独特的物理化学性质受到广泛关注. 此后, 随着实验技术的不断成熟和理论计算能力的显著提高, 众多新型二维材料相继被成功预测和制备. 与传统块状材料相比, 这些二维材料以其出色的电导性、超大的比表面积以及卓越的机械强度已逐渐成为研究的热点. 然而, 单一的二维材料在实际电子领域应用中仍存在一些局限性, 如较大的带隙、高电子-空穴复合率以及在光学吸收方面的不足, 使其未能达到预期的应用效果^[2,3]. 幸运的是, 大量的实验研究表明, 通过构建垂直堆叠的范德华异质结构(van der Waals heterostructure, vdWH), 可以有效调控二维材料的电子性质, 为突破这些限制提供了可能^[4-7].

在近期研究中, 通过在硅烯的基础上进行氢的共价修饰, 制备了硅烷(SiH)^[8-10]. 研究发现, 单层 SiH 的晶格参数为 0.389 nm, 结构稳定, 具有合适的间接带隙(2.93 eV)^[11,12]. 然而, SiH 对可见光的吸收能力较弱, 这可能限制其在光电应用中的潜力. 为了优化单层 SiH 的特性, 探索了许多基于单层 SiH 的异质结构设计. 如, BP/SiH 异质结构的形成有效降低了带隙并提高了光吸收系数^[13]. 此外, 对 SiH/GaSe 和 SiH/InSe 异质结的计算结果表明, 双轴应变可有效调节带隙和带边结构, 从而提高光催化效率^[14]. 然而, 这些结构在可见光区域的光吸收能力仍有待提高. 最近, 作为 III~V 族化合物半导体材料的重要成员, 磷化镓(GaP)以其较低的成本、卓越的光电特性以及高效的非线性光学性能, 在光电器件及量子光学等多个领域引起了广泛关注^[15-18]. 其中, 二维 GaP 材料隶属于六方晶系, 具有 0.388 nm 的晶格参数, 不仅展现出了高载流子迁移率, 而且其可调的能带结构为探索新的应用领域提供了广阔的前景^[19-22].

本文基于密度泛函理论的第一性原理计算, 研究了 GaP 单层、SiH 单层以及 GaP/SiH 异质结的结构、电子性质和光学性质. 结果表明, GaP/SiH 异质结拥有稳定的结构、合适的带隙、II型能带排列以及优异的光学性质, 是一种典型的范德华异质结构. 为了进一步了解 GaP/SiH 异质结构界面的接触特性, 进行了电荷密度差和功函数的计算. 此外, 还探索了双轴应变和垂直应变对异质结构的电子能带和光学性质的影响, GaP/SiH 异质结构表现出很强的稳定性以及出色的光吸收能力.

1 计算方法

基于密度泛函理论的第一性原理, 通过维也纳从头算仿真软件包(VASP)计算了 GaP 单层、SiH 单层和 GaP/SiH 异质结的结构和电子性质^[23-25]. 使用广义梯度近似(GGA)交换关联泛函下的 Perdew-Burke-Ernzerhof(PBE)纯泛函方法描述电子交换和相关作用^[26]. 设置结构优化和能量计算的平面波基组的截断能为 600 eV. 以 Γ 点为中心进行 k 点网格采样, 设置采样精度为 $10 \times 10 \times 1$ ^[27]. 为了消除材料周期性边界条件的影响, 沿着 z 轴方向建立一个 2.2 nm 的真空层. 此外, 结构优化的过程中固定异质结构的 c 轴晶格常数不变, 进行 a, b 轴方向及原子坐标的完全优化. 使用 Grimme 提出的经验色散校正密度泛函理论(DFT-D3)描述异质结层间的范德华作用力^[28]. 设置能量和力的收敛标准分别为 1×10^{-8} eV 和 1×10^{-2} eV/nm. 此外, 使用更精确的 HSE06 杂化泛函计算了所有结构的电子能带结构^[29].

2 结果与讨论

2.1 结构和电子性质

在探究所构建的 GaP/SiH 异质结之前, 先对初始的两种单层 GaP 和 SiH 材料进行结构优化和性质对比. 图 1(A)为结构优化后的单层 GaP 结构, 其晶格常数为 0.389 nm, 其中, Ga—P 键键长为 0.228 nm. 优化后的单层 SiH 的晶格常数为 0.388 nm, 沿 c 轴方向的原子序列为 H—Si—Si—H, 其中, H—Si 键与 Si—Si 键的键长分别为 0.150 和 0.236 nm[图 1(C)]. 此后, 使用 HSE06 杂化泛函分别计算了两种材料的能带结构[图 1(B)和(D)], 其中, GaP 的带隙为 2.68 eV, 价带顶(Valence band maximum, VBM)和导带底(Conduction band minimum, CBM)分别位于 K 点和 Γ 点, 是一种典型的间接带隙半导体. 对于 SiH 而言, 它的带隙为 2.93 eV, VBM 和 CBM 分别位于 Γ 点和 M 点, 也是一种间接带隙半导体材料. 以上计算结果与文献[13, 22, 30, 31]报道的理论值一致.

