

DOI: 10.17725/rensit.2023.15.393

Новые соединения нитрида бора с атомами в $sp+sp^2$ -гибридизованном состоянии, сформированные на основе слоя $BN-L_{4-8}$

Ряшенцев Д.С., Кудрявцева А.К.

Челябинский государственный университет, <https://www.csu.ru/>

Челябинск 454001, Российская Федерация

E-mail: ryashentsev_dmitry@mail.ru, tsipysbevaanna@yandex.ru

Поступила 11.08.2023, рецензирована 18.08.2023, принята 25.08.2023, опубликована 06.12.2023.

Представлена действительным членом РАЕН В.А. Бушуевым

Аннотация: Методом теории функционала плотности (DFT) определены кристаллические структуры и электронные свойства новых слоевых полиморфных разновидностей нитрида бора с графеноподобной структурой. Структуры новых графеноподобных монослоев состоят из атомов бора и азота в sp - и sp^2 -гибридизованном состоянии и были модельно построены из слоя графеноподобного нитрида бора $BN-L_{4-8}$ путем частичной замены атомов в трехкоординированном (sp^2 -гибридизованном) состоянии на атомы в двухкоординированном состоянии (sp -гибридизованном). В результате теоретического анализа установлена возможность существования семи $sp+sp^2$ новых структур нитрида бора: одна α -типа, три β -типа и три γ -типа, отличающиеся долей атомов в sp -гибридизованном состоянии и их пространственном расположении. Однако, две из трех структурных разновидностей с минимальным содержанием атомов в sp -гибридизованном состоянии (γ -тип) оказались неустойчивыми и в процессе геометрической оптимизации трансформировались в структуры графеноподобных слоев нитрида бора. Структура слоя $BN-L_{4-8}-\gamma_2$ перешла в структуру исходного графеноподобного слоя $BN-L_{4-8}$, в то время как структура слоя $BN-L_{4-8}-\gamma_3$ перешла в структуру графеноподобного слоя $BN-L_{4-6-8}$, где полностью отсутствуют атомы в sp -гибридизованном состоянии. Значения энергии сублимации новых полиморфных разновидностей находятся в диапазоне от 16.23 эВ/(BN) до 16.70 эВ/(BN). Ширина запрещенной зоны варьируется от 3.777 эВ до 3.878 эВ.

Ключевые слова: полиморфизм, нитрид бора, кристаллическая структура, ab initio расчеты, электронные свойства

УДК 538.911+538.915

Благодарности: Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект № 23-23-00140).

Для цитирования: Ряшенцев Д.С., Кудрявцева А.К. Новые соединения нитрида бора с атомами в $sp+sp^2$ -гибридизованном состоянии, сформированные на основе слоя $BN-L_{4-8}$. РЭНСИТ: Радиозлектроника. Наносистемы. Информационные технологии, 2023, 15(4):393-400. DOI: 10.17725/rensit.2023.15.393.

New compounds of boron nitride with atoms in the $sp + sp^2$ hybridized state formed on the basis of the $BN-L_{4-8}$ layer

Dmitry S. Ryashentsev, Anna K. Kudryavtseva

Chelyabinsk State University, <https://www.csu.ru/>

Chelyabinsk 454001, Russian Federation

E-mail: ryashentsev_dmitry@mail.ru, tsipysbevaanna@yandex.ru

Received August 11, 2023, peer-reviewed August 18, 2023, accepted August 25, 2023, published December 06, 2023.

Abstract: The density functional theory (DFT) method was used to determine the crystal structures and electronic properties of new layered polymorphic varieties of boron nitride with a graphyne-like structure. The structures of new graphyne-like monolayers consist of boron and nitrogen atoms in the sp - and sp^2 -hybridized state and were model-built from a layer of graphene-like boron

nitride BN-L_{4-8} by partial replacement of atoms in the three-coordinated (sp^2 -hybridized) state by atoms in the two-coordinated state (sp -hybridized). As a result of theoretical analysis, the possibility of the existence of seven $sp + sp^2$ new structures of boron nitride was established: one α -type, three β -types and three γ -types, differing in the proportion of atoms in the sp -hybridized state and their spatial arrangement. However, two of the three structural varieties with a minimum content of atoms in the sp -hybridized state (γ -type) turned out to be unstable and, in the process of geometric optimization, were transformed into structures of graphene-like layers of boron nitride. The structure of the BN-L_{4-8} - γ_2 layer passed into the structure of the original graphene-like layer BN-L_{4-8} , while the structure of the BN-L_{4-8} - γ_3 layer passed into the structure of the graphene-like layer BN-L_{4-6-8} , where there are no atoms in the sp -hybridized state. The sublimation energies of the new polymorphic varieties range from 16.23 eV/(BN) to 16.70 eV/(BN). The band gap varies from 3.777 eV to 3.878 eV.

