

**ВЛИЯНИЕ АТОМОВ ПРИМЕСИ НА СКОРОСТЬ ДИФФУЗИИ ЛИТИЯ
В КРИСТАЛЛИЧЕСКОМ КРЕМНИИ***

Квантово-химическим методом DFT исследовано влияние атомов примесей (Al, B, C, Ge, P) на скорость диффузии лития в кристаллическом кремнии. Для этого произведен расчет величин потенциальных барьеров для переходов атома лития между потенциальными минимумами вблизи атомов примеси. Показано, что наличие атомов Al и Ge вблизи атома лития снижает высоту энергии перехода на 0,02–0,07 эВ, а присутствие атомов углерода или бора увеличивает энергию перехода на 0,14–0,17 эВ. При этом атомы фосфора не вносят существенного вклада в величину энергии перехода. Вычисленные коэффициенты диффузии показывают, что внесение примесных атомов Al и Ge в кремний ускоряет диффузию лития в ~4 раза при $T = 300$ К.

Ключевые слова: литий-ионные аккумуляторы, кремний, литий, первопринципные расчеты, диффузия.

Развитие литий-ионных аккумуляторов в настоящее время является одной из самых актуальных задач в области источников тока ввиду их перспективности, широкого использования в электронных устройствах и даже в автомобилестроении ближайшего будущего. По сравнению с другими перезаряжаемыми батареями, такими как кислотные, свинцовые, никель-кадмиевые, и никель-металл-гидридные, литий-ионные батареи обладают большим удельным зарядом, рабочим напряжением и меньшим током саморазряда. На сегодняшний день основным материалом анодов современных батарей является графит, который обладает адсорбционной емкостью по литию 372 мА·ч/г, а также материалы на его основе. При внедрении ионы лития слегка раздвигают слои углеродной матрицы и располагаются между ними, образуя интеркалаты. Благодаря слабости Ван-дер-Ваальсовых взаимодействий между слоями sp²-гибридизированного углерода, удельный объем углеродных материалов в процессе интеркаляции-деинтеркаляции ионов лития меняется незначительно, что является положительной чертой данных материалов. К сожалению, в таких материалах происходит значительный перенос электрического заряда с атомов лития на слои графита, что ведет к существенному отталкиванию ионов лития. Это приводит к тому, что максимальное содержание лития в графите соответствует фазе LiC₆, соответствующей вышеупомянутой адсорбционной емкости. Однако уже известно, что теоретическая емкость для батарей с кристаллическим кремниевым анодом может составить величину в 10 раз большую, чем для углеродных материалов [1], поэтому материалы на основе кремния сейчас широко изучаются как анодный материал для следующего поколения литий-ионных батарей [2–5]. Основной проблемой для широкого применения кремния в таких батареях является огромное увеличение объема кристаллической решетки кремния при его интеркаляции литием (~300%), что приводит к быстрой деградации материала и малому количеству циклов сорбция-десорбция [6]. Одной из возможностей обойти данную проблему является использование наноструктур из кремния (наноусы и наночасти-

цы), которые могут эффективно выращиваться, например, из газовой фазы методом CVD и др. В работах [7; 8] было убедительно продемонстрировано, что экспериментальные образцы с использованием кремниевых наноусов обладают в ~3 раза большими адсорбционными свойствами по сравнению с лучшими углеродными наноматериалами. Содержание лития в кремниевых наноусах и покрывающем их аморфном кремнии доходило до состава Li₁₅Si₄, причем кулоновская эффективность составляла ~90% после 100 циклов зарядки. При этом именно использование наноусов, растущих в виде «леса» с выделенным направлением роста, позволило добиться малой деградации материала при значительном количестве циклов заряда-разряда. Малая деградация материала объяснялась тем, что значительные промежутки между отдельными наноусами (диаметром ~50 нм) не мешали «разбуханию» материала уса, внешняя оболочка которого за счет высокой скорости роста состояла из аморфного кремния, составлявшего в общей массе уса ~99%. Тонкая кристаллическая сердцевина уса обеспечивала ему необходимую прочность и гибкость, а аморфное покрытие позволяло абсорбировать литий без разрушения структуры даже при большом разбухании решетки.