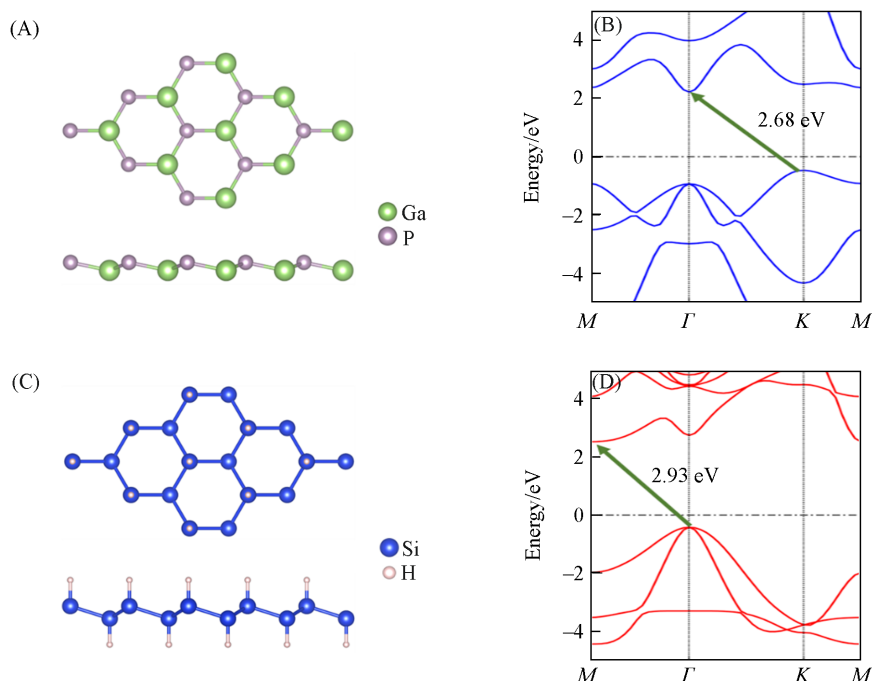


Fig. 1 Top-side views of the optimized atomic structures(A, C) and the corresponding electronic energy band structures(B, D) of GaP monolayer(A, B) and SiH monolayer(C, D)

在构建异质结构之前, 首先需要考虑因两种材料不同的晶格常数所产生的晶格失配, 较大的晶格失配将会影响异质结构在实验中的制备. 异质结构的晶格失配(δ)可以根据下式计算^[19]:

$$\delta = \frac{|a_{\text{GaP}} - a_{\text{SiH}}|}{a_{\text{GaP}}} \quad (1)$$

式中: a_{GaP} 和 a_{SiH} 分别为所计算的单层 GaP 和单层 SiH 的平衡晶格常数. 计算得到的 GaP/SiH 异质结构的晶格失配仅为 0.11%, 表明了实验制备的可行性.

其次, 根据两种材料的原子排列方式, 构建了 3 种不同的异质结构: H1 构型、H2 构型和 H3 构型 [图 2(A)~(C)]. 此后, 对每种结构进行收敛性测试及结构优化, 根据下式计算了每种异质构型的结合能(E_b , eV)^[32], 以此初步确定最稳定的构型:

$$E_b = E_{\text{GaP/SiH}} - E_{\text{GaP}} - E_{\text{SiH}} \quad (2)$$

式中: $E_{\text{GaP/SiH}}$, E_{GaP} 和 E_{SiH} (eV) 分别为二维 GaP/SiH 异质结构的总能量以及独立的 GaP 单层和 SiH 单层的能量.

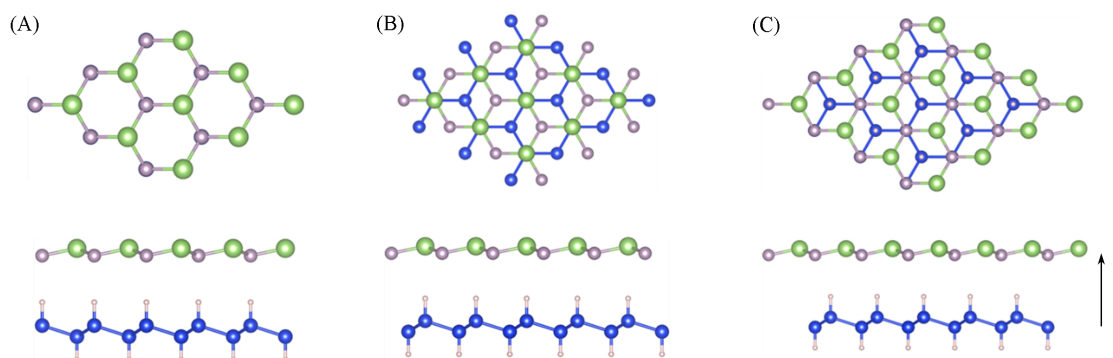


Fig. 2 Top and side views of H1(A), H2(B) and H3(C) stacked structures of GaP/SiH vdWH

表 1 列出了 3 种构型优化后的结构、电子参数以及结合能值. 3 种构型的结合能和层间距的数值较为接近, 表明所有这 3 种异质结构都是稳定的, 并且具有相似的稳定性. 其中, H3 构型的结合能最低, 是最稳定的体系.

