

Первопринципные исследования адсорбции Li и Na на поверхности монослоя MgCl_2

С. В. Устюжанина⁺, А. А. Кистанов¹ ⁺¹⁾

⁺ Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, 450001 Уфа, Россия

^{*} Лаборатория Металлы и сплавы при экстремальных воздействиях,
Уфимский университет науки и технологий, 450076 Уфа, Россия

Поступила в редакцию 14 августа 2023 г.

После переработки 4 октября 2023 г.

Принята к публикации 5 октября 2023 г.

С использованием первопринципных расчетов исследована динамическая устойчивость нового монослоя дихлорида магния (MgCl_2) и образование в нем точечных дефектов. Изучена возможность использования монослоя MgCl_2 в литий(Li)- и натрий(Na)-ионных батареях. Показано, что монослой MgCl_2 обладает динамической стабильностью, но может содержать точечные дефекты. Эти точечные дефекты могут улучшить адсорбционную способность монослоя MgCl_2 по отношению к атомам Li и Na. Результаты, показанные в этой работе, делают монослой MgCl_2 перспективным материалом для применения в Li- и Na-ионных батареях.

DOI: 10.31857/S1234567823210097, EDN: ptdeba

Введение. Недавно была предсказана и исследована новая группа двумерных (2Д) материалов, двумерных дихлоридов переходных металлов [1]. Кроме того, повышенное внимание уделяется другим 2Д хлоридам металлов, таким как 2Д MgCl_2 , в связи с их исключительными оптоэлектронными и магнитными свойствами [2, 3]. К примеру, в работе [4] было показано, что монослой обладает шириной запрещенной зоны, равной 6.08 эВ.

В настоящее время также растет спрос на Li- и Na-ионные аккумуляторы для различных применений, в том числе для электромобилей, возобновляемых источников энергии и систем хранения энергии [5, 6]. В последнее время интерес исследователей направлен на новый класс хлоридов лития из-за их очень высокой окислительной стабильности [7]. Различные хлориды переходных металлов, такие как NiCl_2 и KNiCl_3 , были протестированы в качестве материалов катода в Li- и Na-ионных батареях и показали многообещающие результаты благодаря их сравнительно высокой емкости и напряжению [8, 9]. Кроме того, мезопористый углерод, наполненный CuCl_2 , был предложен в качестве катодного материала для литий-ионных аккумуляторов с высокой емкостью из-за его обратимой реакции переноса двух электронов, обеспечивающей очень высокую обратимую емкость [10].

Однако, насколько известно, нет исследований по возможному применению монослоя MgCl_2 в качестве материала для применения в Li- и Na-ионных батареях. Кроме того, недостаточно изучено влияние образования типичных точечных дефектов в монослое MgCl_2 на его адсорбционную способность по отношению к атомам Li и Na. Поэтому в данной работе влияние типичных точечных дефектов и возможность применения монослоя MgCl_2 в Li- и Na-ионных батареях исследуется с помощью теории функционала плотности с использованием первопринципных расчетов.

Вычислительные методы. Структура монослоя MgCl_2 была спроектирована на основе геометрии примитивной элементарной ячейки монослоя MgCl_2 , имеющейся в базе данных 2DMatPedia (ID 2dm-3734) [11], и найденных ранее 2Д дихлоридов переходных металлов [1], а также экспериментальных данных [12] по монослою MgCl_2 . Расчеты проводились методом плоских волн, реализованным в пакете Vienna Ab initio Simulation Package [13]. Расчеты по оптимизации геометрии были выполнены с использованием обменно-корреляционного функционала Пердью–Берка–Эрнзергофа (PBE) в приближении обобщенного градиента (GGA) [14]. Оптимизация была остановлена, как только все компоненты всех атомных сил стали меньше 10^{-4} эВ/Å, а изменение полной энергии было меньше 10^{-8} эВ. Первая зона Бриллюэна была отобрана с сеткой k -точек