Keywords: polymorphism, boron nitride, crystal structure, ab initio calculations, electronic properties
UDC 538.911+538.915

Acknowledgments: The study was supported by the Russian Foundation for Basic Research (Project № 23-23-00140).

For citation: Dmitry S. Ryashentsev, Anna K. Kudryavtseva. New compounds of boron nitride with atoms in the $sp+sp^2$ -hybridized state formed on the basis of the BN-L_{4-8} layer. *RENSIT: Radioelectronics. Nanosystems. Information Technologies*, 2023, 15(4):393-400e. DOI: 10.17725/rensit.2023.15.393.

СОДЕРЖАНИЕ

1. ВВЕДЕНИЕ (394)
 2. МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДЫ (395)
 3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ (395)
 4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ (399)
- ЛИТЕРАТУРА (399)

1. ВВЕДЕНИЕ

Соединения нитрида бора являются изоэлектронными и изоструктурными аналогами углеродных соединений, и их кристаллическая структура может быть подобной структуре графита и алмаза [1-2]. Теоретически предсказаны гибридные углеродные материалы, состоящие из атомов с различной гибридизацией электронных орбиталей. Наиболее интересны углеродные материалы $sp+sp^2$, состоящие из атомов углерода в двух- и трехкоординированном состоянии, которые были названы графинами [3-6]. Атомы бора и азота в BN, а также атомы углерода в углеродных материалах могут находиться в различных гибридизованных состояниях sp , sp^2 или sp^3 [7-9]. Поэтому теоретически возможно существование гибридных $sp+sp^2$ -соединений нитрида бора, подобных графиновым соединениям,

состоящих из атомов углерода [10-11]. Структура BN-графиновых соединений теоретически может быть построена из трех основных полиморфных разновидностей графеноподобного нитрида бора: BN-L_6 , BN-L_{4-8} и BN-L_{4-6-12} [12,13], путем частичной замены атомов в трехкоординированном состоянии на атомы в двухкоординированном состоянии. Ранее, в работах [14,15] были теоретически исследованы структура и электронные свойства ряда новых полиморфных разновидностей нитрида бора со слоевой структурой, подобной графинам, сформированных на основе гексагонального нитрида бора BN-L_6 . Полиморфные разновидности таких гибридных соединений различаются соотношением атомов в различных гибридизованных состояниях, степенью деформации их структуры, и значением ширины запрещенной зоны, вследствие чего их свойства могут различаться. В данной статье теоретически исследуются структура и электронные свойства новых полиморфных слоевых разновидностей нитрида бора с графиноподобной структурой, модельно построенных из графеноподобного слоя BN-L_{4-8} .

2. МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДЫ

В качестве исходных структур для моделирования графитоподобных слоев нитрида бора были взяты графитовые слои, описанные в работе [5,6]. Ряд новых структурных разновидностей графитоподобного нитрида бора может быть получен, рассматривая постепенную трансформацию структуры графитоподобного нитрида бора $BN-L_{4-8}$, в которой все атомы находятся в состоянии sp^2 -гибридизации до графитоподобных ($sp+sp^2$), где число атомов в sp -гибридизованном состоянии максимально. В зависимости от структуры, графитоподобные слои можно разделить на три группы (α , β и γ), отличающихся долей атомов в sp -гибридизованном состоянии. Для построения α -графитоподобного слоя необходимо заменить все три связи у трехкоординированного атома на двухкоординированные, для β -графитоподобного слоя необходимо заменить две связи из трех, и для построения γ -графитоподобного слоя необходимо заменить одну связь.

