

## **Отчет о проделанной работе с использованием оборудования ИВЦ НГУ**

**1. Аннотация.** Создание новых материалов с заданными характеристиками является одной из ключевых задач современного материаловедения. В данной работе изучаются свойства монослоя PdSe<sub>2</sub>, индуцированные наличием вакансий. Показано, что комплексная вакансия V<sub>Pd+4Se</sub> индуцирует спин-поляризованные состояния с суммарным локальным магнитным моментом 2  $\mu$ B на дефект, что позволяет ввести намагниченность в PdSe<sub>2</sub> и тем самым расширить семейство двумерных магнитных материалов. Энергии образования вакансий в PdSe<sub>2</sub> намного ниже по сравнению со многими другими материалами TMD, что может объяснить наличие большого количества дефектов Se после механического расщепления слоев PdSe<sub>2</sub>. Показана возможность образования отрицательно заряженных вакансий, которые во многих случаях демонстрируют спин-поляризованные состояния. Выявлено, что монослои тетраоксо[8]циркулена (ТОС), декорированные атомами Li, Na и Ca, меняют свою электронную структуру с полупроводниковой на металлическую. Найдено уникальное синглетное основное состояние с открытой оболочкой в ТОС-Ca, в котором Ca находится в дублетном состоянии, что делает материал перспективным для создания магнитных квантовых битов. ТОС, легированный кальцием, демонстрируют высокую плотность состояний в окрестности уровня Ферми и индуцированную сверхпроводимость ( $T_c = 14,5$  К).

**2. Тема работы.** Структура и свойства новых материалов на основе слоистых соединений переходных металлов

### **3. Состав коллектива.**

Куклин Артем Валентинович, старший научный сотрудник Департамента науки и инновационной деятельности ФГАОУ ВО «Сибирский федеральный университет», email: artem.icm@gmail.com.

Бегунович (Тихонова) Людмила Витальевна, младший научный сотрудник Департамента науки и инновационной деятельности ФГАОУ ВО «Сибирский федеральный университет».

**4. Информация о гранте.** Российский научный фонд, грант № 19-73-10015 «Дизайн и исследование свойств низкоразмерных металл-органических каркасных наноматериалов для квантовых приложений» (2019-2022 годы), руководитель – Куклин Артем Валентинович.

Государственное задание Министерства науки и высшего образования Российской Федерации Сибирскому федеральному университету, грант № FSRZ-2020-0008 «Разработка фундаментальных основ перспективных оптических и магнитных материалов и синхротронных рентгеноспектральных методов исследования вещества» (2020-2022 годы), руководитель – Полютов Сергей Петрович.

## **5. Научное содержание работы.**

**5.1 Постановка задачи.** Изучение влияния вакансий в монослое  $\text{PdSe}_2$  и адатомов Li, Na и Ca в порах монослоя тетраоксо[8]циркуленов на их структуру и свойства.

**5.2 Современное состояние проблемы.** Уделяется много усилий и внимания разработке и изготовлению новых материалов, отвечающих требованиям современных устройств. В настоящее время предложено много перспективных материалов, среди которых двумерные (2D) одноатомные слои вызывают особый интерес благодаря их уникальным свойствам и возможности высокого масштабирования и минимизации устройств [1]. Слоистые дихалькогениды переходных металлов (TMDs) являются новым классом материалов, который представляет исследователям платформу для проведения фундаментальных исследований и разработки многообещающих оптоэлектронных устройств [2]. Хотя дефекты являются почти неизбежной частью TMD, они придают дополнительные интересные свойства слоям, отсутствующие в бездефектных структурах. Кроме того, контролируемое

введение дефектов в TMD позволяет настраивать электромагнитные свойства таких материалов. Магнетизм, вызванный дефектами, привлекает особое внимание, поскольку к настоящему времени получены только несколько двумерных магнитных материалов с собственными магнитными моментами. Особый интерес представляет стабильный на воздухе двумерный PdSe<sub>2</sub>, обладающий разнообразными свойствами такими, как зависящая от толщины материала ширина запрещенной зоны [3], высокая подвижность носителей заряда [4], сверхпроводимость в фазе высокого давления типа пирита [5], которые идеально подходят для создания новых нанoeлектронных устройств. Однако производительность такого рода устройств часто зависит от дефектов, появившихся в материале в процессе подготовки. Поэтому очень важно исследовать, как дефекты влияют на электронные свойства 2D PdSe<sub>2</sub>.

