

Lucian ION

Efecte legate de defecte în filme subțiri și
nanostructuri semiconductoare selectate

– Rezumatul tezei de abilitare –

4 martie 2026

Rezumat

Lucrarea de față prezintă câteva dintre rezultatele științifice obținute în urma activității desfășurate în ultimele două decenii. Sunt acele rezultate care vizează proprietățile defectelor din semiconductori și diverse efecte ale acestor defecte asupra proprietăților fizice ale materialelor.

Cunoașterea tipului de defecte prezente într-un semiconductor este de o importanță capitală pentru aplicații. Prezența defectelor în materialele semiconductoare de interes tehnologic cu creșterea temperaturii sau ca urmare a unor acțiuni externe (cum ar fi iradierea cu particule energetice) este inevitabilă. Unele dintre ele sunt introduse intenționat, pentru a controla transportul electronic sau proprietățile optice, prin utilizarea unor proceduri experimentale atent controlate (proces cunoscut sub numele de dopare). Acesta este procesul fundamental pentru fabricarea tuturor dispozitivelor electronice care stau la baza tehnologiei moderne. Altele determină alterarea proprietăților fizice urmărite.

Din aceste motive, au fost puse la punct tehnici experimentale și teoretice vizând caracterizarea proprietăților specifice diverselor tipuri de defecte. Ca exemple de tehnici experimentale, pot fi menționate aici efectul Hall la temperatură variabilă sau spectroscopia de curenți stimulați termic. De cealaltă parte, cea mai utilizată metodă teoretică pentru determinarea structurii electronice a defectelor constă în simulări numerice *ab-initio* bazate pe teoria funcționalei de densitate (DFT).

Primul subiect abordat vizează efectele cuplajului electron-fonon optic și al dimensionalității reduse asupra energiei de legătură a electronilor pe un donor superficial într-un fir cuantic semiconductor fabricat dintr-un material uniaxial. Legile de dispersie ale fononilor optici longitudinali, transversali și de suprafață cu lungimi de undă mari (în vecinătatea centrului primei zone Brillouin) au fost calculate în cadrul modelului continuumului dielectric, fiind determinat pe baza lor Hamiltonianul de interacție electron-fonon optic (Hamiltonia-

nul Fröhlich). A fost determinată, pentru mai multe poziții radiale fixe ale centrului donor, variația energiei de legătură a electronului în funcție de raza firului cuantic, incluzând efectele interacției electron-fonon optic (Fig. 0.1).

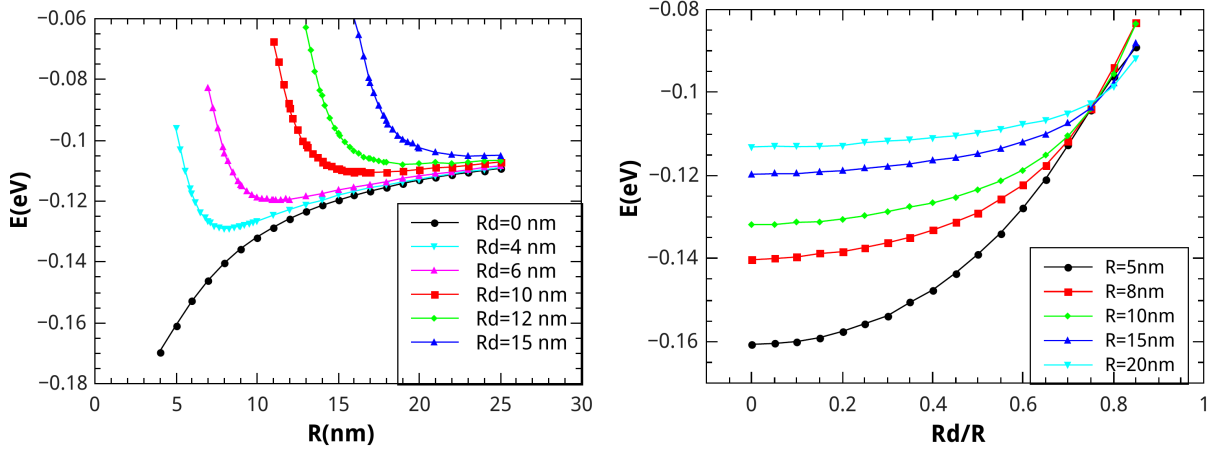


Figura 0.1: Variația energiei de legătură a electronului de centrul donor într-un fir cuantic de GaN-w, incluzând efectul interacției electron-fonon optic (polaronul legat), în funcție de raza firului, pentru mai multe poziții radiale fixate R_D ale centrului donor (stânga), respectiv în funcție de raportul $\frac{R_D}{R}$, pentru mai multe valori fixate ale razei firului R (dreapta).

