

Физика молекул

Научная статья

УДК 536.12

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.16308>

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВЗАМОДЕЙСТВИЙ МАКРОМОЛЕКУЛЫ С КВАЗИСВОБОДНЫМ И ЭПИТАКСИАЛЬНЫМ ГРАФЕНОМ, СФОРМИРОВАННОМ НА ПОЛИТИПАХ КАРБИДА КРЕМНИЯ

А. А. Лебедев ✉, С. Ю. Давыдов

Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия

✉ shura.lebe@mail.ioffe.ru

Аннотация. С целью теоретического анализа взаимодействия оборванных молекулярных орбиталей органической макромолекулы с однослойным квазисвободным и эпитаксиальным графеном предложена двухуровневая модель органической макромолекулы, изначально содержащая полностью заполненный (НОМО) и вакантный (ЛОМО) уровни. В рамках стандартного адсорбционного подхода рассмотрено взаимодействие этих уровней с электронными состояниями квазисвободного и эпитаксиального графена. В качестве подложки рассмотрены политипы карбида кремния. Оценки показали, что максимальный переход электронов с оборванных связей на эпитаксиальный графен имеет место для подложки 3C-SiC.

Ключевые слова: двухуровневая модель макромолекулы, однослойный графен, полупроводниковая подложка

Финансирование. Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 22-12-00134 (С.Ю.Д)) и Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (проект 075-15-2021-1349).

Для цитирования: Лебедев А. А., Давыдов С. Ю. Теоретическое исследование взаимодействия макромолекулы с квазисвободным и эпитаксиальным графеном, сформированном на политипах карбида кремния // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2023. Т. 16. № 3. С. 87–94. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.16308>

Статья открытого доступа, распространяемая по лицензии CC BY-NC 4.0 (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>)

Original article

DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.16308>

A THEORETICAL STUDY OF MACROMOLECULE INTERACTION WITH THE QUASI-FREE-STANDING AND EPITAXIAL GRAPHENE FORMED ON THE SILICON CARBIDE POLITYPES

A. A. Lebedev ✉, S. Yu. Davydov

Ioffe Institute of RAS, St. Petersburg, Russia

✉ shura.lebe@mail.ioffe.ru

Abstract. A two-level model of an organic macromolecule has been put forward in order to analyze theoretically the interaction of dangling molecular orbitals of the organic macromole-

cule with quasi-free-standing and epitaxial graphene. The model initially contains a completely filled (HOMO) and empty (LUMO) levels. Within the framework of the standard adsorption approach, the interaction of these levels with quasi-free and epitaxial graphene was considered. Silicon carbide polytypes were considered as substrates. Our estimates showed that the maximum transition of electrons from dangling bonds to epitaxial graphene took place for the 3C-SiC substrate.

Keywords: two-level macromolecule model, single-layer graphene, semiconductor substrate

Funding. The research was funded by Russian Science Foundation (Grant No. 22-12-00134) and the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (Project No. 075-15-2021-1349).

For citation: Lebedev A. A., Davydov S. Yu., A theoretical study of macromolecule interaction with the quasi-free-standing and epitaxial graphene formed on the silicon carbide polytypes, St. Petersburg State Polytechnical University Journal. Physics and Mathematics. 16 (3) (2023) 87–94. DOI: <https://doi.org/10.18721/JPM.16308>

This is an open access article under the CC BY-NC 4.0 license (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>)

Введение

Уникальная способность графена детектировать адсорбцию одиночной молекулы (выявлена в работе [1]) сделала его одним из самых привлекательных материалов для резистивных газовых сенсоров [2 – 5], а в последнее время – и для биосенсоров [6 – 10]. Характерные объекты исследования в последнем случае – макромолекулы (ММ) – представляют собой системы (бляшки, *англ.* plaques) с большим количеством атомов и линейными размерами порядка сотен ангстрем. При этом ни геометрия такой бляшки, ни площадь ее контакта с подложкой не только неизвестны, но и не являются строго фиксированными. Ясно, что прямое применение методов DFT (Density Functional Theory) в данном случае затруднительно. Поэтому в работе [11] для описания связи (адгезии) ММ с однолистным графеном (*англ.* Single-Layer Graphene, SLG) была предложена модель оборванных связей (*англ.* Dangling Bonds Model, DBM), которые как раз и считались ответственными за шивку (stitching) ММ с SLG. В рамках DBM, благодаря упрощенной схеме рассмотрения задачи, удалось получить аналитические выражения для перехода заряда с макромолекулы на графен и энергии адгезии макромолекулы на графене.