Использование органических фрагментов в качестве исходных строительных блоков при формировании двумерных материалов позволяет настраивать свойства этих систем. Свойства зависят от выбранного фрагмента, от способа их соединения [6] и от размера полученных наноматериалов [7]. Отдельного внимания заслуживают пористые двумерные органические материалы. Способность ионов металлов регулярно и равноудаленно встраиваться в такие наноструктуры способствует появлению новых свойств в полученных материалах и расширяет возможности их применения. Такие металлоорганические пористые материалы имеют широкий спектр потенциальных применений: полупроводниковая промышленность, спинтроника, оптоэлектроника, катализ, газовые и магнитные устройства хранения и др [8–12]. Недавно было предсказано существование новых 2D нанолитов на основе тетраокса[8]циркулена (ТОС), изучены их свойства [6,13]. В связи с тем, что данные материалы имеют пористую структуру, интересно рассмотреть возможность формирования 2D металлоорганических соединений на их основе и изучить их структуру и свойства.

1. T. Roy, M. Tosun, J. S. Kang, A. B. Sachid, S. B. Desai, M. Hettick, C. C. Hu, and A. Javey, ACS Nano **8**, 6259 (2014).

2. A.D. Oyedele, S. Yang, L. Liang, A. A. Poretzky, K. Wang, J. Zhang, P. Yu, P. R. Pudasaini, A. W. Ghosh, Z. Liu, C. M. Rouleau, B. G. Sumpter, M. F. Chisholm, W. Zhou, P. D. Rack, D. B. Geohegan, and K. Xiao, *J. Am. Chem. Soc.* **139**, 14090 (2017).
3. W. L. Chow, P. Yu, F. Liu, J. Hong, X. Wang, Q. Zeng, C.-H. Hsu, C. Zhu, J. Zhou, X. Wang, J. Xia, J. Yan, Y. Chen, D. Wu, T. Yu, Z. Shen, H. Lin, C. Jin, B. K. Tay, and Z. Liu, *Adv. Mater.* **29**, 1602969 (2017).
4. M. A. ElGhazali, P. G. Naumov, H. Mirhosseini, V. Süß, L. Müchler, W. Schnelle, C. Felser, and S. A. Medvedev, *Phys. Rev. B* **96**, 060509 (2017).
5. Benka S G 2005 Two-dimensional atomic crystals *Phys. Today* **58** 9–9
6. Kuklin A V., Baryshnikov G V., Minaev B F, Ignatova N and Ågren H 2018 Strong Topological States and High Charge Carrier Mobility in Tetraoxa[8]circulene Nanosheets *J. Phys. Chem. C* **122** 22216–22
7. Baryshnikov G V., Minaev B F, Karaush N N and Minaeva V A 2014 The art of the possible: Computational design of the 1D and 2D materials based on the tetraoxa[8]circulene monomer *RSC Adv.* **4** 25843–51
8. Zhou J and Sun Q 2011 Magnetism of phthalocyanine-based organometallic single porous sheet *J. Am. Chem. Soc.* **133** 15113–9
9. Tan J, Li W, He X and Zhao M 2013 Stable ferromagnetism and half-metallicity in two-dimensional polyporphyrin frameworks *RSC Adv.* **3** 7016–22
10. Li Y and Sun Q 2014 The superior catalytic CO oxidation capacity of a Cr-phthalocyanine porous sheet *Sci. Rep.* **4** 1–7
11. Lü K, Zhou J, Zhou L, Chen X S, Chan S H and Sun Q 2012 Pre-combustion CO<sub>2</sub> capture by transition metal ions embedded in phthalocyanine sheets *J. Chem. Phys.* **136**
12. Lü K, Zhou J, Zhou L, Wang Q, Sun Q and Jena P 2011 Sc-phthalocyanine sheet: Promising material for hydrogen storage *Appl. Phys. Lett.* **99** 2012–5
13. Yu J, Sun Q, Kawazoe Y and Jena P 2014 Stability and properties of 2D porous nanosheets based on tetraoxa[8]circulene analogues *Nanoscale* **6** 14962–70