Dacă centrul donor se află pe axa firului, energia de legătură crește monoton cu scăderea razei firului cuantic, în caz contrar variația fiind mai complicată. Variațiile energiei de legătură în funcție de raza firului, respectiv de poziția centrului donor, sunt consecința directă a efectelor de confinare cuantică și a prezenței unei suprafețe de separare a două medii cu constante dielectrice diferite. Rezultatul este important pentru înțelegerea eficienței dopării în astfel de structuri de dimensiuni reduse, care prezintă un mare interes pentru aplicațiile în domeniul senzorilor.

Efectele induse de defecte asupra proprietăților electrice și optice ale filmelor subțiri și nanostructurilor de tipul CdX (X=Se,S,Te) fac obiectul capitolului trei. Mai întâi sunt analizate filmele subțiri de CdSe, un set de experimente indicând faptul că proprietățile lor electrice sunt controlate de un centru donor adânc cu o energie de legătură de 0.37-0.40 eV (Fig. 0.2).

Rezultatul simulărilor *ab-initio* pentru determinarea structurii electronice a celor mai probabile defecte de acest tip sugerează un posibil candidat - vacanțele de Se. Energiile de formare ale centrilor $V_{Se}^{(q)}$, $q = 0, +1, +2$ și nivelele corespunzătoare tranzițiilor între diferitele stări de

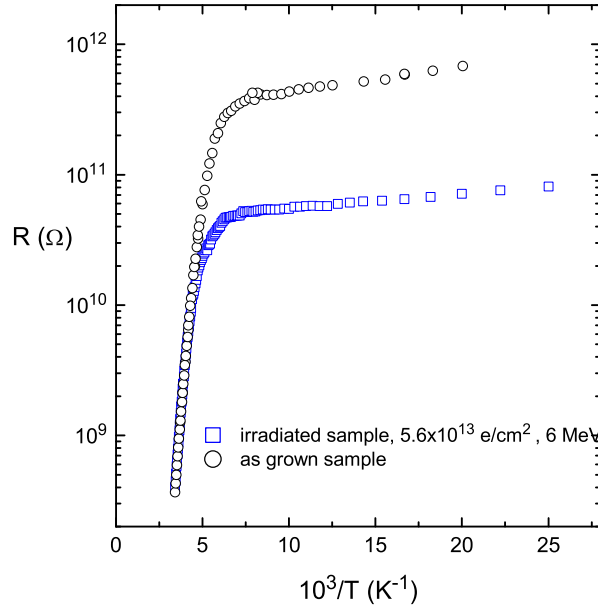


Figura 0.2: Dependența de temperatură a rezistenței electrice a unui film subțire de CdSe, înainte și după iradierea cu electroni (6 MeV, $5.6 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$).

sarcină, determinate prin simulări *ab-initio* în cadrul teoriei funcționale de densitate (DFT) sunt indicate în Tabelul 0.1.

Tabela 0.1: Energiile de formare ($\epsilon_F = \epsilon_v$) și nivelele de tranziție între diferite stări de sarcină asociate V_{Se} în CdSe.

$E_f(V_{\text{Se}}^{(0)})$ (eV)	$E_f(V_{\text{Se}}^{(+)}, \epsilon_F = 0)$ (eV)	$E_f(V_{\text{Se}}^{(++)}, \epsilon_F = 0)$ (eV)	$\epsilon(+1/0)$ (eV)	$\epsilon(+2/+1)$ (eV)	$\epsilon(+2/0)$ (eV)
2.43	1.02	-0.14	1.41	1.17	1.29

Un studiu separat a vizat filmele subțiri de CdTe, candidați ideali pentru straturile de absorbție a luminii în celulele fotovoltaice pe bază de filme subțiri. A fost analizat efectul defectelor introduse la interfața heterostructurilor de tip CdS/CdTe prin iradiere cu protoni și particule alfa energetice asupra spectrelor de acțiune ale eficienței cuantice externe (EQE) (Fig. 0.3).

În cazul iradierii cu protoni cu energia 500 keV, se poate observa o reducere a EQE în intervalul (1,48 eV, 2,5 eV), reducere care este mai importantă la energii ale fotonilor incidenți apropiate de banda interzisă a CdS, semnalând o acumulare de defecte la interfața CdS/CdTe și implicit o creștere a ratei de recombinare a purtătorilor de sarcină în exces. În cazul iradierii