¹⁾ e-mail andrei.kistanov.ufa@gmail.com

$10 \times 10 \times 1$ для элементарной ячейки и сеткой k -точек $3 \times 3 \times 1$ для суперячейки. Энергия обрезки потенциала была выбрана равной 520 эВ. Периодические граничные условия применялись вдоль поперечных направлений в плоскости, а вакуумное пространство $20 \text{ \AA}$ вводилось в направлении, перпендикулярном плоскости поверхности. Для построения фононного спектра, расчеты, основанные на теории возмущений функционала плотности (DFPT), с помощью программного пакета Phonopy [15], были выполнены для суперячейки монослоя MgCl_2 размером $3 \times 3 \times 1$ с использованием сетки k -точек $2 \times 2 \times 1$. Поправка DFT-D3 [16] использовалась для учета Ван-дер-Ваальсовых взаимодействий между атомами Li и Na и поверхностью монослоя MgCl_2 . Для исследования моно вакансионных (МВ) дефектов и энергии адсорбции рассматривалась супер ячейка MgCl_2 размером $4 \times 4 \times 1$ элементарных ячеек.

Энергия образования E_{form} МВ дефектов в монослое MgCl_2 рассчитывалась следующим образом:

$$E_{\text{form}} = E_{\text{perfect}} - E_{\text{defect}} - N_{\text{Mg}}E_{\text{Mg}} - N_{\text{Cl}}E_{\text{Cl}}, \quad (1)$$

где E_{perfect} и E_{defect} – полные энергии чистого и содержащего МВ монослоя MgCl_2 , E_{Mg} и E_{Cl} – энергии атомов Mg и Cl, соответственно, рассчитанные из объемных фаз материалов.

Энергия адсорбции атомов Li и Na на поверхности монослоя MgCl_2 рассчитывалась следующим образом:

$$E_a = E_{\text{MgCl}_2/\text{mol}} - E_{\text{MgCl}_2} - E_{\text{atom}}, \quad (2)$$

где $E_{\text{MgCl}_2/\text{mol}}$ – полная энергия монослоя MgCl_2 , адсорбированного Li(Na), E_{MgCl_2} и E_{atom} – полные энергии исходного монослоя MgCl_2 и свободного атома Li(Na), соответственно.

Заселенность кристаллических орбиталей Гамильтона (Crystal Orbital Hamilton Populations – COHP) [17] рассчитывалась с помощью программы LOBSTER [18].

Результаты и обсуждения. На рисунке 1а показана структура элементарной ячейки монослоя MgCl_2 . Он принадлежит к тригональной пространственной группе симметрии $164 R\bar{3}m1$ и состоит из одного атома Mg и двух атомов Cl. Оптимизированные структурные параметры монослоя MgCl_2 собраны в табл. 1. Полученные данные по расчету параметров решетки монослоя MgCl_2 $a = b = 3.64 \text{ \AA}$ аналогичны ранее представленным результатам [19] и соотносятся с экспериментальными данными [20]. Для подтверждения динамической стабильности монослоя MgCl_2 рассчитан его фононный спектр, который показан на рис. 1b. Видно, что все фононные

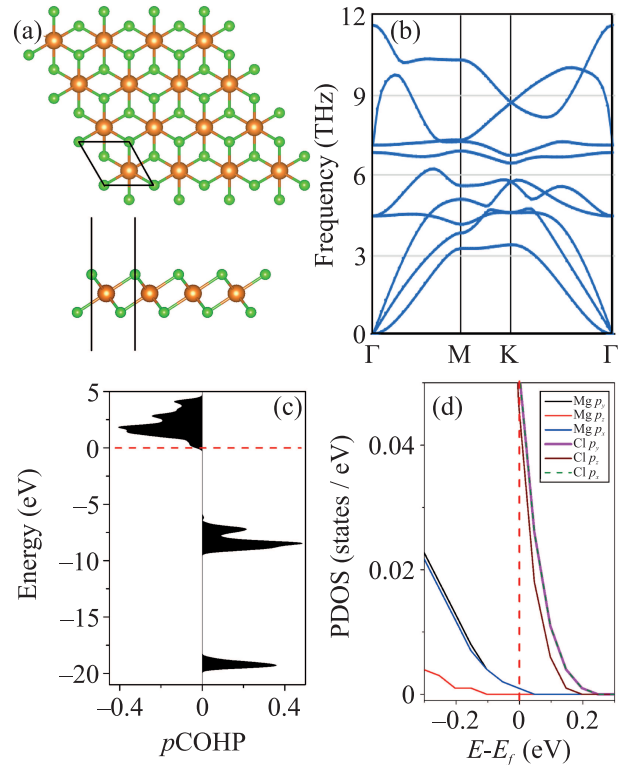


Рис. 1. (Цветной онлайн) Структура элементарной ячейки (а), фононный спектр (b), $p\text{COHP}$ (c) и PDOS (d), где уровень Ферми показан красной пунктирной линией, для монослоя MgCl_2