Анализ графитоподобных нитридборных соединений показал, что возможно модельно построить семь $sp+sp^2$ новых структур нитрида бора: одна α -типа, три β -типа и три γ -типа, отличающиеся долей атомов в sp -гибридизованном состоянии и их пространственном расположении. Модельное построение было выполнено при помощи программного пакета Quantum ESPRESSO [16]. Методом теории функционала плотности [17] в обобщенном градиентном приближении [18] были выполнены расчеты структур трехмерных кристаллов, состоящие из стопок графитоподобных слоев, расстояние между которыми составляло 10 Å для исключения влияния соседних слоев в стопках. Расчеты проводились для k -точечных сеток: $12 \times 12 \times 12$, энергия отсечки по базису плоских волн составляла 70 Ридбергов при температуре 0.01 К. В качестве структурных параметров были определены длины векторов элементарных трансляций (a , b), длины межатомных связей (Å) и углы между ними ($^\circ$). Для определения числа структурных позиций определяли значение кольцевого параметра Уэллса (Rng), для определения устойчивости структур

вычисляли деформационный параметр (Def) и энергию сублимации (E_{sub}). По графикам зонной структуры и плотностей электронных состояний были определены численные значения ширины запрещенной зоны.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Методом теории функционала плотности (DFT) в обобщенном градиентном приближении (GGA) была выполнена геометрическая оптимизация семи модельно построенных слоев нитрида бора с графитоподобной структурой. В результате выполненных расчетов были определены геометрически оптимизированные структуры пяти новых графитоподобных слоев нитрида бора. Монослой с наименьшим числом атомов в sp -гибридизованном состоянии $BN-L_{4-8}-\gamma 2$ и $BN-L_{4-8}-\gamma 3$ оказались неустойчивыми, в процессе геометрической оптимизации их структура трансформировалась в графитоподобные соединения нитрида бора $BN-L_{4-6-8}$ и $BN-L_{4-8}$, далее их структура не рассматривалась. Остальные пять слоев: $BN-L_{4-8}-\alpha 1$, $BN-L_{4-8}-\beta 1$, $BN-L_{4-8}-\beta 2$, $BN-L_{4-8}-\beta 3$ и $BN-L_{4-8}-\gamma 1$ – имеют устойчивую структуру, и их изображения представлены на **Рис. 1**. На этом рисунке приведены изображения слоя графитоподобного нитрида бора $BN-L_{4-8}$, на основе которого были построены полиморфные разновидности графитоподобного нитрида бора и их структуры, а также выделены элементарные ячейки. В слоях $BN-L_{4-8}-\alpha 1$, $BN-L_{4-8}-\beta 1$, $BN-L_{4-8}-\beta 3$ и $BN-L_{4-8}-\gamma 1$ – элементарные ячейки относятся к тетрагональной сингонии, в которых содержится от 24 до 64 атомов (**Таблица 1**). Значения длин векторов элементарных трансляций ($a = b$) находятся в диапазоне от 11.096 Å – наблюдается для слоя $BN-L_{4-8}-\beta 3$, до 19.689 Å – у слоя $BN-L_{4-8}-\alpha 1$. Элементарная ячейка слоя $BN-L_{4-8}-\beta 2$ относится к ромбической сингонии, в которой содержится 24 атома. Длины векторов элементарных трансляций составляют 14.868 Å и 6.996 Å.

В слоях $BN-L_{4-8}-\alpha 1$, $BN-L_{4-8}-\beta 1$ и $BN-L_{4-8}-\gamma 1$ фрагменты линейных цепочек оказались прямыми, в то время как в слоях $BN-L_{4-8}-\beta 2$ и $BN-L_{4-8}-\beta 3$ – они оказались изогнутыми. В связи с тем, что графитоподобные слои нитрида бора образованы атомами с различным содержанием sp - и sp^2 -гибридизованных связей, то структура