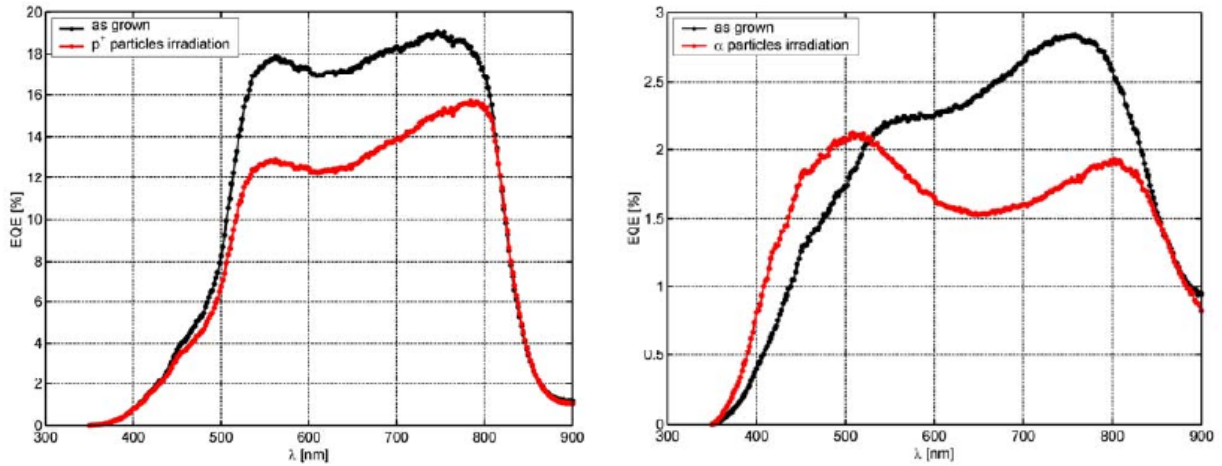


Figura 0.3: Spectrul EQE al heterostructurilor CdS/CdTe, iradiate cu protoni (stânga) și particule alfa (dreapta) (500 keV , $10^{11} \text{ particule/cm}^2$).

cu particule alfa, se poate observa cu ușurință o modificare semnificativă a structurii spectrelor EQE. Spre deosebire de cazul iradierii cu protoni, simulările Monte-Carlo au sugerat că particulele alfa de 500 keV creează densități mari de defecte (vacanțe și defecte interstițiale) în stratul de CdTe, ceea ce explică scăderea EQE în regiunea corespunzând fotonilor cu energii mai joase în spectrele măsurate.

Secțiunea finală este dedicată studiului proprietăților nanofirelor de CdTe crescute printr-o metodă electrochimică asistată de șablon. Prin controlul atent al condițiilor de creștere, s-au obținut nanofire cu un gradient compozițional, (Fig. 0.4) fiind caracterizat răspunsul lor fotoconductiv.

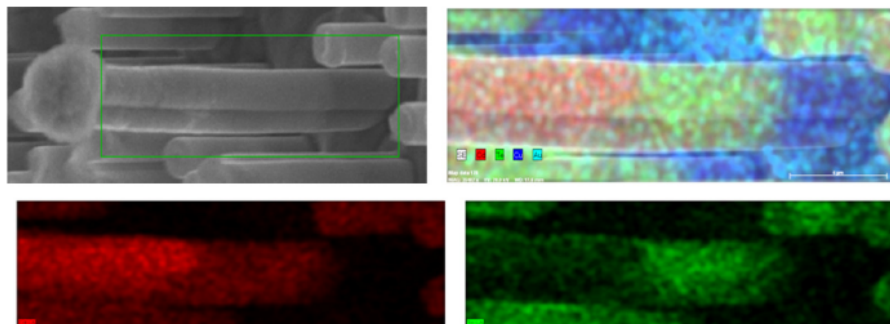


Figura 0.4: Imagini SEM și EDX ale unor nanofire segmentate Cd/CdTe/Cd.

Capitolul patru prezintă rezultatele legate de depunerea și caracterizarea nanofirelor de ZnO crescute electrochimic și a filmelor subțiri de ZnO depuse în diverse condiții prin pulverizare catodică în regim de radio-frecvență asistată de magnetron. Doparea cu aluminiu și controlul condițiilor de depunere permit o modificare cu două ordine de mărime a rezistivității electrice a filmelor. Conducția electrică la temperaturi peste 200 K a nanofirelor de ZnO crescute prin depunere electrochimică asistată de șablon (Fig. 0.5) este controlată de un donator adânc situat la 0.42 eV sub marginea benzii de conducție (Fig. 0.6).