Table 1 Calculated equilibrium lattice constants(a), interlayer distances(d), binding energies(E_b) and band gap values(E_g^{PBE}, E_g^{HSE06}) for the initial GaP monolayer, the initial SiH monolayer and the three configurations

Structure	a/nm	d/nm	E_b/eV	E_g^{PBE}/eV	E_g^{HSE06}/eV
GaP	0.389	—	—	1.72	2.68
SiH	0.388	—	—	2.17	2.93
H1	0.388	0.306	-0.10	—	—
H2	0.389	0.261	-0.13	—	—
H3	0.389	0.235	-0.15	1.30	2.24

图3为H3构型在不同层间距离下的结合能变化. 可见, 当层间距为0.235 nm时, H3构型具有最低的结合能. 进一步验证了cc构型的稳定性. 因此, 随后的研究将重点放在H3构型的GaP/SiH vdWH上. 值得注意的是, H3构型的层间距大于最近相邻的H原子和P原子的共价半径之和, 这表明GaP/SiH中GaP层和SiH层之间的相互作用为范德华力. 因此, GaP/SiH是典型的范德华异质结构.

在确定GaP/GaSe范德华异质结构具有很好的稳定性之后, 精确计算了其投影电子能带结构[图4(A)]. 其经HSE06杂化泛函计算的带隙为2.24 eV, 与独立的单层GaP和单层SiH相比明显降低. 由图4(A)可以发现, GaP/SiH vdWH的VBM与CBM均位于 Γ 点, 是一种直接带隙半导体. 其中, 价带顶由SiH贡献, 而导带底由GaP贡献, 这一现象表明GaP/SiH vdWH具有II型能带排列, 这种能带排列结构使得电子和空穴在空间上有效分离, 其中, 电子和空穴被物理隔离在不同的材料层中. 这种分离机制显著降低了电子和空穴的直接复合概率, 因为它们需要跨越材料界面才能重新结合, 而这通常涉及到较高的能量障碍. 此外, 进一步计算了GaP/SiH vdWH的投影态密度(DOS)[图4(B)]. 结果表明, GaP/SiH vdWH的CBM主要由GaP单层的Ga元素贡献, 而VBM主要由SiH单层的Si元素贡献, 与上述分析一致.

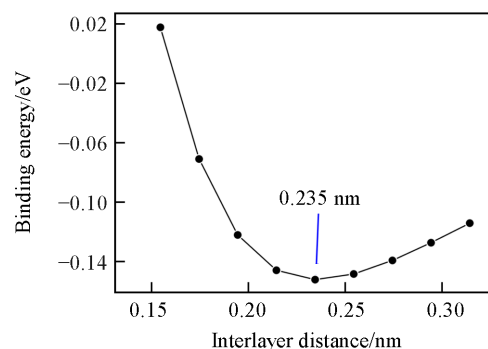


Fig. 3 Binding energy varies of the H3 configuration with the interlayer distance

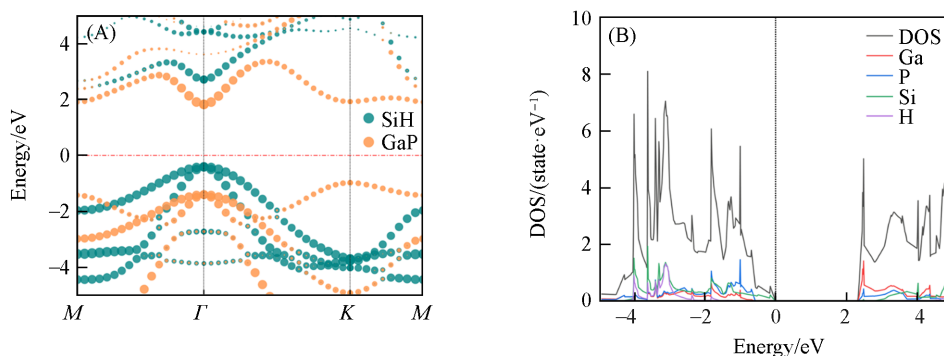


Fig. 4 Electronic energy band dispersion(A) and density of states(DOS)(B) of GaP/SiH vdWH calculated using the HSE06 function