В недавних экспериментальных исследованиях было показано, что кристаллический кремний трансформируется в аморфный в процессе интеркаляции литием [9–13]. Результаты дифракции рентгеновский лучей (XDR) кристаллической фазы кремния максимально насыщенной литием при комнатной температуре, показали, что состав этой фазы не Li₂₁Si₅, как предполагалось ранее, а Li₁₅Si₄. Теоретическая адсорбционная емкость этой фазы равна 3579 мА·ч/г, что хорошо согласуется с имеющимися экспериментальными результатами. При этом известно, что фазовая диаграмма систем Si–Li содержит достаточно большое количество кристаллических фаз [14; 15]. Известны фазы Li₂₁Si₅ [16], Li₁₃Si₄, Li₁₄Si₆ [17], Li₁₂Si₇ [18] и LiSi [19; 20], однако они не возникают в процессе электрохимической интеркаляции/деинтеркаляции лития в кристаллический кремний [9–11].

*Работа выполнена в рамках реализации ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2010–2011 гг. (П138).

Данные термодинамически стабильной фазы Si–Li обычно получают в синтезе при высоких температурах (~ 700 К). Фазы, полученные электрохимическим методом и стабильные при комнатной температуре, предположительно являются аморфными сплавами чистого кремния и фазы кристаллического Li₁₅Si₄ [21].

Одновременно с изучением системы Si–Li существуют экспериментальные работы, в которых проводилось изучение диффузии лития в твердых растворах Ge–Si [22]. Авторами было показано, что допирование кремния атомами германия приводит к увеличению скорости диффузии. Таким образом, допированные системы представляют интерес для дальнейших исследований. Их теоретическое исследование необходимо для лучшего понимания процесса сорбции в них лития и преодоления проблемы деградации материала в процессе циклической перезарядки. Поэтому целью данной работы являлось теоретическое исследование влияния атомов примесей на скорость диффузии лития в кристаллическом кремнии, которая в основном определялась величиной энергетического барьера для перехода атома лития между ближайшими минимумами энергии.

Все расчеты в работе проводились в рамках формализма функционала плотности (DFT) [23] с градиентными поправками Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) [24] с использованием лицензионного пакета VASP (Vienna Ab-initio Simulation Package) [25–28]. Данная программа для проведения ab-initio расчетов использует метод псевдопотенциала и разложение волновых функций по базису плоских волн. Для эффективного уменьшения количества базисных функций и увеличения скорости расчетов в программе для всех атомов использовались псевдопотенциалы Вандербиля (Vanderbilt ultrasoft pseudopotential) [29] с энергией обрезания $E_{\text{cutoff}} = 240$ эВ. Для выбора оптимальных параметров расчета и точности интегрирования по первой зоне Бриллюэна был использован набор к-точек, сгенерированный с помощью метода Монхорста-Пака [30] на равномерной сетке 3X3X3, так как было обнаружено, что увеличение числа к-точек не приводит к увеличению точности расчета, но значительно увеличивает время расчета.

В первую очередь была оптимизирована геометрическая структура ячейки кремния в виде куба, включающая 64 атома и 1 атом лития, который располагался в потенциальном минимуме энергии – тетраэдрической поре. При проведении оптимизации геометрии координаты всех атомов в суперячейке варьировались с помощью метода сопряженных градиентов, используя вычисление сил, действующих на атомы. Оптимизация геометрии проводилась до тех пор, пока силы, действующие на каждый атом, не становились менее 0,05 эВ/Å.