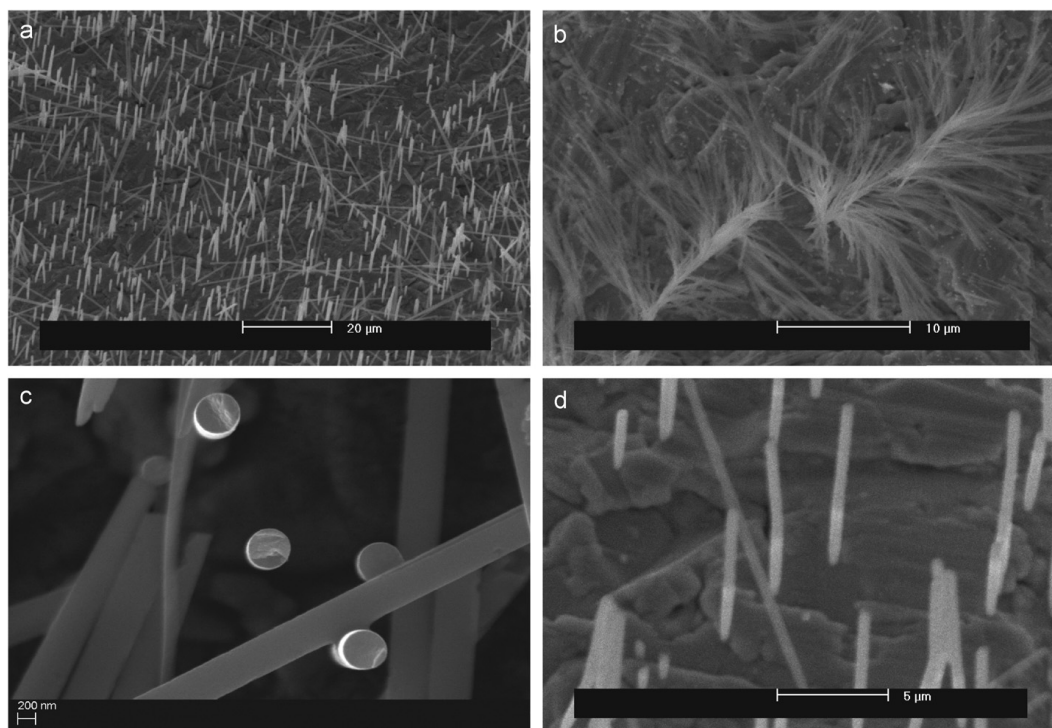


Figura 0.5: Imagini SEM ale unei matrici de nanofire de ZnO crescute electrochimic printr-o metodă asistată de șablon.

Transportul de sarcină este de tip activat, energia de activare de 0.42 eV la temperaturi peste 200 K este asociată vacanțelor de oxigen în starea dublu ionizată V_O^{++} [48]. S-a determinat că V_O este un centru U -negativ (este instabil termodinamic în starea V_O^+ ; doar stările de sarcină +2 sau neutre sunt stabile [25]).

Capitolul cinci se concentrează pe prezentarea rezultatelor privind proprietățile magnetice ale straturilor monoatomice de h-BN dopate cu Mn, investigate prin metode computaționale *ab-initio*. Un strat atomic de h-BN este un sistem care, deși structural similar cu grafena, este, spre deosebire de grafenă, un semiconductor cu bandă interzisă largă, prin urmare interesant

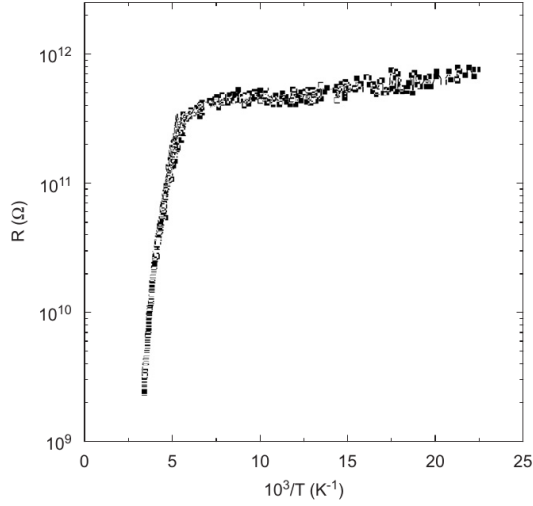


Figura 0.6: Dependența de temperatură a rezistenței electrice a firelor de ZnO crescute electrochimic printr-o metodă asistată de șablon.

pentru aplicații electronice. A fost studiată stabilitatea mai multor configurații de defecte care implică atomi de Mn și este propus un Hamiltonian de tip Ising generalizat

$$E_{\text{tot}}(\{S_i\}_{N_m}) = -J^{(0)} - \sum_i J_i^{(1)} S_i - \sum_{(i,j)} J_{ij}^{(2)} S_i S_j - \sum_{(i,j,k)} J_{ijk}^{(3)} S_i S_j S_k - \dots, \quad (0.1)$$

permițând identificarea condițiilor care trebuie îndeplinite pentru obținerea diferitelor tipuri de structuri magnetice.

Integralele de schimb J_{ij} și energiile de formare calculate sunt prezentate în Fig. 0.7, în funcție de distanța care separă perechea Mn-Mn. Localizarea impurităților de Mn este importantă, rezultatele obținute conducând la următoarele concluzii (Fig. 0.7a):

- substituțiile de tip $\text{Mn}_B - \text{Mn}_B$ conduc la parametri de cuplaj de tip feromagnetic;
- substituțiile de tip $\text{Mn}_N - \text{Mn}_N$ conduc la parametri mici de cuplaj, de tip antiferomagnetic;
- substituțiile de tip $\text{Mn}_B - \text{Mn}_N$ conduc la parametri de cuplaj al căror semn variază în funcție de distanța Mn-Mn.

Ultimul caz este specific sistemelor de tip sticlă de spin.

Calcululele *ab-initio* DFT coroborate cu un model generalizat de tip Ising pot indica condițiile care trebuie îndeplinite pentru obținerea unor sisteme semiconductoare magnetice diluate 2D, bazate pe straturi atomice de h-BN. Acest tip de structuri poate fi utilizat pentru producerea de dispozitive spintronice nanometrice.