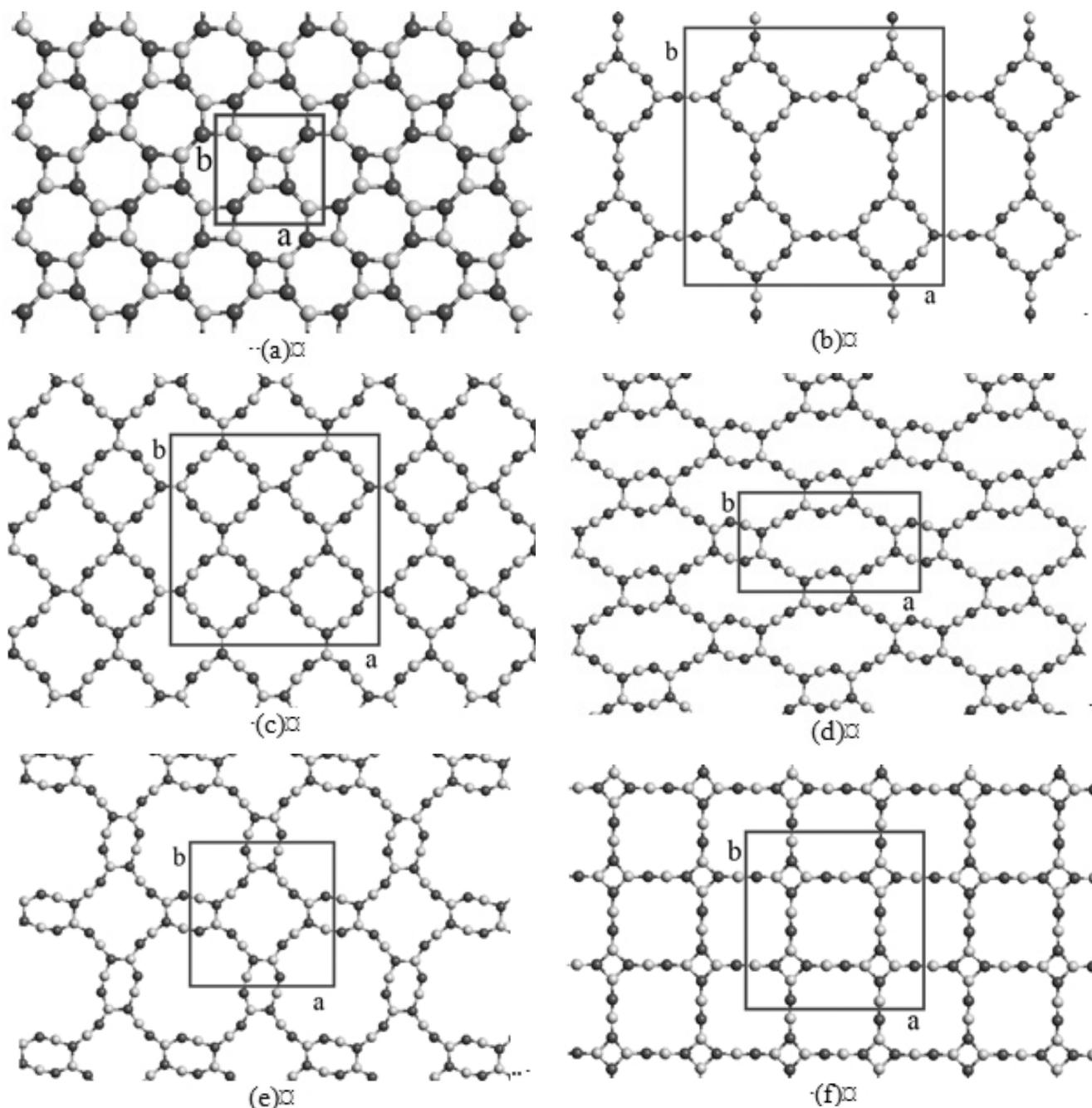


Рис. 1. Геометрически оптимизированные в результате DFT-GGA расчетов слоевые структуры и элементарные ячейки полиморфных разновидностей нитрида бора: (a) $\text{BN-L}_{4.8}$; (b) $\text{BN-L}_{4.8}\text{-a1}$; (c) $\text{BN-L}_{4.8}\text{-}\beta 1$; (d) $\text{BN-L}_{4.8}\text{-}\beta 2$; (e) $\text{BN-L}_{4.8}\text{-}\beta 3$; (f) $\text{BN-L}_{4.8}\text{-}\gamma 1$.

таких слоев будет характеризоваться двумя различными структурными позициями, которые численно выражаются значением кольцевого параметра Уэллса (Rng). Первая структурная позиция – атомы в sp^2 -гибридизованном состоянии, характеризующаяся тремя длинами связей: L_1 , L_2 , L_3 , значения которых находятся в диапазоне от 1.370\AA ($\text{BN-L}_{4.8}\text{-}\gamma 1$) до 1.546\AA ($\text{BN-L}_{4.8}\text{-}\beta 2$). Кроме того, первая структурная позиция характеризуется значениями трех углов между связями: $\varphi_{1,2}$, $\varphi_{1,3}$ и $\varphi_{2,3}$, значения которых