Далее были рассчитаны высоты потенциальных барьеров (переходные состояния) для прыжков атомов лития. Данные расчеты были выполнены методом эластичной упругой ленты (NEB) [31]. Для этого были проведены оптимизации двух систем, где атом ли-

тия последовательно находился в соседних тетраэдрических порах (потенциальных минимумах), и после этого найдена траектория движения атома лития (путь реакции) при переходе из одной поры в соседнюю. При этом были вычислены потенциальный профиль и величина барьера перехода атома лития через седловую точку потенциального профиля.

Расчет коэффициента диффузии проводили при помощи стандартного уравнения

$$D = \frac{1}{2Z} \nu a^2, \quad (1)$$

где a^2 – квадрат длины прыжка атома лития между минимумами; ν – частота его перескоков, которая в данном случае была получена из обобщенного уравнения Веньярда [32], учитывающего энергию нулевых колебаний. Данное уравнение позволяет рассчитывать частоту ν перескока атома через потенциальный барьер:

$$\nu = A e^{-\frac{E_{\text{barrier}}}{kT}}, \quad (2)$$

где A – предэкспоненциальный фактор, определяемый следующим образом:

$$A = \frac{kT}{\hbar} \frac{\prod_{i=1}^{3N-3} \left(1 - e^{-\frac{\hbar \nu_i}{kT}}\right)}{\prod_{i=1}^{3N-4} \left(1 - e^{-\frac{\hbar \nu'_i}{kT}}\right)}, \quad (3)$$

где T – температура; ν_i и ν'_i – частоты всех собственных колебаний системы для атома лития в локальном минимуме и седловой точке соответственно. При этом в положении седловой точки атом лития находится в максимуме энергетического барьера между двумя локальными минимумами – центрами тетраэдрических пор кремния. В данной работе, ввиду большого количества атомов в системе, частоты колебаний были рассчитаны для атома лития и его ближайшего окружения, включающего первую координационную сферу начального и конечного положения (9 атомов). Данное приближение было нами успешно использовано ранее [33].

Рассчитанное значение коэффициента диффузии лития в кристаллическом кремнии $D = 3 \cdot 10^{-3} \exp(-0,605 \times [\text{eV}] / kT)$ неплохо согласуется с полученным экспериментально $D = 2,5 \cdot 10^{-3} \exp(-0,655 [\text{eV}] / kT)$ в работах [34; 35].

Далее было исследовано влияние атомов примесей (Al, B, C, Ge, P) на высоты потенциальных барьеров при движении атома лития около близкорасположенного атома примеси. На рис. 1 представлены энергетические профили реакции перехода атома лития между тетраэдрическими пустотами вблизи этих примесей. При этом атом примеси располагается поперечно и принадлежит одному из тетраэдров, поэтому начальная и конечная энергия для перехода атома лития неэквивалентны. Из графика видно, что величина барьера прямого и обратного перехода лития различ-

на за счет разной энергии систем в начальном и конечном положениях.

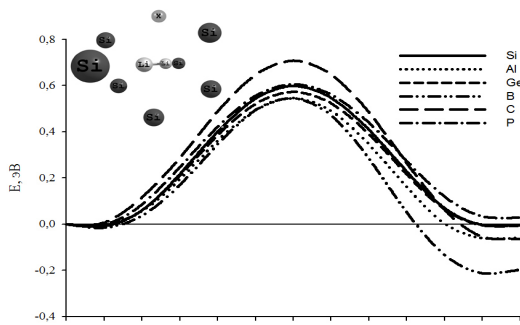


Рис. 1. Профиль потенциального рельефа для перехода атома лития между ближайшими минимумами в структуре $XSi_{63}Li$, $X = (Al, B, C, Ge, P, Si)$. Атом примеси находится перпендикулярно к направлению прыжка

Для кристаллической структуры кремния без примеси энергии перехода атома лития во всех направлениях: $\Delta E_{пр} = \Delta E_{обр} = 0,605$ эВ. Для дальнейшего рассмотрения в качестве примеси были выбраны атомы Al и Ge, так как для них величины барьера были минимальны: барьер для прямого перехода атома лития с примесью алюминия составил $\Delta E_{пр}(Al) = 0,546$ эВ, а обратный – $\Delta E_{обр}(Al) = 0,605$ эВ. В присутствии примеси германия барьеры равнялись $\Delta E_{пр}(Ge) = 0,573$ эВ и $\Delta E_{обр}(Ge) = 0,580$ эВ. Наличие атомов фосфора не приводило к снижению энергии барьера перехода, а в случае В и С барьеры значительно увеличивались (на 0,14–0,17 эВ).