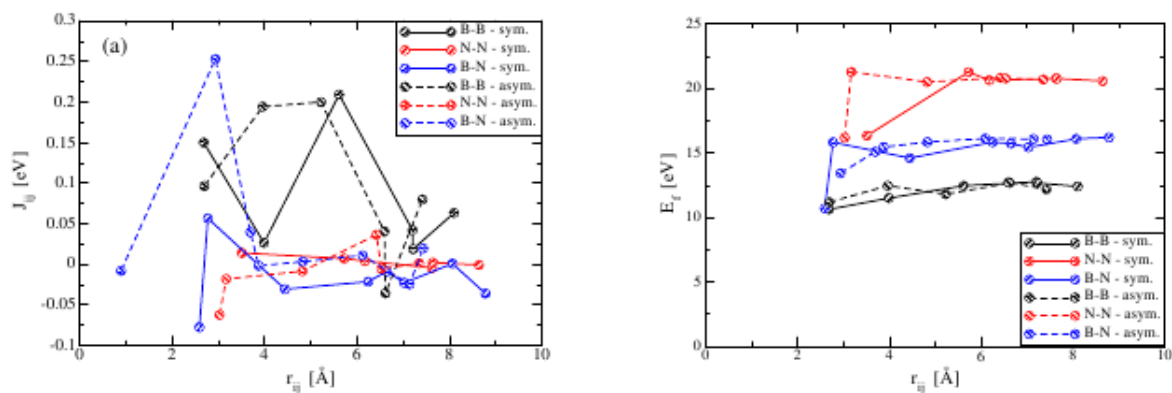


Figura 0.7: Integralele de schimb (a) și energiile de formare (b) în funcție de distanța care separă perechea Mn-Mn.

Capitolul final oferă o perspectivă asupra activității viitoare în domeniul meu de interes științific.

Bibliografie

1. Alkauskas A, Deak P, Neugebauer J, Pasquarello A, and Van de Walle CG (Eds.), *Advanced Calculations for Defects in Materials* (Wiley-VCH, Weinheim, Germany, 2011).
2. Antohe S, Ion L and Ruxandra V, J. Appl. Phys. **90**, 5928 (2001).
3. Antohe S, Ghenescu V, Iftimie S, Radu A, Toma O, Ion L, Dig. J. Nanomater. Biostruct **7**, 941 (2012).
4. Antohe S, Iftimie S, Ghenescu V, Constantineanu R, Gugiu MM, Ion M, Stan I, Radu A, Ion L, Rom. Rep. Phys. **64**, 1153 (2012).
5. Azuhata T, Sota T, Suzuki K and Nakamura S, J. Phys.: Condens. Matter **7**, L129 (1995).
6. Baines T, Zoppi G, Bowen L, Shalveya TP, Mariotti S, Durose K, Major JD, Sol. Energy Mater. Sol. Cells **180**, 196 (2018).
7. Besleaga C, Stan GE, Galca AC, Ion L, Antohe S, Appl. Surf. Sci. **258**, 8819 (2012).
8. Besleaga C, Ion L, Antohe S, Rom. Rep. Phys. **66**, 993 (2014).
9. Besleaga C, Abramiuc LE, Stancu V, Tomulescu AG, Sima M, Trinca L, Plugaru N, Pintilie L, Nemnes GA, Iliescu M, Svavarsson HG, Manolescu A, Pintilie I, J. Phys. Chem. Lett. **7**, 5168 (2016).
10. Bourgoin J and Lannoo M, *Point Defects in Semiconductors II*, Solid State Sciences Series Vol. 35 (Springer, Berlin, 1983), chapt. 8.
11. Brancus DEN and Ion L, Phys. Rev. **B 76**, 155304 (2007).
12. Brancus DEN and Ion L, J. Phys.: Condens. Matter **21**, 485301 (2009).
13. Bruneval F, Gatti M, Quasiparticle self-consistent GW method for the spectral properties of complex materials, in Di Valentin C, Botti S, Cococcioni M (Eds.), *First Principles Approaches to Spectroscopic Properties of Complex Materials - Topics in Current Chemistry* (Springer, Berlin, Germany, 2014) pp. 1-37.
14. Cui ST, Mol. Phys. **104**, 2993, (2006).
15. Dey S, Mohanty DL, Divya N, Bakshi V, Mohanty A, Rath D, Das S, Mondal A, Roy S, Sabui R, Intelligent Pharmacy, <https://doi.org/10.1016/j.ipha.2024.08.004>.
16. Dragoman M, Dinescu A, Dragoman D, Nanotechnology **28**, 015201 (2017).
17. Dragoman M, Dinescu A, Dragoman D, Physica E **97**, 296 (2018).
18. Enculescu I, Sima M, Enculescu M, Enache M, Ion L, Antohe S, and Neumann R, Phys. Status Solidi B **244**, 1607 (2007).
19. Freysoldt C, Grabowski B, Hickel T, Neugebauer J, Kresse G, Janotii A, Van de Walle CG, Rev. Mod. Phys. **86**, 253 (2014).
20. Fukamachi S, Solis-Fernandez P, Kawahara K, Tanaka D, Otake T, Lin Y-C, Suenaga K, and Ago H, Nature Electronics **6**, 126 (2023).
21. Geim AK, Novoselov KS, Nature Materials **6**, 183 (2007).