Введем терминологию, которая используется для молекул. В основном состоянии молекулы ее электроны заполняют все орбитали с наименьшими энергиями. Орбиталь, которая среди заполненных в основном состоянии имеет наибольшую энергию, обычно обозначается аббревиатурой ВЗМО (высшая занятая молекулярная орбиталь), или, чаще, английской аббревиатурой НОМО (Highest Occupied Molecular Orbital). Следующая по энергии орбиталь называется НВМО (низшая вакантная молекулярная орбиталь), или LUMO (Lowest Unoccupied Molecular Orbital – низшая незаполненная молекулярная орбиталь).

В настоящей работе для описания связи макромолекулы с однолистным графеном предлагается двухуровневая модель макромолекулы, нижний уровень которой НОМО, а вакантный верхний уровень – LUMO [12 – 15]. Такую модель далее будем называть НЛМ (НОМО-LUMO Model).

Описание предлагаемой модели

Рассмотрим в рамках НЛМ адсорбцию макромолекулы на SLG. Обозначим энергии НОМО и LUMO свободной макромолекулы соответственно как ε_-^0 и ε_+^0 . Числа заполнения НОМО и LUMO при нулевой температуре (0 K) по определению равны $n_-^0 = 2$ и $n_+^0 = 0$. Для макромолекулы, адсорбированной на SLG с работой выхода φ_{SLG} , энергии НОМО и LUMO положим равными

$$\varepsilon_{\mp} = \varepsilon_{\mp}^0 + \varphi_{\text{SLG}}.$$

Энергетический зазор между LUMO и HOMO есть $\Delta_{LH} = \varepsilon_+ - \varepsilon_-$. В соответствии с описанием в статье [11], на взаимодействующих с графеном орбиталях HOMO и LUMO плотности состояний (DOSs) на одну проекцию спина выражаются как

$$\rho_{\mp}(\omega) = \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma_{\mp}(\omega)}{(\omega - \varepsilon_{\mp} - \Lambda_{\mp}(\omega))^2 + \Gamma_{\mp}^2(\omega)}, \quad (1)$$

где ω – энергетическая переменная; $\Gamma_{\mp}(\omega)$, $\Lambda_{\mp}(\omega)$ – функции уширения и сдвига соответственно;

$$\Gamma_{\mp}(\omega) = \pi V_{\mp}^2 \rho_{SLG}(\omega),$$

а функция сдвига $\Lambda_{\mp}(\omega)$ является гильберт-трансформатой $\Gamma_{\mp}(\omega)$ (V_{\mp} – матричный элемент связи HOMO и LUMO с электронным спектром SLG, $\rho_{SLG}(\omega)$ – DOS свободного однослойного графена).

В низкоэнергетическом приближении DOS свободного графена выражается как

$$\rho_{SLG}(\omega) = \begin{cases} |\omega|/\zeta, & |\omega| < \zeta, \\ 0, & |\omega| \geq \zeta, \end{cases}$$

где ζ – энергия обрезания, $\zeta = \sqrt{\pi\sqrt{3}/4t}$ (t – энергия перехода электрона между ближайшими соседями в графене, $t \approx 3$ эВ).