Далее было исследовано влияние на величину барьера для перехода лития двух близкорасположенных атомов примесей. Два атома примеси располагались в поперечном положении к атому лития напротив друг друга. В данном случае начальное и конечное состояния системы были эквивалентны по энергии, поэтому профиль потенциального рельефа перехода атома Li был симметричным (рис. 2).

В работе также было исследовано влияние на величину барьера перехода близкорасположенных атомов примеси, которые находились вдоль направления перемещения атома лития (рис. 3).

При этом данный барьер также соединяет неэквивалентные положения в минимумах. Однако при

использовании в качестве примеси атома Ge начальное и конечное состояния отличаются на 0,02 эВ. Такое незначительное изменение можно объяснить тем, что Ge, как и Si, имеют схожую электронную конфигурацию и одинаковую алмазоподобную решетку. Только параметр решетки германия ($a = 5,66 \text{ \AA}$) больше, чем параметр для кремния ($a = 5,43 \text{ \AA}$). Только примесь в виде атома Al в данном положении значительно увеличивает энергетический барьер.

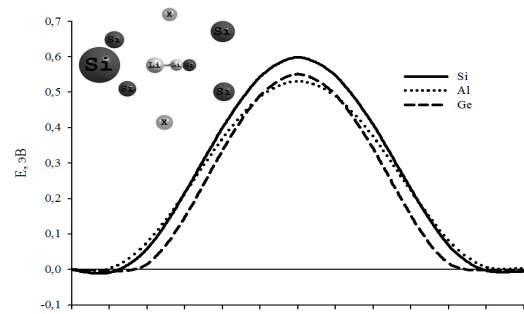


Рис. 2. Профиль потенциального рельефа для перехода атома лития между ближайшими минимумами в структуре $X_2Si_{62}Li$, $X = (Al, Ge, Si)$. Атомы примеси находятся перпендикулярно к направлению прыжка

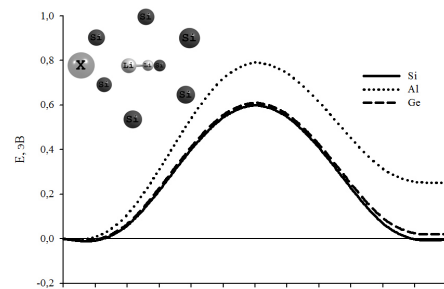


Рис. 3. Профиль потенциального рельефа для движения атома лития между ближайшими минимумами в структуре $XSi_{63}Li$, $X = (Al, Ge, Si)$. Атом примеси находится в продольном положении к направлению прыжка

В таблице представлены значения высот потенциальных барьеров перехода атома лития и коэффициенты диффузии в зависимости от типа и положения атомов примеси.

Высота потенциального барьера и коэффициент диффузии лития

Атом примеси	Положение атома примеси	Высота потенциального барьера, эВ	Коэффициент диффузии при $T = 300 \text{ K}$, cm^2/c
Al	Поперечное	0,605	$1,4 \cdot 10^{-13}$
	Продольное	0,790	$1,5 \cdot 10^{-16}$
	Поперечное (2 атома)	0,532	$2,6 \cdot 10^{-12}$
Ge	Поперечное	0,580	$4,1 \cdot 10^{-13}$
	Продольное	0,610	$1,3 \cdot 10^{-13}$
	Поперечное (2 атома)	0,553	$1,5 \cdot 10^{-12}$
B	Поперечное	0,743	$7,7 \cdot 10^{-16}$
C	Поперечное	0,772	$3,6 \cdot 10^{-16}$
P	Поперечное	0,606	$1,5 \cdot 10^{-13}$
Чистый Si	–	0,605	$1,7 \cdot 10^{-13}$