дисперсионные кривые монослоя MgCl_2 положительны во всей зоне Бриллюэна, что свидетельствует о динамической устойчивости монослоя MgCl_2 . Стоит отметить, что ранее, в работе [21], уже был рассчитан фононный спектр монослоя MgCl_2 , наши результаты показывают высокую сходимость с ранее представленными.

Таблица 1. Структурные параметры монослоя MgCl_2

$a, \text{ \AA}$	$b, \text{ \AA}$	α	β	γ
3.64	3.64	90	90	120

В 2D материалах обычно присутствуют различные точечные дефекты, которые самопроизвольно образуются в процессе их изготовления и эксплуатации [22–24]. Поэтому здесь рассматривается устойчивость и образование точечных дефектов в монослое MgCl_2 , в частности, МВ дефектов. В данной работе рассматриваются следующие дефекты: МВ атома Cl (MB_{Cl}) и МВ атома Mg (MB_{Mg}). Термическая устойчивость этих МВ-дефектов в монослое MgCl_2 оценивается по энергии их образования E_{form} . Установлено, что дефект MB_{Cl} имеет низкую $E_{\text{form}} = 5.86 \text{ эВ}$,

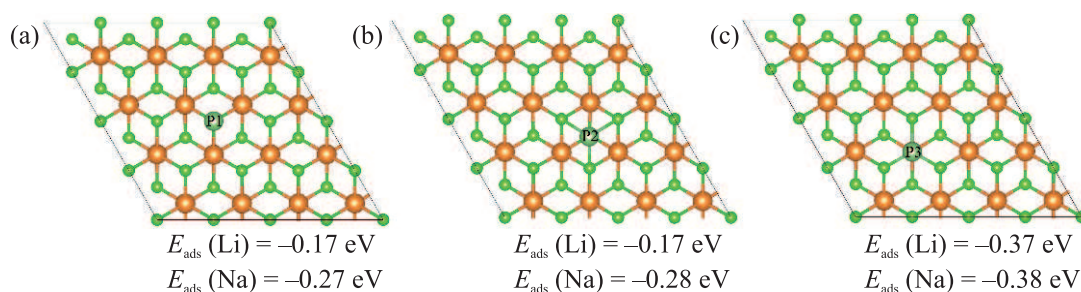


Рис. 2. (Цветной онлайн) Три наиболее энергетически выгодные конфигурации атомов Li и Na на поверхности монослоя MgCl_2 , положение атомов Li и Na показано, как P1, P2 и P3

в то время как дефект MB_{Mg} имеет гораздо более высокую $E_{\text{form}} = 7.90 \text{ эВ}$, что сравнимо с E_{form} MB в графене (7.50 эВ) [25] и MB дефектами в хлоридах металлов (до 7.37 эВ) [1]. Кроме того, прочность связи в материале можно приблизительно оценить при помощи СОНР анализа [26, 27]. Зная площадь под кривой $p\text{СОНР}$, можно дать оценку энергии связи в материале. $p\text{СОНР}$ и для монослоя MgCl_2 представлен на рис. 1с. Из рисунке 1с также видно, что состояния в интервале энергий от -0.2 эВ до 4.7 эВ являются разрыхляющими и не дают вклад в химическую связь Mg с Cl. Согласно рис. 1d, где представлена диаграмма парционной плотности состояний (PDOS) монослоя MgCl_2 , данными разрыхляющими орбиталями являются $2p$ -орбитали Cl и $2p_x$ - и $2p_y$ -орбитали Mg. Полученное значение площади под кривой $p\text{СОНР}$ ($-I p\text{СОНР}$), иными словами энергия связи Cl-Mg, составляет $\sim 0.84 \text{ эВ}$. Таким образом, для удаления одного атома хлора с образованием MB_{Cl} , требующее разрыва трех связей с ближайшими атомами Mg, потребуется $\sim 2.52 \text{ эВ}$, что существенно ниже энергии формирования MB_{Cl} , полученной согласно формулы (1). Стоит отметить, что данные по расчетам E_{form} MB и СОНР анализа дают результаты, отличающиеся более чем в 2 раза. Необходимо подчеркнуть тот факт, что химический потенциал атомов Mg и Cl в объемной фазе отличается от такового в их соединении [28], что может приводить к меньшей точности в оценке результатов, полученных для энергии формирования MB_{Cl} . Тем не менее, оба метода подтверждают низкую энергию формирования моновакансий в монослое MgCl_2 , относительно других 2Д материалов, таких как графен.