22. Giannozzi P, Baroni S, Bonini N, Calandra M, Car R, Cavazzoni C, Ceresoli D, Chiarotti GL, Cococcioni M, Dabo I, Dal Corso A, de 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 and Wentzcovitch RM, *J. Phys.: Condens. Matter* **21**, 395502 (2009).
23. Giannozzi P, Andreussi O, Brumme T, Bunau O, Buongiorno Nardelli M, Calandra M, Car R, Cavazzoni C, Ceresoli D, Cococcioni M, Colonna N, Carnimeo I, Dal Corso A, de Gironcoli S, Delugas P, DiStasio Jr RA, Ferretti A, Floris A, Fratesi G, Fugallo G, Gebauer R, Gerstmann U, Giustino F, Gorni T, Jia J, Kawamura M, Ko H-Y, Kokalj A, Küçükbenli E, Lazzeri M, Marsili M, Marzari N, Mauri F, Nguyen NL, Nguyen H-Y, Otero-de-la-Roza A, Paulatto L, Poncé S, Rocca D, Sabatini R, Santra B, Schlipf M, Seitsonen AP, Smogunov A, Timrov I, Thonhauser T, Umari P, Vast N, Wu X and Baroni S, *J. Phys.: Condens. Matter* **29**, 465901 (2017).
24. Giannozzi P, Bascaglio O, Bonfà P, Brunato D, Car r, Carnimeo I, Cavazzoni C, de Gironcoli S, Delugas P, Ferrari Ruffino F, Ferretti A, Marzari N, Timrov I, Urru A, Baroni S, *J. Chem. Phys.* **152**, 154105 (2020).
25. Gurylev V, Tsong Pyng Perng, *J. Eur. Ceramic Soc.* **41**, 4977 (2021).
26. Hall B, *Lie Groups, Lie Algebras and Representations: An Elementary Introduction* (Springer, Heidelberg, Germany, 2015), chapt. 3.
27. Harima H, *J. Phys.: Condens. Matter* **14**, R967 (2002).
28. Hassen M, Riahi R, Laatar Ezzaouia H, *Surf. Interfaces* **18**, 100408 (2020).
29. Hedin L, *Phys. Rev.* **139**, A796 (1965).
30. Hedin L, Lundqvist S, Effects of Electron-Electron and Electron-Phonon Interactions on the One-Electron States of Solids, in Seitz F, Turnbull D, Ehrenreich H (Eds.), *Solid State Physics* **23** (Academic Press, New York, USA, 1970), pp. 1-181.
31. Hernandez-Perez MA, Aguilar-Hernandez J, Contreras-Puente G, Vargas-Garcia JR, Rangel-Salinas E, *Physica E* **40**, 2535 (2008).
32. Heyd J, Scuseria GE, Ernzerhof M, *J. Chem. Phys.* **118**, 8207 (2003).
33. Heyd J, Scuseria GE, Ernzerhof M, *J. Chem. Phys.* **124**, 219906 (2006).
34. Hohenberg H, Kohn W, *Phys. Rev.* **136**, B864 (1964).
35. Ion L and Antohe S, *J. Appl. Phys.* **97**, 013513 (2005).
36. Ion L, Enculescu I, Iftimie S, Ghenescu V, Tăzlăoanu C, Beșleagă C, Mitran TL,, Antohe VA, Gugu MM, Antohe S, *Chalcogen. Lett.* **7**, 521 (2010).
37. Ion L, Nemnes GA, Visan C, Brancus DEN, Antohe S, *Dig. J. Nanomater. Bios.* **6**, 331 (2011).
38. Ion L, Ghenescu V, Ghenescu M, Gugu MM, Iftimie S, Radu A, Vasile N, Toma O, Antohe S, *Rom. Rep. Phys.* **67**, 1570 (2015).
39. Janotti A, Van de Walle CG, *Rep. Prog. Phys.* **72**, 126501 (2009).
40. Jeon NJ, Noh JH, Yang WS, Kim YC, Ryu S, Seo J and Seok SI, *Nature* **517**, 476 (2015).
41. Ji WY, Jing PT, Zhang LG, Li D, Zeng QH, Qu SN, Zhao JL, *Sci. Rep.* **4**, 6974 (2014).
42. Ji WY, Liu SH, Zhang H, Wang R, Xie WF, and Zhang HZ, *ACS Photonics* **4**, 1271 (2017).
43. Kainthla RC, Pandya DK and Chopra KL, *J. Electrochem. Soc.* **127**, 277 (1980).
44. Kalisman P, Nakibli Y, and Amirav L, *NANO Lett.* **16**, 1776 (2016).
45. Kohn W, Sham LJ, *Phys. Rev.* **140A**, 1133 (1965).
46. Komsa H-P, Rantala TT, Pasquarello A, *Phys. Rev. B* **86**, 045112 (2012).
47. Lannoo M, Bourgoin J, *Point Defects in Semiconductors: Experimental Aspects*, Springer Series in Solid-State Sciences **35** (Springer Verlag, Berlin, Germany, 1983).
48. Lany S, Zunger A, *Phys. Rev. B* **78**, 235104 (2008).
49. Lee TD, Low FE and Pines D, *Phys. Rev.* **90**, 297 (1953).
50. Liang HK, Yu SF, Yang HY, *Appl. Phys. Lett.* **96**, 101116 (2010).