варьируются от 86.27° до 136.86° ($\text{BN-L}_{4.8}\text{-}\gamma 1$). Длины межатомных расстояний и углы между ними приведены в **Таблице 2**. Вторая структурная позиция – атомы в sp -гибридизованном состоянии, которая характеризуется двумя длинами связей (L_3 и L_4). Связь L_3 соединяет между собой атомы, находящиеся в sp^2 - и sp -гибридизованном состоянии, и является общей для двух структурных позиций. Межатомная связь L_4 характеризует расстояние между атомами во фрагменте линейной цепочки. Она является

Таблица 1

Свойства и структурные параметры полиморфных разновидностей нитрида бора с графитоподобной структурой

Слой	BN-L ₆	BN-L _{4,8}	BN-L _{4,8} -α1	BN-L _{4,8} -β1	BN-L _{4,8} -β2	BN-L _{4,8} -β3	BN-L _{4,8} -γ1
Сингония	Гекс	Тетр	Тетр	Тетр	Ромб	Тетр	Тетр
a, Å	2.512	4.942	19.689	14.307	14.868	11.096	12.286
b, Å					6.996		
c, Å	10.000	10.000	10.000	10.000	10.000	10.000	10.000
β, °	120	90	90	90	90	90	90
Rng _I	63	4182	242121	122161	20281	24116181	16241
Rng _{II}	-	-	242	161121	202	24181	162
N, атом	2	8	64	48	24	24	32
ρ, г/см ²	0.754	0.675	0.3402	0.4832	0.4754	0.4017	0.4368
Def, °	0.325	50.55	14.04	22.73	39.79	27.62	60.00
E _{total} ^I , эВ/(э.я.)	-353.43	-1410.64	-11248.80	-8443.13	-4220.88	-4220.39	-5631.84
E _{total} ^I , эВ/(BN)	-353.43	-352.66	-351.52	-351.80	-351.74	-351.70	-351.99
E _{sub} ^I , эВ/(BN)	18.14	17.36	16.23	16.51	16.45	16.41	16.70
Δ, эВ	4.686	3.894	3.878	3.877	3.853	3.868	3.777

самой короткой, и ее значение находится в диапазоне от 1.261Å (BN-L_{4,8}-α1) до 1.282Å (BN-L_{4,8}-γ1). Также, вторая структурная позиция характеризуется одним значением угла между связями L₃ и L₄ (φ_{3,4}), значения которого находится в промежутке от 147.48° (BN-L_{4,8}-β2) до 180.00° (BN-L_{4,8}-γ1). По-видимому, отличия в длинах межатомных связей объясняется различной электронной плотностью в межатомном пространстве. Так максимальная электронная плотность наблюдается в связи L₄.

Минимальное значение слоевой плотности наблюдается для слоя с максимальным числом атомов в *sp*-гибридизованном состоянии – BN-L_{4,8}-α1 и составляет 0.3402 г/см². Максимальное

значение слоевой плотности наблюдается у слоя BN-L_{4,8}-β1 и составляет 0.4832 г/см², что меньше рассчитанного значения для гексагонального нитрида бора (0.754 г/см²) и графитоподобного BN-L_{4,8} (0.675 г/см²) слоя.

Для оценки степени деформации структуры слоев были рассчитаны значения параметра деформации (Таблица 1), который определяли как сумму модулей разностей углов между связями и значением угла в 120° в идеальной гексагональной структуре. Сравнительный анализ численных значений параметров деформации новых полиморфов нитрида бора с графитоподобной структурой показал, что значения данного параметра

Таблица 2

Длины межатомных связей и углы между ними в графитоподобных слоях BN

Структура	Атом	L ₁ , Å	L ₂ , Å	L ₃ , Å	L ₄ , Å	φ _{1,2} , °	φ _{1,3} , °	φ _{2,3} , °	φ _{3,4} , °
BN-L _{4,8}	B	1.426	1.416	1.421	-	133.47	136.25	90.28	-
	N	1.410	1.387	1.403	-	135.42	134.58	90.01	-
BN-L _{4,8} -α1	B	1.421	1.435	1.436	1.261	122.15	121.89	115.97	179.52
	N	1.414	1.427	1.427	1.261	124.26	125.15	110.59	179.30
BN-L _{4,8} -β1	B	1.478	1.413	1.412	1.271	119.27	119.40	121.33	171.62
	N	1.478	1.410	1.411	1.271	123.81	124.02	112.18	161.24
BN-L _{4,8} -β2	B	1.397	1.414	1.546	1.279	128.43	113.84	117.73	167.39
	N	1.397	1.407	1.545	1.279	128.33	111.21	120.46	147.48
BN-L _{4,8} -β3	B	1.398	1.421	1.530	1.273	126.32	112.79	120.90	163.38
	N	1.398	1.412	1.530	1.273	127.49	110.41	122.11	175.00
BN-L _{4,8} -γ1	B	1.370	1.499	1.499	1.282	133.14	133.14	93.73	180.00
	N	1.372	1.499	1.499	1.282	136.86	136.86	86.27	180.00