### 5.3 Подробное описание работы, включая используемые алгоритмы.

Квантово-химические расчёты монослоёв PdSe<sub>2</sub> проводились в программном пакете VASP (Vienna Ab-initio Simulation Package) [1] с использованием базиса плоских волн и PAW формализма [2]. Обменно-корреляционные эффекты учитывались в рамках обобщенного градиентного приближения нелокального корреляционного функционала Ван-дер-Ваальса (optPBE), предложенного

Климеš и др. [3,4]. Энергия обрезания плоской волны была равна 400 эВ. Критерий полной минимизации энергии был равен  $10^{-5}$  эВ, максимальное значение сил, действующих на атомы в оптимизированных структурах, составляло  $10^{-2}$  эВ  $\text{\AA}^{-1}$ . Чтобы избежать взаимодействия соседних образов при расчете в периодических граничных условиях, задавался вакуумный промежуток 20  $\text{\AA}$  вдоль нормали к поверхности структуры. Первая зона Бриллюэна для элементарной ячейки и суперячейки была разбита, соответственно, на  $12 \times 12 \times 1$  и  $4 \times 4 \times 1$  гамма-центрированных k-точек, сгенерированных согласно схеме Монхорста-Пака [5]. Расчёты для металлоорганических полимеров осуществлялось в программном пакете OpenMX (Open source package for Material eXplorer) с использованием сохраняющих норму псевдопотенциалов [5-9] и локализованных псевдоатомных базисных функций [10]. Энергия обрезания плоской волны была равна 150 Ry. Максимальное значение сил, действующих на атомы в оптимизированных структурах, составляло  $1 \cdot 10^{-5}$  Hartree/Borh. Критерий полной минимизации энергии был равен  $1 \cdot 10^{-7}$  Hartree. Для учёта обменно-корреляционных эффектов использовался обменно-корреляционный PBE (Perdew-Burke-Ernzerhof) [11] функционал. Чтобы исключить взаимодействие соседних образов задавался вакуумный промежуток 20  $\text{\AA}$  вдоль нормали к поверхности гетероструктур. Первая зона Бриллюэна была разбита на  $20 \times 20 \times 1$  сетку, выбранную по схеме Монхорста-Пака [5]. Расчет зонной структуры проводился вдоль высокосимметричных направлений  $\Gamma(0,0,0)$ – $X(0,1/2,0)$ – $M(1/2,1/2,0)$ – $\Gamma(0,0,0)$  в первой зоне Бриллюэна. Программное обеспечение VESTA (Visualization for Electronic and Structural Analysis) [12] использовалось для представления атомных структур.

1. Kresse, G.; Furthmuller J 1996 Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set *Phys. Rev. B* 54 11169–86
2. Bloch P E 1994 Projector augmented-wave method *Phys. Rev. B* 50 17953–79
3. J. Klimeš, D. R. Bowler, and A. Michaelides, *J. Phys. Condens. Matter* **22**, 022201 (2010).
4. J. Klimeš, D. R. Bowler, and A. Michaelides, *Phys. Rev. B* **83**, 195131 (2011).