Тогда функции уширения и сдвига произвольного уровня, взаимодействующего с графеном, имеют вид

$$\Gamma(\omega) = \pi V^2 \rho_{SLG}(\omega), \quad \Lambda(\omega) = (V^2 \omega / \zeta^2) \ln[\omega^2 / (\zeta^2 - \omega^2)].$$

Как и в статье [11], представим DOSs (1) в виде

$$\rho_{\pm}(\omega) \approx \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma_{\mp}}{(\omega - \bar{\varepsilon}_{\mp})^2 + \Gamma_{\mp}^2}, \quad (2)$$

где $\bar{\varepsilon}_{\mp} = \varepsilon_{\mp} + \Lambda_{\mp}$, $\Lambda_{\mp} = \bar{\varepsilon}_{\mp} (V_{\mp} / \zeta)^2 \ln[\bar{\varepsilon}_{\mp}^2 / (\zeta^2 - \bar{\varepsilon}_{\mp}^2)]$, $\Gamma_{\mp} = \pi V_{\mp}^2 \rho_{SLG}(\bar{\varepsilon}_{\mp})$.

Уравнение $\omega - \varepsilon_{\mp} - \Lambda(\omega) = 0$ определяет значения $\bar{\varepsilon}_{\mp}$. Если положить $V_- = V_+ = V$, то можно показать, что достаточным условием замены выражения (1) выражением (2) является выполнение неравенства $|\varepsilon_{\pm}| < \zeta / e$.

При нулевой температуре и уровне Ферми ε_F числа заполнения HOMO и LUMO определяются выражением

$$n_{\mp} = \frac{2}{\pi} \operatorname{arccot} \frac{\operatorname{sgn}(\bar{\varepsilon}_{\mp}) - \varepsilon_F / |\bar{\varepsilon}_{\mp}|}{\pi \{V_{\mp} / \zeta\}^2}. \quad (3)$$

При $\varepsilon \equiv \bar{\varepsilon}_+ = -\bar{\varepsilon}_-$ имеем

$$Z_{\mp} = \pm [1 - (2/\pi) \arctan(\zeta^2 / \pi V^2)].$$

Суммарный заряд, переходящий с макромолекулы на SLG, равен $Z_{SLG} = -(Z_- + Z_+)$, т. е. переход заряда между ними отсутствует. При $\varphi_{SLG} > 0$ величина Z_- возрастает, а $|Z_+|$ убывает, в результате чего SLG обогащается электронами и обретает n -тип проводимости. При $\varphi_{SLG} < 0$ – картина обратная и SLG имеет p -тип проводимости. Ширина щели при $e\varepsilon / \zeta < 1$ выражается как

$$\bar{\Delta}_{LH} = \Delta_{LH} [1 + (V/\zeta)^2 \ln(\varepsilon/\zeta)] < \Delta_{LH} = 2\varepsilon.$$

В работе [11] в качестве источников оборванных связей рассматривались молекулярные фрагменты O_2 , NO , NH , CH_2 , NH_2 и CH_3 . Если для оценки значений ε_-^0 и ε_+^0 положить

$$\varepsilon_-^0 = \min\{I_{mol}\}, \quad \varepsilon_+^0 = \max\{A_{mol}\},$$

где I_{mol} , A_{mol} – энергия ионизации и сродство к электрону (для перечисленных молекул

значения этих энергий приведены в статье [16]), и учесть, что для свободного однослойного графена [11]

$$\varphi_{\text{SLG}} = 4,5 \text{ эВ и } V/\zeta \sim 1,$$

то для молекул NO и NH получим, что

$$\varepsilon_+ / |\varepsilon_-| \sim \bar{\varepsilon}_+ / |\bar{\varepsilon}_-| \sim 1,$$

так что использованное для оценок равенство $\varepsilon \equiv \varepsilon_+ = -\varepsilon_-$ по порядку величины справедливо. Для остальных молекул, рассмотренных в статье [11], $\varepsilon_+ / |\varepsilon_-| \approx 0,6$.

Адсорбция макромолекулы на эпиграфене

Для описания адсорбции макромолекулы на эпиграфене, воспользуемся тем же подходом, который применялся в предыдущем разделе, и используем режим слабой связи графена с подложкой, когда $\Gamma_{\mp}(\omega)/t \ll 1$, т. е. рассмотрим квазисвободный графен (quasi-free-standing graphene). Такой режим реализуется технологически и гарантирует, что уникальные свойства свободного графена в значительной степени сохраняются.