2.2 界面电荷运输

在异质结构形成的过程中, 由于两种单层材料的电子亲和能不同, 会导致电荷的重新分布. 因此, 通过计算平面平均差分电子密度 [$\Delta\rho(z)$, eV/nm], 可以定性分析电子转移的情况, 根据下式确定^[19]:

$$\Delta\rho(z) = \rho(z)_{\text{GaP/SiH}} - \rho(z)_{\text{GaP}} - \rho(z)_{\text{SiH}} \quad (3)$$

式中: $\rho(z)_{\text{GaP/SiH}}$, $\rho(z)_{\text{GaP}}$ 和 $\rho(z)_{\text{SiH}}$ (eV/nm) 分别为 GaP/SiH vdWH、单层 GaP 和单层 SiH 的电子密度. GaP/SiH 异质结构沿 z 轴方向的平面平均差分电子密度如图 5(A) 所示, 当 $\Delta\rho > 0$ 时, 代表电子的积累; 反之, $\Delta\rho < 0$ 表示电子的消散. 图 5(A) 插图展示了 GaP/SiH 异质结构的三维差分电子密度, 其中, 黄色和青色区域分别代表电子的积累和消散, 直观描绘了电子在空间中的分布情况. 计算结果表明, 在 GaP/SiH 异质结构形成后, 电子积累在 GaP 层, 空穴聚集在 SiH 层, 形成了一个由 SiH 指向 GaP 的极化电场. 在受到光照射时, 异质结中的电子会从价带跃迁到导带, 并产生电子-空穴对. 在内建电场的作用下, 电子和空穴对会被迅速分离, 电子聚集在 SiH 层, 空穴聚集在 GaP 层. 这种迅速的电荷载流子分离减少了电子与空穴的直接复合概率, 从而提高了光生电荷载流子的寿命. 这种深入的分析有助于理解异质结构中的电子行为, 对于优化材料的电子特性和设计新型电子器件具有重要意义.

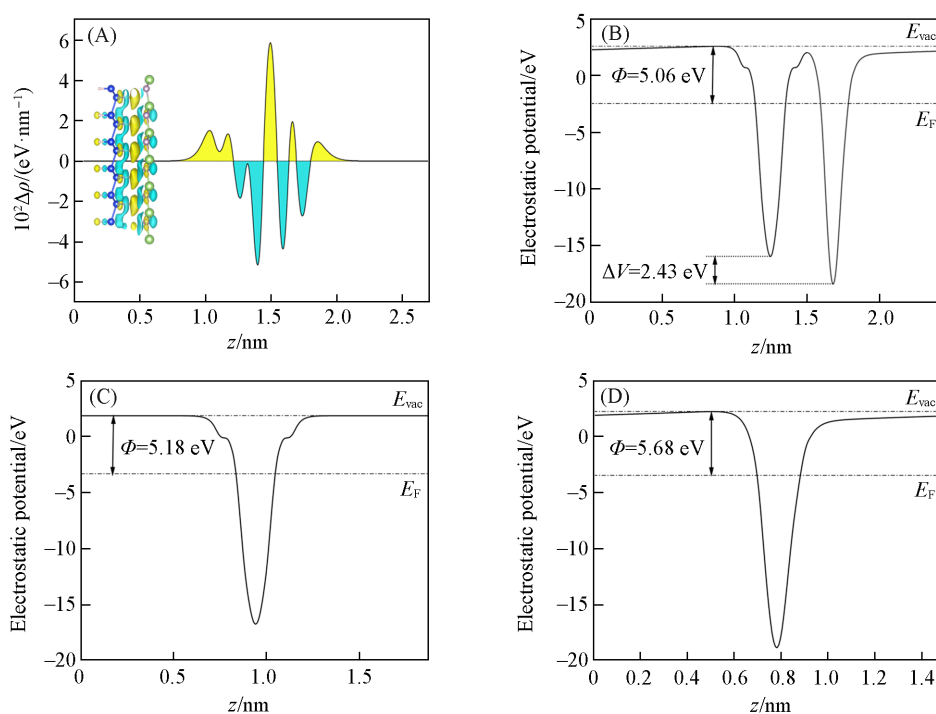


Fig. 5 Planar mean electron density of GaP/SiH vdWH(A) and the electrostatic potential distributed along the z -axis of GaP/SiH vdWH(B), SiH monolayer(C) and GaP monolayer(D)

(A) Inset indicates 3D differential electron density at an isosurface value of $6.12 \times 10^{-2} \text{ e/nm}^3$.