5. H. J. Monkhorst and J. D. Pack, Special points for Brillouin-zone integrations *Phys. Rev. B*, 1976, 13, 5188–5192.
6. Bachelet G B, Hamann D R and Schluter M 1982 Pseudopotentials that work: From H to Pu *Phys. Rev. B* 26 4199
7. Troullier N and Martins J L 1993 Efficient pseudopotentials for plane-wave calculations *Phys. Rev. B* 43
8. Kleinman L and Bylander D M 1982 Efficacious Form for Model Pseudopotentials Leonards *Phys. Rev. Lett.* 48 1425–8
9. Blochl P E 1990 Generalized separable potentials for electronic-structure calculations *Phys. Rev. B* 41 5414–6
10. Morrison I, Bylander D M and Kleinman L 1993 Nonlocal Hermitian norm-conserving Vanderbilt pseudopotential *Phys. Rev. B* 47 6728–31
11. Ozaki T and Kino H 2004 Numerical atomic basis orbitals from H to Kr *Phys. Rev. B* 69 195113
12. Perdew J P, Burke K and Ernzerhof M 1996 Generalized Gradient Approximation Made Simple *Phys. Rev. Lett.* 77 3865–8
13. Krukau A V, Vydrov O A, Izmaylov A F and Scuseria G E 2006 Influence of the exchange screening parameter on the performance of screened hybrid functionals *J. Chem. Phys.* 125
14. J. Harl, L. Schimka and G K 2010 Assessing the quality of the random phase approximation for lattice constants and atomization energies of solids *Phys. Rev. B* 81 115126
15. Momma K and Izumi F 2011 VESTA 3 for three-dimensional visualization of crystal, volumetric and morphology data *J. Appl. Crystallogr.* 44 1272–6

#### **5.4 Полученные результаты.**

В данном исследовании мы сообщаем о свойствах монослоя PdSe<sub>2</sub>, вызванных дефектами, и демонстрируем появление магнетизма на наноуровне. Были рассмотрены следующие дефекты: моновакансия селена ( $V_{Se}$ ), бивакансия палладия-селена ( $V_{Pd+Se}$ ), моновакансия палладия ( $V_{Pd}$ ), бивакансия селена ( $V_{Se+Se}$ ) и пентавакансия, заключающаяся в отсутствии атома палладия и четырех ближайших атомов селена в узлах решетки ( $V_{Pd+4Se}$ ). Наличие вакансий демонстрирует значительное увеличение по длине ближайших к ним связей Pd-Se (~ 4-7%). Энергии образования дефектов в зависимости от химического потенциала Se представлены на рисунке 1. Результаты показывают, что преобладающими дефектами в монослое PdSe<sub>2</sub>

являются  $V_{Pd}$  и  $V_{Se}$ . В условиях избытка Pd (Pd-rich) вакансии Se требуют наименьших энергетических затрат, и их энергия образования составляет 1,64 эВ, что находится в диапазоне энергий для типичных представителей семейства дихалькогенидов переходных металлов, таких как  $MoSe_2$  [2] и  $MoS_2$  [1]. В отличие от  $MoS_2$  энергия образования вакансии Se в монослое  $PdSe_2$  слабо зависит от условий роста. В условиях избытка селена (Se-rich) энергия образования вакансии Pd является самой низкой и составляет 1,45 эВ. Образование  $V_{Pd}$  намного проще, чем образование  $V_{Mo}$  в  $MoSe_2$  или  $MoS_2$ . С точки зрения структурного анализа ионы палладия не так плотно окружены атомами халькогена, как Mo в  $MoSe_2$  и  $MoS_2$ , что делает их более доступными для удаления из слоя. Однако дополнительным важным фактором дефектообразования является достаточно сильная энергия связи между слоями  $PdSe_2$  в его объемной структуре. В результате сильной межслоевой связи и относительно низкой энергии образования вакансий при механическом разделении слоев часто создается большое количество дефектов Se, а центральное расположение атомов Pd предохраняет их от дефектообразования при механическом расщеплении. Энергии образования бивакансий показывают, что для образования  $V_{Pd+Se}$  требуется меньше энергии, чем для образования двух отдельных моновакансий  $V_{Pd}$  и  $V_{Se}$ , а, следовательно, можно ожидать слияние точечных вакансий с образованием бивакансии. Напротив, энергия образования бивакансий селена выше, чем энергия суперпозиции двух вакансий Se. Наличие вакансий приводит к возникновению внедренных состояний в запрещенной зоне и к её уменьшению до 1,18 эВ ( $V_{Pd}$ ) и до ~0,95 эВ ( $V_{Se}$ ). Сложная вакансия  $V_{Pd+4Se}$  индуцирует спин-поляризованные состояния из-за большого количества оборванных связей. Ширина запрещенной зоны со спином вверх и вниз становится равной 0,59 эВ и 0,53 эВ соответственно. Ближайшие соседние атомы селена принимают избыточный заряд 0,2 e и проявляют магнитные моменты 0,1-0,4  $\mu B$  на атом с суммарным локальным магнитным моментом 2  $\mu B$  на дефект. Иногда заряженные точечные дефекты могут образовываться с меньшей энергией.