Тогда, прибегая к тем же упрощениям, что и в предыдущем разделе, получим числа заполнения LUMO и HOMO вида

$$\tilde{n}_{\mp} \approx \frac{2}{\pi} \operatorname{arccot} \frac{\tilde{\varepsilon}_{\mp} - \varepsilon_F}{\tilde{\Gamma}_{\mp}}, \quad (4)$$

где $\tilde{\varepsilon}_{\mp} = \bar{\varepsilon}_{\mp} + \Lambda'_{\mp}(\tilde{\varepsilon}_{\mp})$, $\tilde{\Gamma}_{\mp} = \pi V_{\mp}^2 \rho_{\text{SLG}}(\tilde{\varepsilon}_{\mp})$.

В случае полупроводниковой подложки, DOS с шириной запрещенной зоны E_g можно представить в виде

$$\rho_{sc}(\omega) = \begin{cases} \bar{\rho}_{sc}, & |\Omega_{sc}| \geq E_g/2, \\ 0, & |\Omega_{sc}| < E_g/2, \end{cases}$$

где $\bar{\rho}_{sc} = \text{const}$, $\Omega_{sc} = \omega - \omega_{sc}$ (ω_{sc} – центр запрещенной зоны [17]).

Тогда

$$\bar{\Gamma}_{sc} = \pi V_{sc}^2 \bar{\rho}_{sc}, \quad \Lambda_{sc}(\omega) = (\bar{\Gamma}_{sc} / \pi) \ln \left[(\Omega_{sc} - E_g/2) / (\Omega_{sc} + E_g/2) \right],$$

где V_{sc} – матричный элемент взаимодействия полупроводника с SLG.

Числа заполнения LUMO и HOMO определяются уравнением (4). Случай $\varepsilon_F = \varepsilon_D = 0$ отвечает допированному политипу SiC и недопированному SLG, случай $\varepsilon_F = \omega_{sc}$ – недопированному политипу и допированному SLG.

В качестве примера рассмотрим адсорбцию макромолекулы на SLG, сформированном на политипах карбида кремния SiC. Энергетические параметры этих политипов и степень их гексагональности D взяты из работы [18] (табл. 1).

В случае недопированных политипов ($\varepsilon_F = \omega_{sc}$) значения \tilde{n}_{\mp} в ряду $3C \rightarrow 4H$ возрастают, а суммарный заряд $\tilde{Z} = 2 - \tilde{n}_- - \tilde{n}_+$ на макромолекуле убывает. При этом электроны переходят в SLG, который приобретает заряд $-\tilde{Z}$. Таким образом, наибольший заряд получает SLG, сформированный на $3C$ -SiC. Следует добавить, что на переход заряда между макромолекулой и структурой SLG/политип SiC влияет выбор грани политипа.

Например, для структуры SLG/6H-SiC работы выхода электрона для Si-и C-граней различаются примерно на 1,5 эВ [19]. Более строгий подход к описанию адсорбции атомов и молекул на эпитаксиальном графене представлен в работе [17]. Однако в ситуации, когда экспериментальная информация крайне ограничена, сделанные упрощения представляются вполне приемлемыми для оценок перехода заряда. Например, по данным расчетов из первых принципов [20], энергии HOMO лежат в интервале от -12 до -4 эВ (относительно вакуума). Сравнение данных в табл. 1 и 2 показывает, что значения энергий ионизации I , использованные нами для оценок в этой работе и в статье [11], близки к нижним значениям энергий HOMO. К сожалению, энергии LUMO в работе [20] не приводятся.