Были рассмотрены различные атомные конфигурации атомов Li и Na на поверхности монослоя MgCl_2 . В частности, рассмотрены позиции атомов Li и Na – над атомом Cl первого слоя, над атомом Mg второго слоя, над атомом Cl третьего слоя, над центром связи Cl-Mg и над центром шестичленного кольца. На рисунке 2 представлены три наиболее энергетически выгодные конфигурации (P1-P3)

атомов Li и Na на поверхности монослоя MgCl_2 из всех рассмотренных в данной работе. Из рисунка 2 следует, что E_a Li и Na на поверхности монослоя MgCl_2 для конфигурации P3 (рис. 2с) значительно ниже таковой для случаев P1 (рис. 2а) и P2 (рис. 2б), на $\sim 0.1 \text{ эВ}$ в случае Li и на $\sim 0.2 \text{ эВ}$ в случае Na. Кроме того, обнаружено, что полная энергия систем Li- MgCl_2 и Na- MgCl_2 , представленных на рис. 2с (конфигурация P3), ниже таковой для систем Li- MgCl_2 и Na- MgCl_2 , представленных на рис. 2а, б. Далее, в работе рассматривался только случай для наиболее энергетически выгодной конфигурации Li и Na на поверхности монослоя MgCl_2 , т.е. конфигурация P3 (рис. 2с). Далее, на рис. 3а показана данная энергетически выгодная конфигурация атома Li, адсорбированного на поверхности монослоя MgCl_2 . Атом Li расположен над атомом Mg на расстоянии $0.15 \text{ \AA}$ от поверхности. Видно, что адсорбированный атом Li смещает атом Mg из положения равновесия. Расчетная энергия адсорбции E_a одного атома Li на поверхности монослоя MgCl_2 оказалась равной -0.37 эВ (см. табл. 2). Учитывая обнаруженную сравнительно низкую энергию образования MB дефектов в монослое MgCl_2 и наблюдаемое смещение атома Mg, активированное адсорбцией Li, важно учитывать взаимодействие Li с поверхностью монослоя MgCl_2 , содержащей MB дефект. На рисунке 3б показана конфигурация атома Li, адсорбированного на монослое MgCl_2 , содержащем MB_{Cl} , при расположении Li на дефекте MB_{Cl} . В этом случае атом Li находится в шестигульнике на расстоянии $0.97 \text{ \AA}$, при этом значение E_a составляет -1.94 эВ (см. табл. 2). На рисунке 3с показана адсорбция атома Li на монослое MgCl_2 , содержащем MB_{Mg} дефект. После оптимизации геометрии структуры атом Li занимает свободное место на MB_{Mg} . В этом случае значение E_a составляет -6.67 эВ (см. табл. 2), что свидетельствует об экзотермическом и самопроизвольном процессе адсорбции атома Li на монослое MgCl_2 , содержащем