Поскольку точечные дефекты являются наиболее распространенными источниками дефектов в 2D-материалах, здесь мы ограничиваем наши расчеты типами дефектов  $V_{Se}$  и  $V_{Pd}$ . Однако большое значение имеет также изучение сложных вакансий, в которых магнетизм может исчезнуть при зарядке. Расчеты показывают, что отрицательно заряженные вакансии склонны к образованию как в Pd-rich, так и в Se-rich условиях, в то время как положительно заряженные вакансии имеют высокие энергии образования (рисунок 2). Вакансия Pd+4Se требует небольшой энергии образования при хим.потенциале электрона, равном минимуму зоны проводимости (CBM), и равна 0.07 eV в условиях Pd-rich и 0.40 eV в условиях Se-rich. Можно наблюдать индуцированную зарядом спиновую поляризацию, проявляющую магнитные свойства во всех заряженных вакансиях, кроме  $V_{Pd}^{2-}$  и  $V_{Pd+4Se}^{2-}$ . Найдены магнитные моменты 1  $\mu B$  и 2  $\mu B$  для вакансий селена с зарядами -1 и -2. Таким образом, точный контроль вакансий обеспечивает новую платформу для индуцированного магнетизма в 2D PdSe<sub>2</sub>. При некоторых значениях химического потенциала электрона ( $\epsilon_F$ ) энергии образования  $V_{Se}^{2-}$  и  $V_{Pd}^{2-}$  становятся отрицательными. Так как условия роста может варьироваться от Pd-rich до Se-rich, ожидается, что некоторые вакансии могут образовываться спонтанно. Однако Pd-rich и Se-rich условия соответствуют экстремальным значениям химических потенциалов элементов. Следовательно, самопроизвольное образование вакансий в эксперименте может не наблюдаться. Кроме того, исследования в основном сообщают о механическом расслоении PdSe<sub>2</sub>, где этот фактор менее значительный, а вакансии Se многочисленны из-за сильного межслоевого взаимодействия.

Далее было изучено взаимодействие между некоторыми атомами щелочных и щелочноземельных металлов (Li, Na, Ca) и двумерными листами двух типов полимеров на основе тетраокса[8]циркулена, отличающихся способом соединения молекул-мономеров между собой (рисунок 3). Были рассмотрены два положения атомов металлов: в плоскости и над плоскостью полимера. Расчеты показали, что металлоорганические ТОС#1-Ме полимеры



предпочитают конфигурацию с атомом металла над поверхностью полимера, в то время как ТОС#2-Ме полимеры – с атомом металла в плоскости полимера, что обусловлено разным размером пор (рисунок 1). Во всех случаях наблюдается небольшое увеличение вектора трансляции, а так же длин связей О-С в результате смещения атомов кислорода к атомам металла. Для полимеров первого типа расстояние Ме-О находится в диапазоне от 2,65 Å (ТОС#1-Са) до 2,06 Å (ТОС#1-Li), для полимеров второго типа расстояния Ме-О практически одинаковые и равны ~3Å. Анализ зарядов по Вороному показал, что электроны переходят с атомов металлов на полимеры тетраокса[8]циркулена. Это говорит о том, что данные полимеры предпочитают захватывать электроны из щелочных и щелочноземельных металлов для формирования более стабильного состояния. В полимере, допированном атомами Са один 4s электрон переходит с атома Са на ТОС, при этом полный магнитный момент системы равен нулю. Связано это с тем, что направление спина оставшегося электрона на атоме Са противоположно направлению спина электрона, перенесённого на ТОС. Как следствие, в целом система ТОС–Са находится в синглетном спиновом состоянии, в то время как атом Са и лиганд ТОС находятся в дублетных состояниях. Дублетное спиновое состояние характеризуется большим временем жизни [3,4] и поэтому полимеры ТОС–Са перспективны для создания магнитных квантовых битов. Образование всех рассмотренных полимеров энергетически выгодно. Значения энергий связи полимера с атомом металла (-3,02, -1,71, -1,29, -2,14, -1,96 и -1,34 эВ для ТОС#1-Li, ТОС#1-Na, ТОС#1-Са, ТОС#2-Li, ТОС#2-Na и ТОС#2-Са полимеров, соответственно) сопоставимы с энергиями химической связи. Стабильность металлоорганических полимеров зависит от размера пор и радиуса атома металла. Анализ электронной структуры показал, что взаимодействие полимеров на основе тетраокса[8]циркулена с атомами таких щелочных и щелочноземельных металлов как Li, Na и Са оказывает существенное влияние на электронную структуру полимеров. Так ТОС#1-Ме и ТОС#2-Ме полимеры являются проводниками, в то время как 2D ТОС#1