功函数是描述电子从材料表面逃逸至真空的最小能量的物理量, 对于评估电子输运特性和异质结构的能带对准至关重要, 对研究材料表面电子性质具有显著的影响. 功函数(Φ)根据下式得出^[33]:

$$\Phi = E_{\text{vac}} - E_{\text{F}} \quad (4)$$

式中: E_{vac} (eV) 代表真空能级; E_{F} (eV) 代表费米能级. 如图 5(B) 所示, 计算得到的 GaP/SiH 异质结构的功函数为 5.06 eV, 与单层的 SiH (5.18 eV) 和 GaP (5.68 eV) 材料相比, 异质结构的功函数有所降低 [图 5(C) 和 (D)], 有助于电子更轻松地跃迁至材料表面, 从而提升电子迁移率及电子器件的整体性能. 此外, 由于两种材料功函数的不同将会导致电子的重新分布. 当两种材料接触时, 电子会从功函数较低的材料流向功函数较高的材料, 直到两种材料的费米能级达到平衡, 这种电荷转移会导致界面处形成一个内建电场和电势差. 通过对比静电位分布可以发现, 在 GaP/SiH 异质结构界面处出现一个 $\Delta V = 2.43 \text{ eV}$ 的接触势差 (Contact potential difference, CPD), 方向与上述所分析的极化电场一致. 这对于理解异质结构中的电荷转移机制和界面特性具有重要意义.

2.3 双轴应变及垂直应变对能带结构的影响

应变可以诱导二维材料中的新奇物理现象, 如量子限域效应和超晶格效应等. 这些现象可能导致材料出现新的电子、光学和磁学特性, 为研究新型材料提供新的途径. 其中, 双轴应变 (ε , %) 是调节

二维异质结构电子性质的有效手段, 定义如下^[19]:

$$\varepsilon = \frac{(a - a_0)}{a_0} \times 100\% \quad (5)$$

式中: a 和 a_0 分别为施加应变后和初始结构的晶格常数; 当 $\varepsilon > 0$ 时代表拉伸应变, $\varepsilon < 0$ 时表示压缩应变. 对 GaP/SiH 异质结构施加 -8%~14% 的应变, 使用 HSE06 杂化泛函精确计算了不同应变下的电子能带[图 6(A)], 图中红色曲线为系统总能随所施加应变的变化, 表明该系统具有足够的柔性和可逆性. 可以发现, 当施加压缩应变时, 材料由直接带隙转变为间接带隙. 并且当应变强度为 0~-2% 时, 带隙小幅度增加; 此后, 随着应变强度的增加, 带隙逐渐减小. 由图 6(C) 可见, 当施加双轴应变为 -6% 时, GaP/SiH 异质结构为间接带隙半导体, 但仍保持 II 型能带排列方式. 反之, 当施加拉伸应变时, GaP/SiH 异质结的 VBM 和 CBM 始终保持不变, 随着拉伸应变的增加, 带隙逐渐减小. 当施加 14% 的拉伸应变时, GaP/SiH 异质结的带隙为 0 eV, 材料实现了从半导体向金属性质的转变. 此外, 在整个应变过程中, GaP/SiH 异质结始终保持 II 型能带排列, 拥有强健的稳定性.