Таблица 1

Значения ключевых параметров структуры макромолекула/SLG/политип SiC

Политип	D	E_g	χ	$\omega_{sc} - \varepsilon_D$
		эВ		
3C	0	2,40	4,00	-0,70
8H	0,25	2,86	3,58	-0,51
21R	0,29	2,96	3,52	-0,50
6H	0,33	3,00	3,45	-0,45
15R	0,40	3,06	3,33	-0,37
27R	0,44	3,13	3,27	-0,34
4H	0,50	3,23	3,17	-0,29

Обозначения: E_g – ширина запрещенной зоны, χ – электронное сродство, ω_{sc} – энергия центра запрещенной зоны, ε_D – энергия точки Дирака; D – степень гексагональности политипов, которые обозначены буквенными символами, характеризующими сингонию решетки Браве (C – кубическая, H – гексагональная, R – ромбоэдрическая).

Таблица 2

Энергии ионизации молекул [16]

Молекула	O ₂	NO	CH ₂	NH ₂	CH ₃
I , эВ	12,1	9,3	10,4	10,2	11,4

Заключение

Сравнение модели HLM, предлагаемой в настоящем исследовании, с моделью DBM, использованной в работе [11], демонстрирует значительное сокращение используемых в теории параметров. Следует, однако, подчеркнуть, что даже в случае HLM для более точного определения значений параметров теории требуются экспериментальные данные. Обычные надежды авторов модельных теорий на появление численных расчетов из первых принципов, позволяющих судить о применимости модели, в данном случае, по-видимому, тщетны, так как зачастую детальная информация о геометрии адсорбированной макромолекулы отсутствует.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Schedin F., Geim A. K., Morozov S. V., Hill E. W., Blake P., Katsnelson M. I., Novoselov K. S. Detection of individual gas molecules adsorbed on graphene // Nature Materials. 2007. Vol. 6. 29 July. Pp. 652–655.
2. Buckley D. J., Black N. C. G., Castanon E. G., Melios C., Hardman M., Kazakova O. Frontiers of graphene and 2D material-based gas sensors for environmental monitoring // 2D Materials. 2020. Vol. 7. No. 3. P. 032002.
3. Demon S. Z. N., Kamisan A. I., Abdullah N., Noor S. A. M., Khim O. K., Kasim N. A. M., Yahya M. Z. A., Manaf N. A. A., Azmi A. F. M., Halim N. A. Graphene-based materials in gas sensor applications: A review // Sensors and Materials. 2020. Vol. 32. No. 2. Pp. 759–777.
4. Yaqoob U., Younis M. I. Chemical gas sensors: Recent developments, challenges, and the potential of machine learning – A review // Sensors. 2021. Vol. 21. No. 8. P. 2877.
5. Dhall S., Mehta B. R., Tyagi A. K., Sood K. A review on environmental gas sensors: Materials and technologies // Sensors International. 2021. Vol. 2. P. 100116.