полимер – полупроводник, а 2D ТОС#2 полимер – полуметалл. Дополнительные зоны, сформированные состояниями Са в полимере ТОС#1–Са, локализуются вблизи уровня Ферми и демонстрируют слабую дисперсию. Поскольку в полимере наблюдается узкая запрещённая зона, то дырочное или электронное допирование может привести к сдвигу уровня Ферми и, как следствие, плоские зоны могут разместиться на уровне Ферми, что может привести к возникновению сверхпроводящего состояния в полимере. Расчёты спектральной функции Элиашберга и константы электрон-фононного взаимодействия (ЭФВ)  $\lambda(\omega)$  показали, что основной вклад в ЭФВ дают низкоэнергетические моды (до 30 мэВ), где  $\lambda(\omega)$  достигает примерно 75% от полной силы ЭФВ. Другой значительный вклад, примерно 10% ЭФВ, находится в диапазоне 170–190 мэВ. Рассчитанное значение полного  $\lambda(\omega)$  равно 1,1, а критической температуры перехода в сверхпроводящее состояние  $T_C$  – 14,5 К. Это значение находится в пределах диапазона для типичных сверхпроводящих материалов на основе углерода [5,6]. Сочетание сверхпроводимости и длительного времени жизни спина в дублете на атомах кальция делает ТОС–Са перспективным материалом для создания магнитных квантовых битов.

1. W. Zhou, X. Zou, S. Najmaei, Z. Liu, Y. Shi, J. Kong, J. Lou, P. M. Ajayan, B. I. Yakobson, and J.-C. Idrobo, *Nano Lett.* **13**, 2615 (2013).

2. A. A. Koós, P. Vancsó, M. Szendrő, G. Dobrik, D. Antognini Silva, Z. I. Popov, P. B. Sorokin, L. Henrard, C. Hwang, L. P. Biró, and L. Tapasztó, *J. Phys. Chem. C* **123**, 24855 (2019).

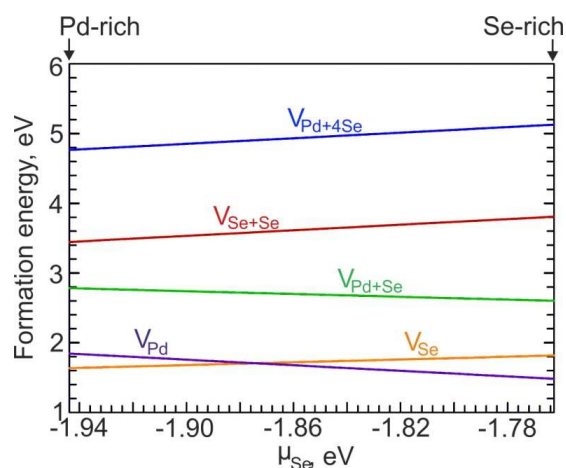
3. Albino A. et al. // *Inorg. Chem.* 2019. Vol. 58. P. 10260–10268.