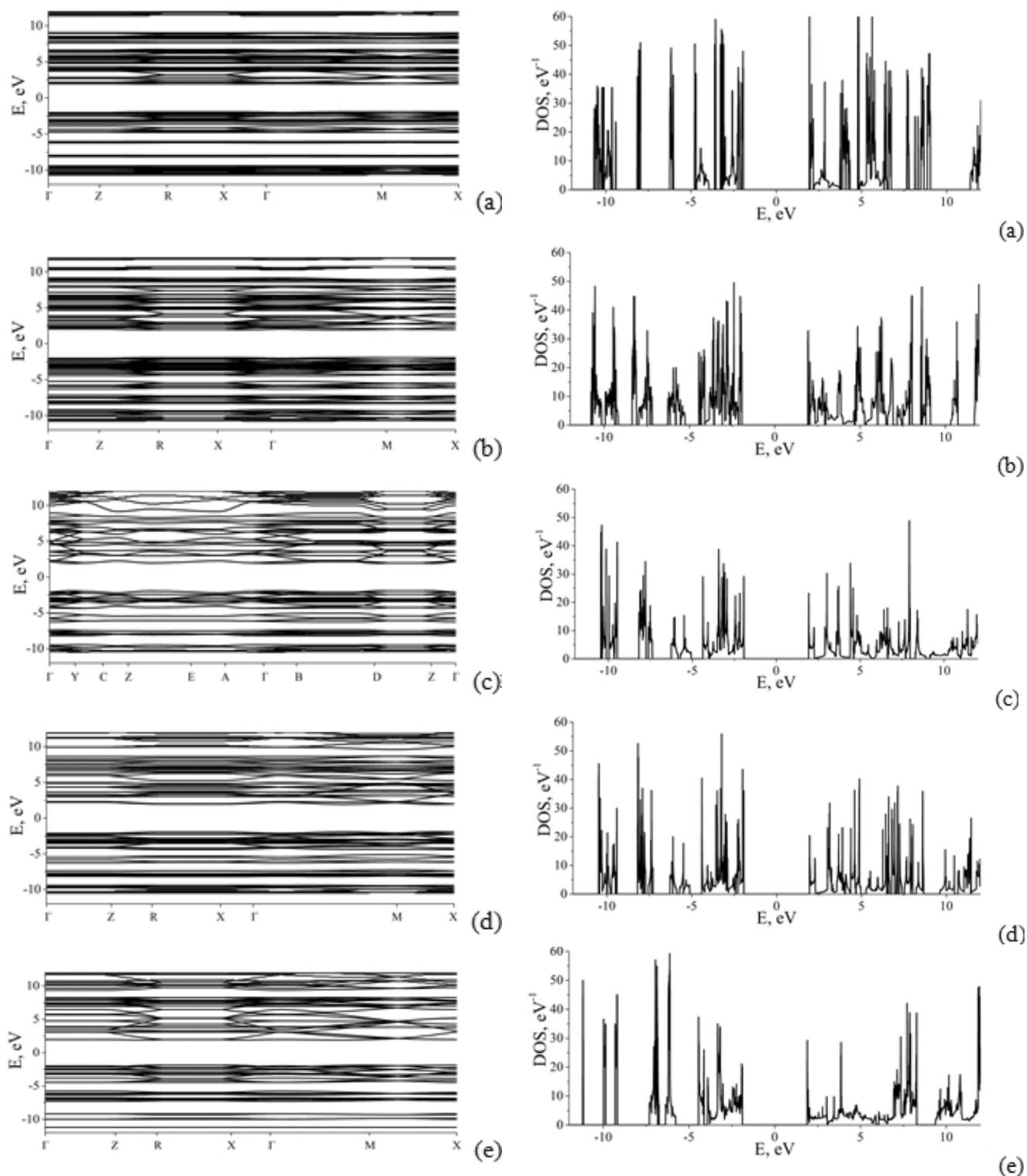


Рис. 2. Зонная структура и плотность электронных состояний новых слоевых полиморфов BN с графитоподобной структурой, сформированных на основе слоя BN-L_{4-8} : (a) $\text{BN-L}_{4-8}\text{-}\alpha 1$; (b) $\text{BN-L}_{4-8}\text{-}\beta 1$; (c) $\text{BN-L}_{4-8}\text{-}\beta 2$; (d) $\text{BN-L}_{4-8}\text{-}\beta 3$; (e) $\text{BN-L}_{4-8}\text{-}\gamma 1$.

минимально для слоя $\text{BN-L}_{4-8}\text{-}\alpha 1$ и составляет 14.04° , максимальное значение параметра наблюдается у слоя $\text{BN-L}_{4-8}\text{-}\gamma 1$ (60.00°), что указывает на сильные деформации за счет четырехугольных фрагментов в структуре слоя. В качестве параметра устойчивости структуры

была рассчитана энергия сублимации (E_{sub}), которую определяли как разность между полной энергией, приходящейся на молекулярную группу BN и энергией изолированных атомов азота и бора. Минимальное значение энергии сублимации наблюдается для слоя

$BN-L_{4-8}-\alpha 1$ с максимальным числом атомов в sp -гибридизованном состоянии и составляет 16.23 эВ/(BN), что указывает на низкую устойчивость данного слоя. Максимальное значение энергии сублимации наблюдается для полиморфа $BN-L_{4-8}-\gamma 1$ с минимальным числом атомов в sp -гибридизованном состоянии и составляет 16.70 эВ/(BN), что меньше энергии сублимации гексагонального нитрида бора (18.14 эВ/(BN)), энергии сублимации β -графиноподобных слоев принимают промежуточное значение.