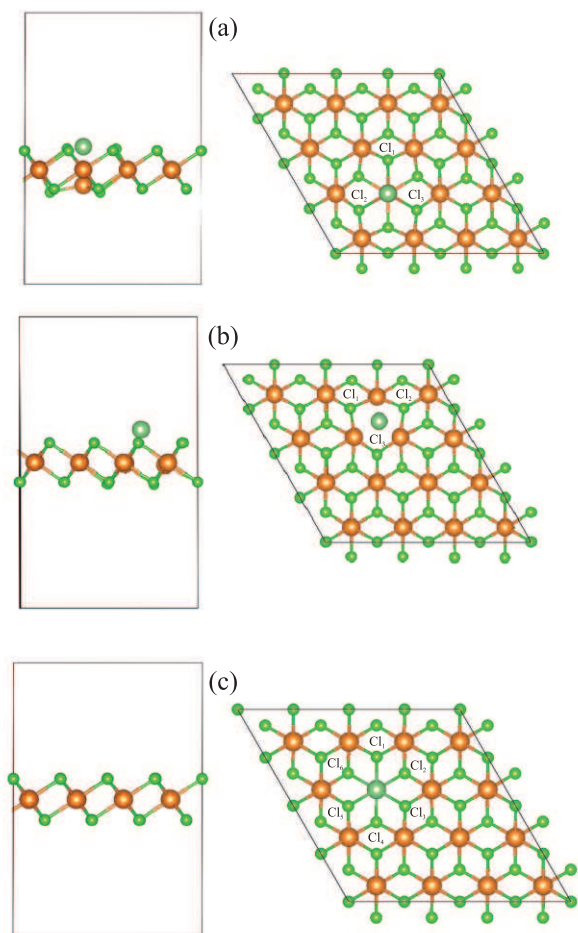


Рис. 3. (Цветной онлайн) Чистый (а), содержащий MB_{Cl} (b) и содержащий MB_{Mg} (c) монослой $MgCl_2$ с адсорбированным атомом Li

MB_{Mg} . Как известно, тепловое самовозгорание материалов может ускоряться биохимическим или адсорбционным самонагревом [29], ввиду чего существует опасность самовозгорания устройств, таких как Li- и Na-ионные батареи. Таким образом, Li- и Na-ионные батареи на основе монослоя $MgCl_2$, ввиду больших отрицательных энергий абсорбции атомов Li и Na на его поверхности, могут быть подвержены данному эффекту.

Таблица 2. Энергия адсорбции Li и Na на монослой $MgCl_2$

	Li	Na
Монослой $MgCl_2$	–0.37 эВ	–0.38 эВ
Монослой $MgCl_2$ с MB_{Cl}	–1.94 эВ	–1.59 эВ
Монослой $MgCl_2$ с MB_{Mg}	–6.67 эВ	–5.68 эВ

На рисунке 4а показана наиболее энергетически выгодная конфигурация атома Na на поверхности монослоя $MgCl_2$. Атом Na расположен над атомом

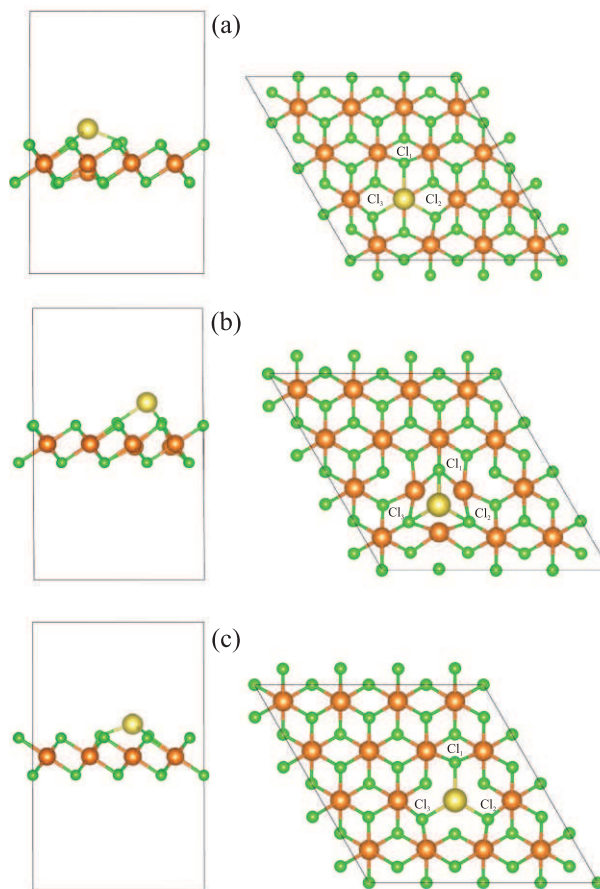


Рис. 4. (Цветной онлайн) Чистый (а), содержащий MB_{Cl} (b) и содержащий MB_{Mg} (c) монослой $MgCl_2$ с адсорбированным атомом Na