6. **Lebedev A. A., Davydov S. Yu., Eliseyev I. A., Roenkov A. D., Avdeev O., Lebedev S. P., Makarov Y., Puzyk M., Klotchenko S., Usikov A. S.** Graphene on SiC substrate as biosensor: Theoretical background, preparation, and characterization // *Materials*. 2021. Vol. 14. No. 3. P. 590.
7. **Naresh V., Lee N.** A review on biosensors and recent development of nanostructured materials-enabled biosensors // *Sensors*. 2021. Vol. 21. No. 4. P. 1109.
8. **Shahriari S., Sastry M., Panjekar S., Raman S. R. K.** Graphene and graphene oxide as a support for biomolecules in the development of biosensors // *Nanotechnology, Science and Applications*. 2021. Vol. 14. 16 November. Pp. 197–220.
9. **Laxmi, Mahapatra B., Krishna R. V., Patel P. K.** A review of recent advancements in graphene based field-effect transistor biosensors // *AIP Conference Proceedings*. 2021. Vol. 2327. No. 1. P. 020011.
10. **Wang S., Qi X., Hao D., Moro R., Ma Y., Ma L.** Review – Recent advances in graphene-based field-effect-transistor biosensors: A review on biosensor designing strategy // *Journal of the Electrochemical Society*. 2022. Vol. 169. No. 2. P. 027509.
11. **Давыдов С. Ю.** К теории адгезии органических макромолекул на однослойном графене: модель оборванных связей // *Физика твердого тела*. 2022. Т. 64. № 12. С. 2050–2054.
12. **Cehovin A., Mera H., Jensen J. H., Stokbro K. Pedersen T. B.** Role of the virtual orbitals and HOMO-LUMO gap in mean-field approximations to the conductance of molecular junctions // *Physical Review B*. 2008. Vol. 77. No. 19. P. 195432.
13. **Huang Y., Rong C., Zhong R., Liu S.** Evaluating frontier orbital energy and HOMO/LUMO gap with descriptors from density functional reactivity theory // *Journal of Molecular Modeling*. 2017. Vol. 23. No. 1. P. 3.
14. **De Lile J. R., Kang S. G., Son Y.-A., Lee S. G.** Do HOMO–LUMO energy levels and band gaps provide sufficient understanding of dye-sensitizer trends for water purification? // *ACS Omega*. 2020. Vol. 5. No. 25. Pp. 15052–15062.
15. **Shimizu A., Ishizaki Y., Horiuchi S., Hirose T., Matsuda K., Sato H., Yoshida J.** HOMO–LUMO energy-gap tuning of π -conjugated zwitterions composed of electron-donating anion and electron-accepting cation // *The Journal of Organic Chemistry*. 2021. Vol. 86. No. 1. p. 770–781.
16. **Физические величины. Справочник /Под ред. И. С. Григорьева и Е. З. Мейлихова/ М.: Энергоатомиздат, 1991. 1232 с.**
17. **Давыдов С. Ю.** Об особенностях плотности состояний эпитаксиального графена, сформированного на металлической и полупроводниковой подложках // *Физика и техника полупроводников*. 2013. Т. 47. № 1. С. 97–106.
18. **Ирхин В. Ю., Ирхин Ю. П.** Электронная структура, корреляционные эффекты и физические свойства *d*- и *f*-переходных металлов и их соединений. Екатеринбург: УрО РАН, 2004. 472 с.
19. **Давыдов С. Ю.** Об оценках электронного сродства политипов карбида кремния и разрывов зон в гетеропереходах на их основе // *Физика и техника полупроводников*. 2019. Т. 53. № 5. С. 706–709.
20. **Stuke A., Kunkel C., Golze D., Todorović M., Margra J. T., Reuter K., Rinke P., Oberhofer H.** Atomic structures and orbital energies of 61,489 crystal-forming organic molecules // *Scientific Data*. 2020. Vol. 7. 18 February. P. 58.

REFERENCES

1. **Schedin F., Geim A. K., Morozov S. V., et al.,** Detection of individual gas molecules adsorbed on graphene, *Nat. Mater.* 6 (29 July) (2007) 652–655.
2. **Buckley D. J., Black N. C. G., Castanon E. G., et al.,** Frontiers of graphene and 2D material-based gas sensors for environmental monitoring, *2D Mater.* 7 (3) (2020) 032002.
3. **Demon S. Z. N., Kamisan A. I., Abdullah N., et al.,** Graphene-based materials in gas sensor applications: A review, *Sens. Mater.* 32 (2) (2020) 759–777.
4. **Yaqoob U., Younis M. I.,** Chemical gas sensors: Recent developments, challenges, and the potential of machine learning – A review, *Sensors*. 21 (8) (2021) 2877.
5. **Dhall S., Mehta B. R., Tyagi A. K., Sood K.,** A review on environmental gas sensors: Materials and technologies, *Sens. Int.* 2 (2021) 100116.