Результаты расчетов зонной структуры и плотностей электронных состояний приведены на **Рис. 2**. Ширина запрещенной зоны (Δ) на уровне энергии Ферми находится в диапазоне от 3.777 эВ до 3.878 эВ, что указывает на то, что все полиморфы нитрида бора с графиноподобной структурой должны проявлять полупроводниковые свойства и она может изменяться в зависимости от особенностей структуры.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе методом теории функционала плотности при использовании обобщенного градиентного приближения были выполнены расчеты структур, электронных и энергетических характеристик полиморфных разновидностей нитрида бора со структурами α -, β - и γ -графинов, сформированных на основе графеноподобного нитрида бора $BN-L_{4-8}$. Наибольшее значение энергии сублимации наблюдается для слоя $BN-L_{4-8}-\gamma 1$ и составляет 16.70 эВ/(BN), что указывает на то, что данный слой должен иметь стабильную структуру при нормальных условиях. Кроме того, наблюдается зависимость между значениями энергии сублимации полиморфных разновидностей и долей атомов в sp -гибридизованном состоянии. С увеличением доли атомов в sp -гибридизованном состоянии значение энергии сублимации уменьшается. Ширина запрещенной зоны новых полиморфных разновидностей находится в диапазоне от 3.777 эВ до 3.878 эВ, следовательно, все рассмотренные полиморфные разновидности должны проявлять полупроводниковые свойства и могут найти широкое практическое применение при создании гетероструктур для наноэлектронных устройств [19].