Выполненные квантово-химические расчеты показывают, что коэффициенты диффузии лития в кристаллическом кремнии могут изменяться под влиянием близкорасположенных атомов примесей. Для ускорения диффузии лития могут применяться добавки в виде алюминия и германия. Внесение этих атомов в кремний ускоряет диффузию лития в ~ 4 раза при $T = 300$ К. При этом показано, что увеличение концентрации примесей, т. е. возможность существования двух атомов примеси в окрестности атома лития, существенно увеличивает этот эффект.

Авторы выражают благодарность Институту компьютерного моделирования СО РАН (г. Красноярск), Межведомственному суперкомпьютерному центру РАН (Москва), а также компьютерному центру Сибирского федерального университета (г. Красноярск) за предоставление возможности использования вычислительных кластеров, на которых и были произведены все расчеты.

Библиографические ссылки

1. Kasavajjula U., Wang C. S., Appleby A. J. Nano- and bulk-silicon-based insertion anodes for lithium-ion secondary cells // *J. Power Sources*. Vol. 163. 2007. P. 1003.
2. Yang J., Winter M., Besenhard J. O. Small particle size multiphase Li-alloy anodes for lithium-ion batteries // *Solid State Ionics*. Vol. 90. 1996. P. 281.
3. Huggins R. A. Lithium alloy negative electrodes formed from convertible oxides // *Solid State Ionics*. Vol. 113–115. 1998. P. 57.
4. Winter M., Besenhard J. O. Electrochemical lithiation of tin and tin-based intermetallics and composites // *Electrochim. Acta*. Vol. 45. 1999. P. 31.
5. Huggins R. A. Lithium alloy negative electrodes // *J. Power Sources*. Vol. 81–82. 1999. P. 13.
6. Lithium Batteries Science and Technology : ed. by G.-A. Nazri and G. Pistoia / Kluwer Academic. N. Y., 2004. P. 113.
7. Crystalline-Amorphous Core-Shell Silicon Nanowires for High Capacity and High Current Battery Electrodes / Cui Li-Feng, R. Ruffo, C. K. Chan et al. // *NanoLetters*. Vol. 9 (1). 2009. P. 491.
8. High-performance lithium battery anodes using silicon nanowires / C. K. Chan, H. Peng, Liu Gao et al. // *Nature nanotechnology*. Vol. 3. 2008. P. 31.
9. The crystal structural evolution of nano-Si anode caused by lithium insertion and extraction at room temperature / H. Li, X. Huang, L. Chen et al. // *Solid State Ionics*. Vol. 135. 2000. P. 181.
10. Maranchi J. P., Hepp A. F., Kumta P. N. High Capacity, Reversible Silicon Thin-Film Anodes for Lithium-Ion Batteries // *Electrochem. Solid-State Lett.* Vol. 6. 2003. P. A198.
11. Obrovac M. N., Christensen L. Structural Changes in Silicon Anodes during Lithium Insertion/Extraction // *Electrochem. Solid-State Lett.* Vol. 7. 2004. P. A93.
12. Electrochemically-driven solid-state amorphization in lithium-metal anodes / P. Limthongkul, Y. I. Jang, N. J. Dudney et al. // *J. Power Sources*. Vol. 119–121. 2003. P. 604.
13. Electrochemically-driven solid-state amorphization in lithium-silicon alloys and implications for lithium storage / P. Limthongkul, Y. I. Jang, N. J. Dudney et al. // *Acta Mater.* Vol. 51. 2003. P. 1103.
14. Wen C. J., Huggins R. A. Chemical diffusion in intermediate phases in the lithium-silicon system // *J. Solid State Chem.* Vol. 37. 1981. P. 271.