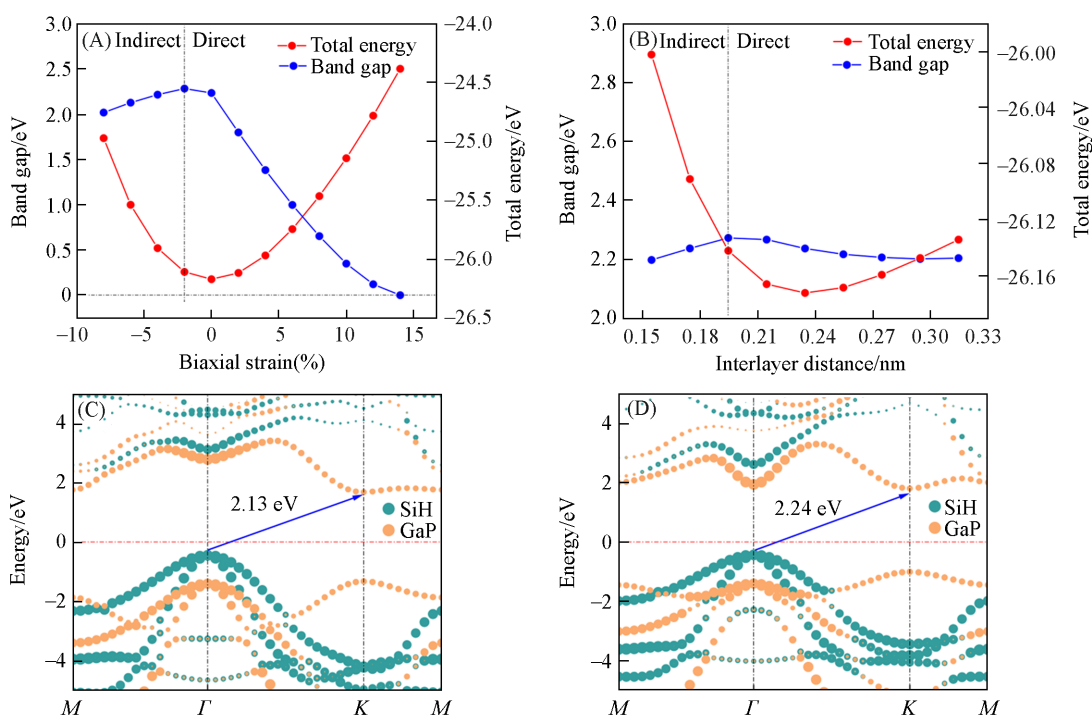


Fig. 6 Band gap value and total energy of GaP/SiH vdWH under different conditions of biaxial strain(-8%—14%)(A) and interlayer spacing(0.155—0.355 nm)(B), the band structure of the GaP/SiH heterostructure under -6% strain condition(C) and layer spacing of 0.175 nm(D)

施加垂直应变能够改变二维材料的晶格结构和电子结构, 从而有效调控其物理性质, 对于实现高性能的电子和光电器件具有重要意义. 通过改变层间距来实现对 GaP/SiH 异质结的垂直应变调控. 设置垂直应变的步长为 0.02 nm, 应变范围为 0.155~0.315 nm, 详细计算了不同层间距下 GaP/SiH 异质结构的带隙[图 6(B)]. 随着层间距从 0.195 nm 减小到 0.155 nm, GaP/SiH 异质结实现了由直接带隙向间接带隙的转变. 典型的, 当施加层间距为 0.175 nm 时, GaP/SiH 异质结的能带结构如图 6(D) 所示. 而随着层间距的增加, VBM 和 CBM 的位置始终保持不变, 拥有直接带隙半导体的性质. 总体来说, 垂直应变对 GaP/SiH 异质结的影响很小, 禁带宽度始终在 2.24 eV 左右浮动, 结构始终保持 II 型能带排列. 上述结果表明该异质结构具有良好的稳定性.

2.4 光学性质

良好的光吸收能力, 特别是在太阳光谱的有效范围内, 意味着更多的光子能够被材料捕获并利用. 光吸收谱等光学特性的计算基于频率相关的复介电函数, 定义如下:

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_1(\omega) + i\varepsilon_2(\omega) \quad (6)$$

式中: i 为虚数单位, 表示复数的虚部; ω (rad/s) 为角频率; $\varepsilon(\omega)$ 为复介电函数, $\varepsilon_1(\omega)$ 和 $\varepsilon_2(\omega)$ 分别为其实部和虚部, 由下面公式确定:

$$\varepsilon_1(\omega) = 1 + \frac{2}{\pi} P \int_0^\infty \frac{\varepsilon_1(\omega')\omega'}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega' \quad (7)$$

$$\varepsilon_2(\omega) = \frac{4\pi^2 e^2}{\Omega} \lim_{q \rightarrow 0} \frac{1}{q^2} \sum_{c,v,k} 2\omega_k \delta(\epsilon_{ck} - \epsilon_{vk} - \omega) \times \langle \mu_{ck+e_{\alpha}} | \mu_{vk} \rangle \langle \mu_{ck+e_{\beta}} | \mu_{vk} \rangle^* v \quad (8)$$

式中: P 为主值积分; ω' (rad/s) 为积分变量; k (m^{-1}) 为波矢量; ϵ (F/m) 为介电常数; μ ($\text{C}\cdot\text{m}$) 为偶极矩; e_{α} 和 e_{β} 分别为 α 和 β 方向的单位基矢; Ω (nm^3) 为单元胞体积; v 和 c 分别代表价带态和导带态; q 为入射电磁辐射的布洛赫矢量. 光学吸收系数 $\alpha(\omega)$ 从复介电函数导出并且按下式计算^[34]:

$$\alpha(\omega) = \sqrt{2} \omega \left[\sqrt{\varepsilon_1^2(\omega) + \varepsilon_2^2(\omega)} - \varepsilon_1(\omega) \right]^{1/2} \quad (9)$$

绘制了单层 GaP、单层 SiH 以及 GaP/SiH 异质结构的光吸收特性曲线(图7). 可见, 单层 SiH 在可见光拥有较弱的吸收能力, 但却在紫外光区域拥有很强的光吸收系数 ($2.01 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$); 与 SiH 相比, 单层 GaP 在可见光区域虽有较高的光吸收系数, 但其光吸收能力并不理想. GaP/SiH 异质结构的形成使其光吸收能力得到了较大提升. 在可见光区域内, GaP/SiH 异质结的光吸收能力得到有效提升, 可达 $1.03 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$; 而在紫外光吸收区域, GaP/SiH 异质结的光吸收强度可达 $2.34 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$. 整体而言, 与两种独立的单层材料相比, GaP/SiH 异质结拥有较宽范围的良好光吸收能力.