4. Jenkins M.D. et al. // *Dalt. Trans.* 2016. Vol. 45. P. 16682–16693.

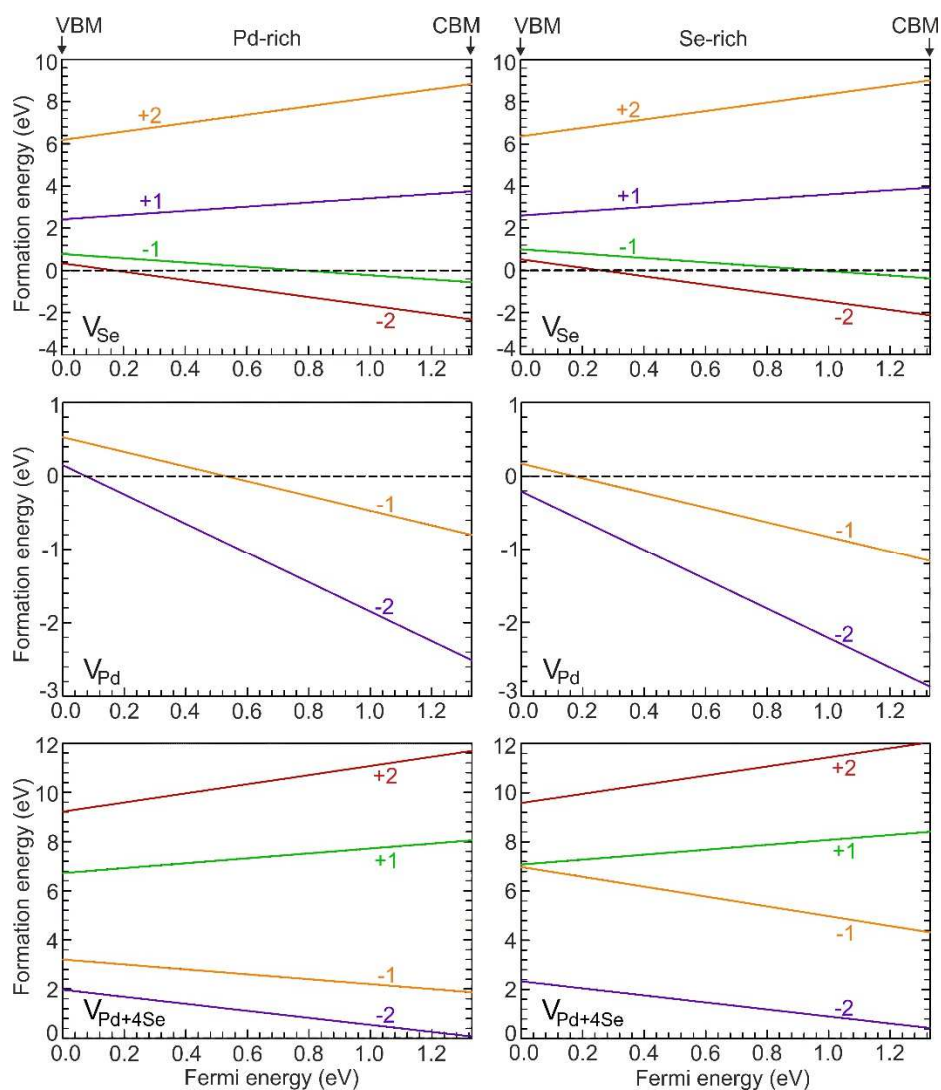
3. Weller T.E. et al. // *Nat. Phys.* 2005. Vol. 1. P. 39–41.

4. Csányi G. et al. // *Nat. Phys.* 2005. Vol. 1. P. 42–45.

## 5.5 Иллюстрации, визуализация результатов.



Энергии образования нейтральных вакансий в монослое PdSe<sub>2</sub> в зависимости от химического потенциала Se. Левый и правый пределы соответствуют условиям с избытком Pd и Se соответственно.



Энергии образования заряженных вакансий в монослое PdSe<sub>2</sub> в зависимости от положения уровня Ферми в условиях Pd-rich (левое изображение) и Se-rich (правое изображение).