ЛИТЕРАТУРА

1. Mohammad SN. Electrical characteristics of thin film cubic boron nitride. *Solid-state electronics*, 2002, 46:203-222.
2. Ji C, Levitans VI, Zhu H, Chaudhuri J, Marathe A, Ma Y. Shear-induced phase transition of nanocrystalline hexagonal boron nitride to wurtzitic structure at room temperature and lower pressure. *The Proceedings of the National Academy of Sciences*, 2012, 109:19108-19112.
3. Беленков ЕА, Мавринский ВВ, Беленкова ТЕ, Чернов ВМ Структурные разновидности графеновых слоев, состоящих из углеродных атомов в состояниях гибридизации sp и sp^2 . *Журнал экспериментальной и теоретической физики*, 2015, 147(5):949-961.
4. Мавринский ВВ, Беленкова ТЕ, Чернов ВМ, Беленков ЕА. Структура полиморфных разновидностей графеновых слоев. *Вестник Челябинского государственного университета*, 2013, 18:31-39.
5. Беленкова ТЕ, Чернов ВМ. Электронная структура слоев из $sp+sp^2$ гибридных углеродных атомов, получающихся из гексагонального графена. *Фундаментальные проблемы современного материаловедения*, 2016, 13(2):149-154.
6. Belenkov EA, Mavrinskii VV, Greshnyakov VA, Brzhezinskaya MM. Structure and electronic properties of graphyne polymorphs formed from 4-8 graphene. *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering*, 2019, 537:22070.
7. Chen Z-G, Zou J, Liu G, Li F, Wang Y, Wang L, Yuan X-L, Sekiguchi T, Cheng H-M, Lu G. Novel Boron Nitride Hollow Nanoribbons. *ACS Nano*, 2008, 2:2183-2191.
8. Stephan O, Bando Y, Loiseau Y, Willaime F, Shramchenko N, Tamiya T, Sato T Formation of small single-layer and nested BN cages under electron irradiation of nanotubes and bulk material. *Applied Physics A*, 1998, 67:107-111.
9. Nagakubo A, Ogi H, Sumlya H, Kusakabe K, Hirao M Elastic constants of cubic and wurtzite boron nitrides. *Applied Physics Letters*, 2013, 102:241909.
10. Zhang Y, Yun J, Wang K, Chen X, Yang Z, Zhang Z, Yan J, Zhao W First-principle study of graphyne-like BN sheet: Electronic structure

- and optical properties. *Computational materials science*, 2017, 136:12-19.
11. Enyashin AN, Ivanovskii AL Graphene-like BN allotropes: Structural and electronic properties from DFTB calculations. *Chemical Physics Letters*, 2011, 509:143-147.
 12. Ryashentsev DS, Belenkov EA Structure and electronic properties of 4-8 and 4-6-12 layered varieties of boron nitride. *Journal of Physics: Conference Series*, 2019, 1410:012016.
 13. Ryashentsev DS, Belenkov EA. New BN polymorphs with two-dimensional structure. *IOP Conference Series: Material Science and Engineering*, 2019, 537:022060.
 14. Ряшенцев ДС, Беленков ЕА. Ab initio расчеты структуры и электронных свойств BN слоевых соединений из sp - и sp^2 -гибридизованных атомов. *Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов*, 2019, 11:511-519.
 15. Ryashentsev DS, Belenkov EA. New polymorphic varieties of boron nitride with structure similar to graphyne. *Journal of Physics: Conference Series*, 2020, 1431:012051.
 16. Gironcoli S, Baroni S, Bonini N, Calandra M, Car R, Cavazzoni C, Ceresoli D, Chiarotti GL, Cococcioni M, Dabo I, Corso AD, Gironcoli S, Fabris S, Fratesi G, Gebauer R, Gerstmann U, Gougoussis C, Kokalj A, Lazzeri M, Martin-Samos L, Marzari N, Mauri F, Mazzarello R, Paolini S, Pasquarello A, Paulatto L, Sbraccia C, Scandolo S, Sclauzero G, Seitsonen AP, Smogunov A, Umari P, Wentzcovitch RMM. Quantum Espresso: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2009, 21:395502.
 17. Koch WA, Holthausen MC. *Chemist's Guide to Density Functional Theory*. Weinheim, Wiley-VCH, 2002, 313 p.
 18. Langreth DC, Mehl MJ. Beyond the local-density approximation in calculations of ground-state electronic properties. *Physical Review B*, 1983, 28(4):1809.
 19. Katoch J, Ulstrup S, Koch RJ, Moser S, McCreary KM, Singh S, Xu J, Jonker BT, Kawakami RK, Bostwick A, Rotenberg E, Jozwiak C. Giant spin-splitting and gap renormalization driven by trions in single-layer WS₂/h-BN heterostructures. *Nature Physics*, 2018, 14:355.

Ряшенцев Дмитрий Сергеевич

старший преподаватель

Челябинский государственный университет

70б, ул. Молодогвардейцев, Челябинск 454136, Россия

E-mail: ryashentsev_dmitry@mail.ru

Кудрявцева Анна Константиновна

студентка

Челябинский государственный университет

70б, ул. Молодогвардейцев, Челябинск 454136, Россия

E-mail: tsipyshevaanna@yandex.ru.