Mg на расстоянии 1.15 Å от поверхности. Видно, что адсорбированный атом Na смещает атом Mg из положения равновесия, как это было в случае с атомом Li. Расчетная энергия адсорбции E_a одного атома Na на поверхности монослоя $MgCl_2$ равна –0.38 эВ (см. табл. 2). На рисунке 4b показана конфигурация атома Na, адсорбированного на монослой $MgCl_2$, содержащем MB_{Cl} , когда атом Na находится на дефекте MB_{Cl} . В этом случае атом Na находится в шестиугольнике на расстоянии 1.42 Å от поверхности монослоя $MgCl_2$, при этом значение E_a равно –1.59 эВ (см. табл. 2). На рисунке 4c показана адсорбция атома Na на монослой $MgCl_2$, содержащем MB_{Mg} . После оптимизации геометрии структуры атом Na занимает свободное место на MB_{Mg} . В этом случае значение E_a составляет всего –5.68 эВ (см. табл. 2), что свидетельствует об экзотермическом и самопроизвольном процессе адсорбции атома Na на монослой $MgCl_2$, содержащем MB_{Mg} .

Стоит отметить, что E_a атома Na на монослой

Таблица 3. Величина переноса заряда Δq и донорно-акцепторные характеристики атомов Li и Na, а также соседних атомов Cl. Положительное/отрицательное Δq характеризует потерю/приобретение электронов. Нумерация атомов согласно рис. 3 и 4

	Δq [e] Li/Na	Δq [e] Cl ₁	Δq [e] Cl ₂	Δq [e] Cl ₃	Δq [e] Cl ₄	Δq [e] Cl ₅	Δq [e] Cl ₆
Li на MgCl ₂	1 (донор)	−0.032 (акцептор)	−0.034 (акцептор)	−0.034 (акцептор)			
Li MgCl ₂ с MB _{Cl}	1 (донор)	−0.063 (акцептор)	−0.064 (акцептор)	−0.067 (акцептор)			
Li MgCl ₂ с MB _{Mg}	1 (донор)	0.112 (донор)	0.111 (донор)	0.113 (донор)	0.112 (донор)	0.110 (донор)	0.11 (донор)
Na на MgCl ₂	0.867 (донор)	−0.005 (акцептор)	−0.005 (акцептор)	−0.007 (акцептор)			
Na MgCl ₂ с MB _{Cl}	0.907 (донор)	−0.038 (акцептор)	−0.036 (акцептор)	−0.036 (акцептор)			
Na MgCl ₂ с MB _{Mg}	0.890 (донор)	0.059 (донор)	0.060 (донор)	0.060 (донор)			

MgCl₂, содержащем MB_{Cl} и MB_{Mg} несколько выше таковой для атома Li. Для объяснения полученных результатов проведен анализ зарядового распределения на атомах кристаллической решетки при помощи анализа Бадера [30] с использованием кода Хенкельмана [31]. Представленные в табл. 3 результаты данного анализа показывают, что Li и Na являются сильными донорами во всех рассмотренных случаях, в то время как ближайшие к атомам Li и Na атомы Cl меняют свою роль с акцепторной (в случае адсорбции атомов Li и Na на монослой MgCl₂, содержащем MB_{Cl}) на донорную (в случае адсорбции атомов Li и Na на монослой MgCl₂, содержащем MB_{Mg}). Наибольшее различие в E_a Li и Na наблюдается для монослоя MgCl₂, содержащего MB_{Mg}. При этом значительный вклад в адсорбцию Li и Na вносят близлежащие к ним атомы Cl. Согласно табл. 3, атомы Cl являются достаточно слабыми донорами ($\Delta q \cong 0.060e$) в случае адсорбции атома Na, в то время как при адсорбции атома Li атомы Cl являются сильными донорами ($\Delta q \cong -0.112e$). При этом атом Li занимает вакантную позицию Mg и имеет 6 ближайших соседних атомов Cl, в то время как атом Na остается на поверхности монослоя MgCl₂ и имеет только 3 ближайших соседних атомов Cl. Таким образом, перенос заряда от атомов Li(Na) к поверхности монослоя MgCl₂ через ближайшие атомы Cl, а также роль этих атомов Cl в каждом конкретном случае имеют решающее значение при адсорбции атомов Li и Na на монослой MgCl₂.