15. Marel C. V. D., Vinke G. J. B., Lugt W. V. D. The phase diagram of the system lithium-silicon // *Solid State Commun.* Vol. 54. 1985. P. 917.
16. Nesper R., Schnering H. G. $\text{Li}_2\text{1Si}_5$, a Zintl phase as well as a Hume-Rothery phase // *J. Solid State Chem.* Vol. 70. 1987. P. 48.
17. Structure and properties of $\text{Li}_{14}\text{Si}_6/\text{Li}_{2.33}/\text{Si}$, the violet phase in the lithium-silicon system / H.-G. V. Schnering, R. Nesper, J. Curda, K.-F. Tebbe // *Z. Metallkunde*. Vol. 71. 1980. P. 357.
18. $\text{Li}_{12}\text{Si}_7$, a Compound Having a Trigonal Planar Si_4 Cluster and Planar Si_5 Rings / H. G. Schnering, R. Nesper, J. Curda et al. // *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* Vol. 19. 1980. P. 1033.
19. Evers J., Oehlinger G., SEXTL G. High-Pressure Synthesis of LiSi: Three-Dimensional Network of Three-Bonded Si-Ions // *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* Vol. 32. 1993. P. 1442–1444.
20. Lithium monosilicide (LiSi), a low-dimensional silicon-based material prepared by high pressure synthesis: NMR and vibrational spectroscopy and electrical properties characterization / L. A. Stearns, J. Gryko, J. Diefenbacher et al. // *J. Solid State Chem.* Vol. 173. 2003. P. 251.
21. Crystal and electronic structure of $\text{Li}_{15}\text{Si}_4$ / Y. Kubota, M. Escano, H. Nakanishi, H. Kasai // *J. Appl. Phys.* Vol. 102. 2007.
22. Атабаев Н. Г., Матчанов Н. А., Бахранов Э. Н. Низкотемпературная диффузия лития в твердые растворы кремний-германий // *ФТТ*. 2001. Т. 43. С. 2040–2041.
23. Kohn W., Sham L. J. Self-Consistent Equations Including Exchange and Correlation Effects // *Phys. Rev.* Vol. 140. 1965. P. 1133.
24. Perdew J. P., Burke K., Ernzerhof M. Generalized Gradient Approximation Made Simple // *Phys. Rev. Lett.* Vol. 77. 1996. P. 3865–3868.
25. Kresse G., Hafner J. Ab initio molecular dynamics for liquid metals // *Phys. Rev. B*. Vol. 47. № 1. 1993. P. 558–561.
26. Kresse G., Hafner J. Ab initio molecular-dynamics simulation of the liquid-metal-amorphous-semiconductor transition in germanium // *Phys. Rev. B*. Vol. 49. № 20. 1994. P. 14251–4269.
27. Kresse G., Furthmüller J. Efficiency of ab-initio total energy calculations for metals and semiconductors using a plane-wave basis set // *Computer Material Science*. № 6. 1996. P. 15.
28. Kresse G., Furthmüller J. Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set // *Phys. Rev. B*. Vol. 54. 1996.
29. Vanderbilt D. Soft self-consistent pseudopotentials in generalized eigenvalue formalism // *Phys. Rev. B*. Vol. 41. 1990. P. 7892.

30. Monkhorst H. J., Pack J. D. Special points for Brillouin-zone integrations // Phys. Rev. B. Vol. 13. 1976. P. 5188–5192.

31. Henkelman G., Jonsson H. Improved tangent estimate in the nudged elastic band method for finding minimum energy paths and saddle points // J. Chem. Phys. Vol. 113. 2000. P. 9978–9985.

32. Vineyard G. V. Frequency factors and isotope effects in solid state rate processes // J. Phys. Chem. Solids. Vol. 3. 1957. P. 121–127.

33. Fedorov A. S., Sorokin P. B., Kuzubov A. A. Ab initio study of hydrogen chemical adsorption on platinum surface/carbon nanotube join system // Phys. Stat. Sol. B. Vol. 245. 2008. P. 1546–1551.