51. Look DC, in *Semiconductors and Semimetals*, edited by R. K. Willardson and A. C. Beer (Academic, New York, 1983), Vol. 19, p. 75.
52. Loudon R, *Adv. Phys.* **13**, 423 (1964).
53. Makov G and Payne MC, *Phys. Rev.* **B 51**, 4114 (1995).
54. Martin RM, *Electronic Structure - Basic Theory and Practical Methods* (Cambridge University Press, Cambridge, UK, 2020).
55. Marzari N, Mostofi AA, Yates JR, Souza I, Vanderbilt D, *Rev. Mod. Phys.* **84**, 1419 (2012).
56. Matei E, Ion L, Antohe S, Neumann R, and Enculescu I, *Nanotechnology* **21**, 105202 (2010).
57. Mitran TL, Nicolaev A, Nemnes GA, Ion L and Antohe S, *J. Phys.: Condens. Matter* **24**, 326003 (2012).
58. Nag A, Raidongia K, Hembram KPSS, Datta R, Waghmare UV, Rao CNR, *ACS Nano* **4**, 1539 (2010).
59. Nakamura S, Chichibu SF, *Introduction to Nitride Semiconductor Blue Lasers and Light Emitting Diodes* (Taylor & Francis, London, UK 2000).
60. Nemnes GA, Goehry C, Mitran TL, Nicolaev A, Ion L, Antohe S, Plugaru N, Manolescu A, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **17**, 30417 (2015).
61. Nemneş GA, Beşleagă C, Tomulescu AG, Pintilie I, Pintilie L, Torfason K, Manolescu A, *Sol. Energy. Mater. Sol. Cells* **159**, 197 (2017).
62. Nemnes GA, Besleaga C, Tomulescu AG, Palici A, Pintilie L, Manolescu A, Pintilie I, *Sol. Energy* **173**, 976 (2018).
63. Ni Z-H, Kong B, Zeng T-X, Yang H and He Z-Y, *Mater. Res. Express* **6**, 105903 (2019).
64. Novoselov KS, Jiang D, Schedin F, Booth TJ, Khotkevich VV, Morozov SV, and Geim AK, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **102**, 10451 (2005).
65. Olusola OI, Echendu OK, Dharmadasa IM, *J Mater Sci: Mater Electron* **26**, 1066 (2015).
66. Parratt LG, *Phys. Rev.* **95**, 359 (1954).
67. Perdew JP, Burke K, Ernzerhof M, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 3865 (1996).
68. Pizzi G, Vitale V, Arita R, Blügel S, Freimuth F, Géranton G, Gibertini M, Gresch D, Johnson C, Koretsune T, Ibañez-Azpiroz J, Lee H, Lihm JM, Marchand D, Marrazzo A, Mokrousov Y, Mustafa JI, Nohara Y, Nomura Y, Paulatto L, Poncé S, Ponweiser T, Qiao J, Thöle F, Tsirkin SS, Wierzbowska M, Marzari N, Vanderbilt D, Souza I, Mostofi AA, and Yates JR, *J. Phys. Cond. Matt.* **32**, 165902 (2020).
69. Radu M, Ghenescu V, Stan I, Ion L, Besleaga C, Nicolaev A, Mitran TL, Tazlaoanu C, Radu A, Porumb O, Ghenescu M, Gugu MM, Antohe S, *Chalcogen. Lett.* **8**, 477 (2011).
70. Raduta AM, Panaitescu AM, Radu A, Ion L, Antohe VA, Toma O, Iftimie S, Antohe S, *Chalcogen. Lett.* **20**, 871 (2023).
71. Răduță AM, Panaitescu AM, Manica M, Iftimie S, Antohe VA, Toma O, Radu A, Ion L, Suche MP and Antohe S, *Nanomaterials* **14**, 535 (2024).
72. Ruda HE (Ed.), *Widegap II-VI Compounds for Opto-electronic Applications* (Springer Science+Business Media, Dordrecht, Germany, 1992).
73. Ryu Y, Lee T-S, Lubguban JA, White HW, Kim B-J, Park Y-S, Youn C-J, *Appl. Phys. Lett.* **88**, 241108 (2006).
74. Scarpulla MA, McCandless B, Philips AB, Yan Y, Heben MJ, Wolden C, Xiong G, Metzger WK, Mao D, Krasikov D, Sankin I, Grover S, Munshi A, Sampath W, Sites JR, Bothwell A, Albin D, Reese MO, Romeo A, Nardone M, Klie R, Walls JM, Fiducia T, Abbas A, Hayes SM, *Sol. Energy Mater. Sol. Cells* **255**, 112289 (2023).
75. Shi B, Wang H, Jiang W, Feng Y, Guo P, Gao H, Gao Z, Ren W, *Appl. Surf. Sci.* **636**, 157816 (2023).
76. Shklovskii BI, Efros AL, *Electronic Properties of Doped Semiconductors* (Springer Verlag, Berlin, Germany, 1984), chapt. 9.
77. Sima C, Grigoriu C, Besleaga C, Mitran T, Ion L, Antohe S, *Mater. Sci. Eng.* **B 177**, 1182 (2012).
78. Soler JM, Artacho E, Gale JD, Garcia A, Junquera J, Ordejon P and Sanchez-Portal D, *J. Phys.: Condens. Matter* **14**, 2745 (2002).