Выводы. В заключение, в данной работе при помощи первопринципных расчетов были проведены исследования недавно обнаруженного монослоя MgCl₂ для его возможного применения в Li- и Na-ионных батареях. Во-первых, смоделированный фо-

нонный спектр монослоя MgCl₂ показал его структурную стабильность, что важно для его применения. Показано также, что монослой MgCl₂ может содержать MB дефекты из-за сравнительно низкой энергии образования в нем этих дефектов. Во-вторых, показано, что энергия адсорбции E_a атома Li и атома Na на поверхности монослоя MgCl₂ сравнительно велики, −0.37 эВ и −0.38 эВ, соответственно, а наличие MB-дефектов на поверхности монослоя MgCl₂ приводит к значительному уменьшению энергии адсорбции E_a до −6.67 эВ (для Li) и до −5.68 эВ (для Na). Следовательно, монослой MgCl₂ может быть универсальным кандидатом для применения в качестве анодного материала, применяемых в Li- и Na-ионных батареях.

Для А. А. Кистанова исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда # 23-73-01001, <https://rscf.ru/project/23-73-01001/>.

Исследования проводились на оборудовании коллективной исследовательской базы объединенного суперкомпьютерного центра Российской академии наук.

1. A. A. Kistanov, S. A. Shcherbinin, R. Botella, A. Davletshin, and W. Cao, J. Phys. Chem. Lett. **13**, 2165 (2022); <https://doi.org/10.1021/acs.jpcclett.2c00367>.
2. I. T. Lima, R. Vasconcelos, R. Gargano, and E. N. C. Paurad, New J. Chem. **44**, 8833 (2020); <https://doi.org/10.1039/D0NJ01264E>.
3. G. Bhattacharyya, I. Choudhuri, P. Bhauriyal, P. Garg, and B. Pathak, Nanoscale **10**, 22280 (2018); <https://doi.org/10.1039/C8NR07429A>.