34. Pell E. M. Diffusion of Li in Si at High T and the Isotope Effect // Phys. Rev. Vol. 119. № 3. 1960. P. 1014–1021.

35. Pell E. M. Diffusion Rate of Li in Si at Low Temperature // Phys. Rev. Vol. 119. № 4. 1960. P. 1222–1225.

Z. I. Popov, A. S. Fedorov, A. A. Kuzubov, T. A. Kojevnikova

INFLUENCE OF IMPURITIES ON RATE OF DIFFUSION OF LITHIUM IN CRYSTAL SILICON

Influence of impurity atoms (Al, B, C, Ge, P) on rate of diffusion of lithium in crystal silicon is investigated by DFT calculations. For that potential barrier values for lithium atom passage between potential minimum nearby impurity atom have been calculated. It is shown the presence of Al or Ge atoms near lithium atom decreases the potential barrier value at 0,02–0,07 eV, but the presence of C or B atoms increases the barrier value at 0,14–0,17 eV. And the presence of P atoms does not influence on the potential barrier value. The calculated lithium diffusion rates show that injection of Al or Ge atoms into silicon increase the lithium diffusion rate at ~4 times at 300 K.

Keywords: lithium-ion accumulators, silicon, ab initio calculations, diffusion.

© Попов З. И., Федоров А. С., Кузубов А. А., Кожевникова Т. А., 2011

УДК 538.915

М. В. Сержантова, А. А. Кузубов, А. С. Федоров, Ф. Н. Томили, П. О. Краснов

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ДЕФОРМАЦИИ НА ЭЛЕКТРОННУЮ СТРУКТУРУ МОНОСЛОЯ ГЕКСАГОНАЛЬНОГО НИТРИДА БОРА

Работа посвящена исследованию влияния деформации на электронную структуру и свойства монослоя гексагонального нитрида бора, а также изучению поведения атомов бора и азота на поверхности монослоя.

Ключевые слова: монослой гексагонального нитрида бора (h-BN), теория функционала плотности (DFT), электронная структура, вакансии, атомы.

Существуют различные модификации нитрида бора: ромбоэдрический нитрид бора (g-BN), вюрцитный нитрид бора (ω-BN), гексагональный нитрид бора (h-BN), кубический нитрид бора (c-BN), турбостратный нитрид бора (t-BN). Кроме того, нитрид бора может существовать в виде нанотрубок и фуллеренов.

Гексагональный нитрид бора (h-BN) является наиболее стабильной формой нитрида бора и представляет собой слоистую структуру, подобную графиту [1; 2]. В спрессованном состоянии h-BN обладает полупроводниковыми свойствами, а присутствие примесей в соединении может вызывать люминесценцию. В связи с этим гексагональный нитрид бора интересен областью применения как в цветной металлургии, благодаря своей химической инертности и антиадгезионным свойствам по отношению к металлам и сплавам, так и в полупроводниковой промышленности, благодаря широкой запрещенной зоне.

Подобно углероду, соединение h-BN существует в виде отдельных плоскостей и получило название «белый графен». Авторами статьи [3] с помощью химического осаждения из газовой фазы были синтезированы пленки h-BN (от 2 до 5 атомных слоев), и смоделировано поведение плоского модуля упругости E^{2D} монослоя h-BN с концентрацией вакансий 1–10%. Li Song и установлено [3], что значение E^{2D} уменьшается линейно с увеличением концентрации вакансий со значения 292,1 Н/м (для бездефектного монослоя h-BN) до 115,4 Н/м (10% вакансий). Однако в настоящее время невозможно провести оценку реальной концентрации вакансий из-за того, что отсутствует информация об их стабильности. Кроме того, монослой h-BN при выращивании располагается на подложке из другого материала, что может приводить к деформации решетки монослоя. Также на концентрацию вакансий существенно влияет возможность их