此外, 大量的文献^[5,19]计算结果证明, 施加应变工程能够有效提升二维材料的光吸收能力. 因此, 分别计算了双轴应变和垂直应变对 GaP/SiH 异质结构光吸收能力的影响. 图8(A)给出了在 $\pm 2\%$, $\pm 4\%$, $\pm 6\%$ 双轴应变下的光吸收曲线. 可见, 随着压缩应变的增大, 材料对可见光捕获能力减弱, 光吸收曲线整体向紫外光区域偏移, 并在 -6% 的双轴应变下拥有最高的紫外光吸收能力 ($2.86 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$); 随着拉伸应变的增大, 光吸收曲线发生明显的红移, 材料对可见光的吸收能力逐渐增强. 由图8(B)可见, 随着层间距的减小, 可见光区域的光吸收边有轻微的左移. 但是整体来说, 垂直应变对 GaP/SiH 异质结的光吸收能力影响较小. GaP/SiH 异质结在不同环境下展现出的可调谐特性, 为其在众多领域中的应用提供了广阔的途径, 为设计新型的光电子器件和光纳米器件提供了一定的理论指导.

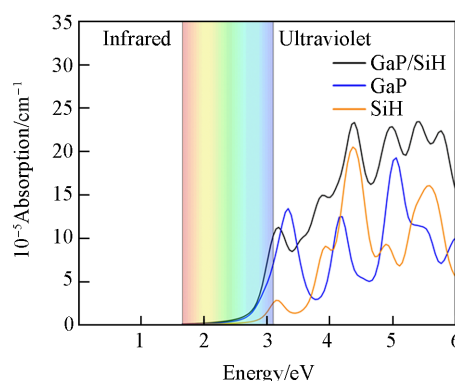


Fig. 7 Optical absorption spectra of SiH monolayer, GaP monolayer and SiH/GaP vdWH

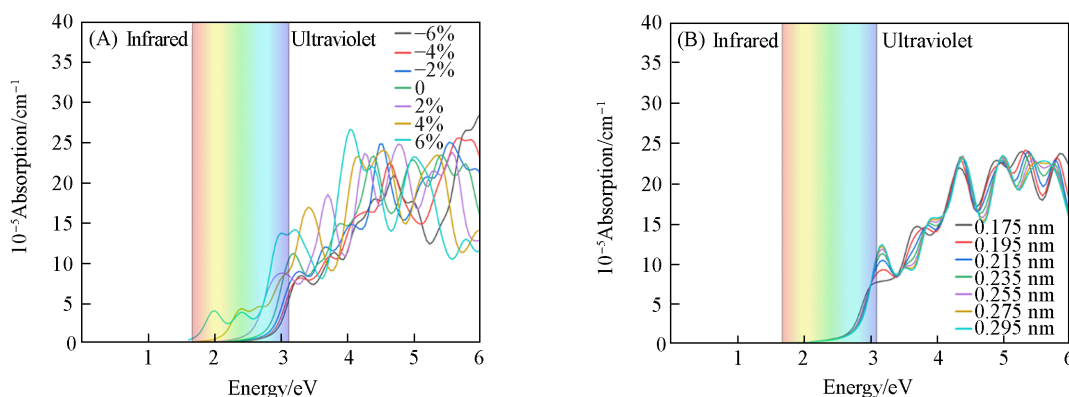


Fig. 8 Variation of light absorption capacity of GaP/SiH vdWH under different conditions of biaxial strain (-6% — 6%)(A) and vertical strain (0.175 — 0.295 nm)(B)

3 结 论

预测并构建了一种新型的 GaP/SiH 异质结构, 通过计算 3 种不同构型的结合能, 确定最低构型, 并对其能带结构以及光学特性进行了研究. 研究发现, GaP/SiH 异质结构的带隙为 2.24 eV, 是一种典型的直接带隙半导体, 并且 II 型能带排列的结构能够有效抑制光生载流子的复合. 通过施加不同的双轴应变和垂直应变, 可以对异质结的能带结构和光吸收能力进行一定范围内的精确调控. 对于初始的单层材料, GaP/SiH 异质结构拥有从可见光到紫外光的优异光吸收能力, 光吸收强度最高可达 $2.34 \times 10^6 \text{ cm}^{-1}$.