6. **Lebedev A. A., Davydov S. Yu., Eliseyev I. A., et al.**, Graphene on SiC substrate as biosensor: Theoretical background, preparation, and characterization, *Mater.* 14 (3) (2021) 590.
7. **Naresh V., Lee N.**, A review on biosensors and recent development of nanostructured materials-enabled biosensors, *Sensors.* 21 (4) (2021) 1109.
8. **Shahriari S., Sastry M., Panjkar S., Raman S. R. K.**, Graphene and graphene oxide as a support for biomolecules in the development of biosensors, *Nanotechnol. Sci. Appl.* 14 (16 November) (2021) 197–220.
9. **Laxmi, Mahapatra B., Krishna R. V., Patel P. K.**, A review of recent advancements in graphene based field-effect transistor biosensors // *AIP Conf. Proc. Proceedings.* 2327 (1) (2021) 020011.
10. **Wang S., Qi X., Hao D., et al.**, Review – Recent advances in graphene-based field-effect-transistor biosensors: A review on biosensor designing strategy, *J. Electrochem. Soc.* 169 (2) (2022) 027509.
11. **Davydov S. Yu.**, To the theory of organic macromolecules adhesion on the single-layer graphene: Dangling bonds model, *Phys. Solid State.* 64 (12) (2022) 2018–2020.
12. **Cehovin A., Mera H., Jensen J. H., et al.**, Role of the virtual orbitals and HOMO-LUMO gap in mean-field approximations to the conductance of molecular junctions, *Phys. Rev. B.* 77 (19) (2008) 195432.
13. **Huang Y., Rong C., Zhong R., Liu S.**, Evaluating frontier orbital energy and HOMO/LUMO gap with descriptors from density functional reactivity theory, *J. Mol. Model.* 23 (1) (2017) 3.
14. **De Lile J. R., Kang S. G., Son Y.-A., Lee S. G.**, Do HOMO–LUMO energy levels and band gaps provide sufficient understanding of dye-sensitizer trends for water purification? *ACS Omega.* 5 (25) (2020) 15052–15062.
15. **Shimizu A., Ishizaki Y., Horiuchi S., et al.**, HOMO–LUMO energy-gap tuning of π conjugated zwitterions composed of electron-donating anion and electron-accepting cation, *J. Org. Chem.* 86 (1) (2021) 770–781.
16. **Davydov S. Yu.**, On the specific features of the density of states of epitaxial graphene formed on metal and semiconductor substrates, *Semiconductors.* 47 (1) (2013) 95–104.
17. **Davydov S. Yu., Troshin S. V.**, Adsorption on metals and semiconductors: Anderson-Newns and Haldane-Anderson models, *Phys. Solid State.* 49 (8) (2007) 1583–1588.
18. **Irkhin, V. Yu., Irkhin Yu. P.**, *Electronic structure, correlation effects and physical properties of d - and f -transition metals and their compounds*, Cambridge International Science Publishing, Cambridge (UK), 2007.
19. **Davydov S. Yu.**, On estimates of the electron affinity of silicon carbide polytypes and the band offsets in heterojunctions based on these polytypes, *Semiconductors.* 53 (5) (2019) 699–702.
20. **Stuke A., Kunkel C., Golze D., et al.**, Atomic structures and orbital energies of 61,489 crystal-forming organic molecules, *Sci. Data.* 7 (18 February) (2020) 58.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ЛЕБЕДЕВ Александр Александрович – *руководитель отделения твердотельной электроники Физико-технического института имени А. Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия.*
194021, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26
shura.lebe@mail.ioffe.ru

ДАВЫДОВ Сергей Юрьевич – *доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник лаборатории физики полупроводниковых приборов Физико-технического института имени А. Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Россия.*
194021, Россия, г. Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26
Sergei_Davydov@mail.ru

THE AUTHORS

LEBEDEV Alexander A.
Ioffe Institute of RAS
26 Polytekhnicheskaya St., St. Petersburg, 194021, Russia
shura.lebe@mail.ioffe.ru

DAVYDOV Sergey Yu.

Ioffe Institute of RAS

26 Polytekhnicheskaya St., St. Petersburg, 194021, Russia

Sergei_Davydov@mail.ru

*Статья поступила в редакцию 11.05.2023. Одобрена после рецензирования 27.06.2023.
Принята 27.06.2023.*

Received 11.05.2023. Approved after reviewing 27.06.2023. Accepted 27.06.2023.