79. Garcia A, Papior N, Akhtar A, Artacho E, Blum V, Bosoni E, Brandimarte P, Brandbyge M, Cerda JI, Corsetti F, Cuadrado R, Dikan V, Ferrer J, Gale J, Garcia-Fernandez P, Garcia-Suarez VM, Garcia S, Huhs G, Illera S, Korytar R, Koval P, Lebedeva I, Lin L, Lopez-Tarifa P, Mayo SG, Mohr S, Ordejon P, Postnikov A, Pouillon Y, Pruneda M, Robles R, Sanchez-Portal D, Soler JM, Ullah R, Yu VWZ, Junquera J, *J. Chem. Phys* **152**, 204108 (2020).
80. Tazlaoanu C, Ion L, Enculescu I, Sima M, Enculescu M, Matei E, Neumann R, Bazavan R, Bazavan D, Antohe S, *Physica E* **40**, 2504 (2008).
81. Toma O, Iftimie S, Besleaga C, Mitran TL, Ghenescu V, Porumb O, Toderas A, Radu M, Ion L, Antohe S, *Chalcogen. Lett.* **8**, 747 (2011).
82. Toma O, Ion L, Girtan M, Antohe S, *Sol. Energy* **108**, 51 (2014).
83. Toma O, Ion L, Iftimie S, Radu A, Antohe S, *Mater. Design* **100**, 198 (2016).
84. van Embden J, Gross S, Kittilstved KR, and Della Gaspera E, *Chem. Rev.* **123**, 271 (2023).
85. Van de Walle CG, Neugebauer J, *J. Appl. Phys.* **95**, 3851 (2004).
86. Wikoff HM, Reese SB, Reese MO, *Joule* **6**, 1710 (2022).
87. Willander M, Nur O, Zhao QX, Yang LL, Lorenz M, Cao BQ, Zuniga Perez J, Czekalla C, Zimmermann G, Grundmann M, *Nanotechnology* **20**, 332001 (2009).
88. Yadav AA, Barote MA, Masumdar EU, *Mater. Chem. Phys.* **121**, 53 (2010).
89. Yang W, Liu Z, Peng DL, Zhang F, Huang H, Xie Y, and Wu Z, *Appl. Surf. Sci.* **255**, 5669 (2009).
90. Yu ZG, Zhang Y-W, *Chem. Phys. Lett.* **666**, 33 (2016).
91. Zhang SB, Wei S-H and Zunger A, *J. Appl. Phys.* **83**, 3192 (1998).
92. Zhang H, Cheng K, Hou YM, Fang Z, Pan ZX, Wu WJ, Hua JL and Zhong XH, *Chem. Commun.* **48**, 11235 (2012).
93. Zhang Y, Nayak TR, Hong H, and Cai W, *Curr. Mol. Med.* **13**, 1633 (2013).
94. Xie H-J, Chen C-Y and Ma B-K, *J. Phys.: Condens. Matter* **12**, 8623 (2000).
95. Wang ZL, Song JH, *Science* **312**, 242 (2006).
96. Wendler L and Hartwig B, *J. Phys.: Condens. Matter* **2**, 8847 (1990).
97. Wendler L and Grigoryan VG, *Phys. Rev.* **B 49**, 14531 (1994).
98. Wu J, Wang B, Wei Y, Yang R and Dresselhaus M, *Mater. Res. Lett.* **1**, 200 (2013).
99. Zengru Z and Xixia L, *J. Semicond.* **30**, 062002 (2009).
100. Ziegler JF, Biersack JP, Littmark U, *SRIM - The stopping and range of ions in solids* (Pergamon Press, New York, 1985).
101. Zhu G, Yang R, Wang S and Wang ZL, *Nano Lett.* **10**, 3151 (2010).