参 考 文 献

- [1] Novoselov K. S., Geim A. K., Morozov S. V., Jiang D., Zhang Y., Dubonos S. V., Grigorieva I. V., Firsov A. A., *Science*, **2004**, *306*, 666—669
- [2] Ni M., Leung M. K. H., Leung D. Y. C., Sumathy K., *Renewable Sustainable Energy Rev.*, **2007**, *11*, 401—425
- [3] Chen S. S., Takata T., Domen K., *Nat. Rev. Mater.*, **2017**, *2*, 17
- [4] Xu X., Yang L., Gao Q., Jiang X., Li D., Cui B., Liu D., *J. Phys. Chem. C*, **2023**, *127*, 7878—7886
- [5] Zeng L., Zhang S., Yao L., Bi Z., Zhang Y., Kang P., Yan J., Zhang Z., Yun J., *Nanotechnology*, **2022**, *34*, 065702
- [6] Luo Q., Yin S., Sun X., Tang Y., Feng Z., Dai X., *Mater. Sci. Semicond. Process.*, **2022**, *152*, 107103
- [7] Ren K., Yu J., Tang W., *J. Alloys Compd.*, **2020**, *812*, 152049
- [8] Qiu J., Fu H., Xu Y., Zhou Q., Meng S., Li H., Chen L., Wu K., *ACS Nano*, **2015**, *9*, 11192—11199
- [9] Houssa M., Scalise E., Sankaran K., Pourtois G., Afanas'ev V., Stesmans A., *Appl. Phys. Lett.*, **2011**, *98*, 22
- [10] Wei W., Dai Y., Huang B., Jacob T., *PCCP*, **2013**, *15*, 8789—8794
- [11] Liang J., Dai X., Song J., Pu K., Tang J., Qin X., Wang F., Guo Y., Zhao T., Lei T., *Phys. E*, **2023**, *153*, 115759
- [12] Lv L., Ma X., Lou W., Zhang X., Shen C., Xia C., Liu Y., *Phys. Status Solidi (B)*, **2022**, *259*, 2100666
- [13] Khang N. D., Nguyen C. Q., Nguyen C. V., *Dalton Trans.*, **2023**, *52*, 2080—2086
- [14] Yang Z., Chen H., Wu F., Hou Y., Qiao J., Ma X., Bai H., Ma B., Li J., *Int. J. Hydrogen Energy*, **2022**, *47*, 31295—31308
- [15] Singh A. K., Zhuang H. L., Hennig R. G., *Phys. Rev. B*, **2014**, *89*, 245431
- [16] Kurt H. H., Tanrıverdi E., *J. Electron. Mater.*, **2017**, *46*, 4024—4033
- [17] Hasenöhrl S., Novák J., Vávra I., Šatka A., *J. Cryst. Growth*, **2004**, *272*, 633—641
- [18] Nagarajan S., Jussila H., Lemettinen J., Banerjee K., Sopanen M., Lipsanen H., *J. Phys. D: Appl. Phys.*, **2013**, *46*, 165103
- [19] Li X., Bao A., Guo X., Ye S., Chen M., Hou S., Ma X., *Appl. Surf. Sci.*, **2023**, *618*, 156544
- [20] Bahuguna B. P., Saini L., Sharma R. O., Tiwari B., *Phys. E*, **2018**, *99*, 236—243
- [21] Xie M., Li Y., Liu X., Li X. A., *Appl. Surf. Sci.*, **2022**, *591*, 153198
- [22] Wang J., Wei X., Xuan J., Zhang Y., Fan J., Ni L., Yang Y., Liu J., Tian Y., Ma S., *CrystEngComm*, **2023**, *25*, 2326—2338
- [23] Kresse G., Furthmüller J., *Phys. Rev. B*, **1996**, *54*, 11169—11186
- [24] Kresse G., Hafner J., *Phys. Rev. B*, **1994**, *49*, 14251—14269
- [25] Blöchl P. E., *Phys. Rev. B*, **1994**, *50*, 17953—17979
- [26] Perdew J. P., Burke K., Ernzerhof M., *Phys. Rev. Lett.*, **1996**, *77*, 3865
- [27] Monkhorst H. J., Pack J. D., *Phys. Rev. B*, **1976**, *13*, 5188—5192
- [28] Grimme S., Antony J., Ehrlich S., Krieg H., *J. Chem. Phys.*, **2010**, *132*, 154104
- [29] Heyd J., Scuseria G. E., Ernzerhof M., *J. Chem. Phys.*, **2003**, *118*, 8207—8215
- [30] Han S., Li Y., Chai J., Wang Z., *PCCP*, **2020**, *22*, 8565—8571
- [31] Wang Q., Zhu Q., Cao L., Fan L., Gu F., Zhang Y., Zheng C., Xiong S., Xu L., *Coatings*, **2024**, *14*, 263
- [32] Li J., Huang Z., Ke W., Yu J., Ren K., Dong Z., *J. Alloys Compd.*, **2021**, *866*, 158774
- [33] Han S., Li Y., Wang Z., *PCCP*, **2020**, *22*, 17145—17151
- [34] Cui Y., Peng L., Sun L., Qian Q., Huang Y., *J. Mater. Chem. A*, **2018**, *6*, 22768—22777

(Ed.: Y, K, S)