4. F. Lu, W. Wang, X. Luo, X. Xie, Y. Cheng, H. Dong, H. Liu, and W.-H. Wang, *Appl. Phys. Lett.* **108**, 132104 (2016); <https://doi.org/10.1063/1.4945366>.
5. W. Mroziak, M.A. Rajaeifar, O. Heidrich, and P. Christensen, *Energy Environ. Sci.* **14**, 6099 (2021); <https://doi.org/10.1039/D1EE00691F>.
6. A. A. Kistanov, D.R. Kripalani, Y. Cai, S.V. Dmitriev, K. Zhou, and Y.-W. Zhang, *J. Mater. Chem. A* **7**, 2901 (2019); <https://doi.org/10.1039/C8TA11503F>.
7. I. Kochetkov, T.T. Zuo, R. Ruess, B. Singh, L. Zhou, K. Kaup, J. Janek, and L. Nazar, *Energy Environ. Sci.* **15**, 3933 (2022); <https://doi.org/10.1039/D2EE00803C>.
8. K. Giagloglou, J.L. Payne, Ch. Crouch, R.K.B. Gover, P.A. Connor, and J.T.S. Irvin, *J. Electrochem. Soc.* **165**, A3510 (2018); <https://doi.org/10.4191/kcers.2019.56.3.05>.
9. Y. Li, L. Shi, X. Gao, J. Wang, Y. Hu, X. Wu, and Z. Wen, *Chem. Eng. J.* **421**, 127853 (2021); <https://doi.org/10.1016/j.cej.2020.127853>.
10. T. Li, Z.X. Chen, Y.L. Cao, X.P. Ai, and H.X. Yang, *Electrochim. Acta* **68**, 202 (2012); <https://doi.org/10.1016/j.electacta.2012.02.061>.
11. J. Zhou, L. Shen, M.D. Costa, K.A. Persson, S.P. Ong, P. Huck, Y. Lu, X. Ma, Y. Chen, H. Tang, and Y.P. Feng, *Sci. Data* **6**, 86 (2019); <https://doi.org/10.1038/s41597-019-0097-3>.
12. D.H. Fairbrother, J.G. Roberts, and G.A. Somorjai, *Surf. Sci.* **399**(1), 109 (1998); [https://doi.org/10.1016/S0039-6028\(97\)00816-9](https://doi.org/10.1016/S0039-6028(97)00816-9).
13. G. Kresse, and J. Furthmüller, *Phys. Rev. B* **54**, 11169 (1996); <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.54.11169>.
14. J.P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 3865 (1996). <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.77.3865>.
15. A. Togo, L. Chaput, T. Tadano, and I. Tanaka, *J. Phys. Condens. Matter* **35**, 353001 (2023); <https://dx.doi.org/10.1088/1361-648X/acd831>.
16. S. Grimme, J. Antony, S. Ehrlich, and H. Krieg, *J. Chem. Phys.* **132**, 154104 (2010); <https://doi.org/10.1063/1.3382344>.
17. V.L. Deringer, A.L. Tchougreeff, and R. Dronskowski, *J. Phys. Chem. A* **115**(21), 5461 (2011); <https://doi.org/10.1021/jp202489>.
18. R. Nelson, C. Ertural, J. George, V.L. Deringer, G. Hautier, and R. Dronskowski, *J. Comput. Chem.* **41**(21), 1931 (2020); <https://doi.org/10.1002/jcc.26353>.
19. G. Bhattacharyya, I. Choudhuri, P. Bhauriyal, P. Garg and B. Pathak, *Nanoscale* **10**, 22280 (2018); <https://doi.org/10.1039/c8nr07429a>.
20. J. Zhu and U. Schwingenschlogl, *ACS Appl. Mater. Interfaces* **6**, 11675 (2014); <https://doi.org/10.1021/am502469m>.
21. H.R. Mahida, A. Patel, D. Singh, Y. Sonvane, P.B. Thakor, and R. Ahuja, *Superlattices Microstruct.* **162**, 107132 (2022); <https://doi.org/10.1016/j.spmi.2021.107132>.
22. H.-P. Komsa and A.V. Krasheninnikov, *Physics and theory of defects in 2D materials: the role of reduced dimensionality*, Amsterdam (2022), p.7; <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-820292-0.00008-2>.
23. S. Abdolhosseinzadeh, Ch. Zhang, R. Schneider, M. Shakoorioskooie, F. Nüesch, and J. Heier, *Adv. Mater.* **34**, 2103660 (2022); <https://doi.org/10.1002/adma.202103660>.
24. A. A. Kistanov, V.R. Nikitenko, and O.V. Prezhdo, *J. Phys. Chem. Lett.* **12**, 620 (2021); <https://doi.org/10.1021/acs.jpclett.0c03608>.
25. A.V. Krasheninnikov, P.O. Lehtinen, A.S. Foster, and R.M. Nieminen, *Chem. Phys. Lett.* **418**, 132 (2006); <https://doi.org/10.1016/j.cplett.2005.10.106>.
26. X. Yu, H. Shao, X. Wang, Y. Zhu, D. Fang, and J. Hong, *J. Mater. Chem. A* **8**, 3128 (2020); <https://doi.org/10.1039/C9TA12600G>.
27. Л.С. Чумакова, А.В. Бакулин, С.Е. Кулькова, *ЖЭТФ* **161**(6), 874 (2022); <https://doi.org/10.31857/S0044451022060116>.
28. А.В. Бакулин, С.Е. Кулькова, *ЖЭТФ* **6**(12), 1136 (2018); <https://doi.org/10.1134/S004445101812009X>.
29. А.С. Харламенков, *Пожаровзрывобезопасность/Fire and Explosion Safety*. **31**(3), 96 (2022).
30. R.F.W. Bader, *Atoms in Molecules. A Quantum Theory*, Clarendon Press, Oxford, UK (1990).
31. W. Tang, E. Sanville, and G. Henkelman, *J. Phys.: Condens. Matter*. **21**, 084204 (2009); <https://doi.org/10.1088/0953-8984/21/8/084204>.