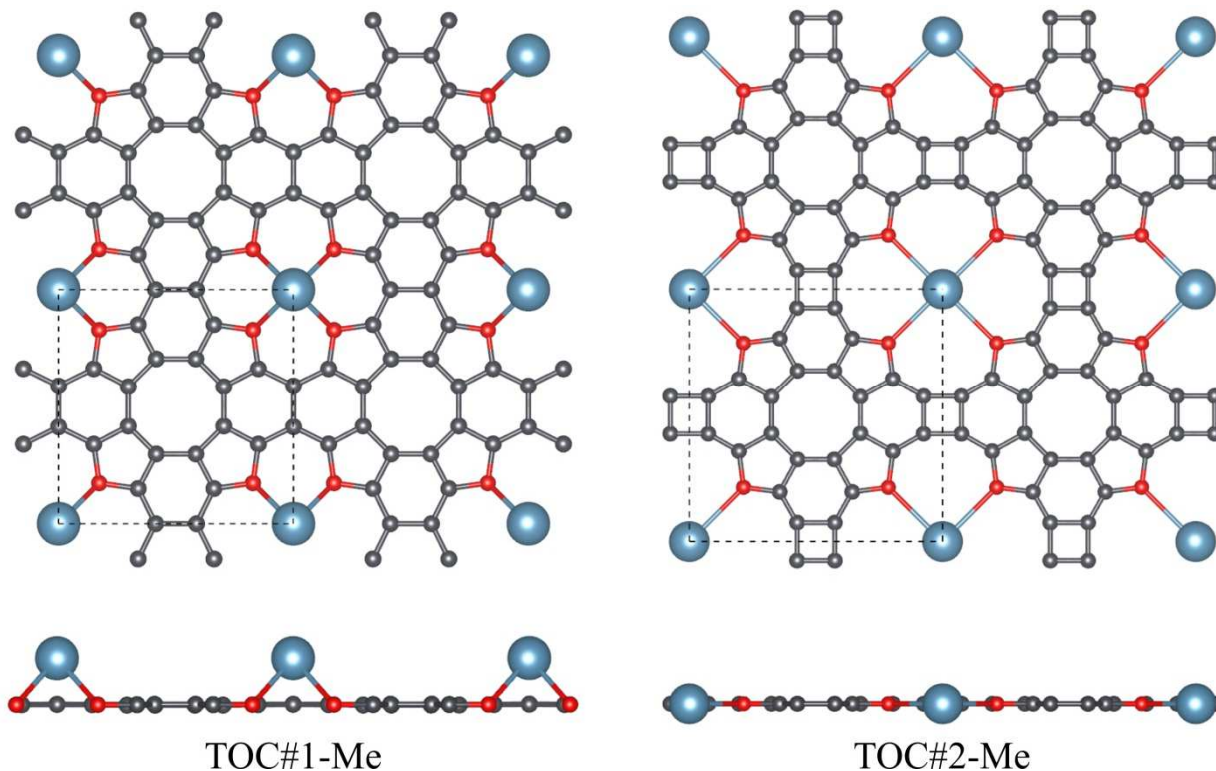


Рисунок 3. Вид сверху и сбоку для металлорганических нанолистов на основе тетраокса[8]циркулена с двумя способами соединения между мономерами.

Элементарные ячейки показаны черными пунктирными линиями. Атомы углерода, кислорода и металлов обозначены серым, красным и синим цветами, соответственно.

### 6. Эффект от использования кластера в достижении целей работы.

Все квантово-химические расчеты, результаты которых приведены выше, проводились на базе оборудования ИВЦ НГУ. Проведение таких расчетов невозможно на персональных компьютерах по причине ресурсоемкости оптимизационного алгоритма, как по объему требуемой памяти, так и по времени счета. Таким образом, использование кластера является необходимым условием для успешного достижения целей работы.

## 7. Перечень публикаций, содержащих результаты работы

1. Point and complex defects in monolayer PdSe<sub>2</sub>: Evolution of electronic structure and emergence of magnetism / Artem V. Kuklin, **Lyudmila V. Begunovich**, Lingfeng Gao, Han Zhang, Hans Ågren // *Physical Review B*. – 2021. – Vol. 104. – P. 134109, DOI: 0.1103/PhysRevB.104.134109, Impact Factor: 4.036
2. Single-layer polymeric tetraoxa[8]circulene modified by s-metals: toward stable spin qubits and novel superconductors / **L. V. Begunovich**, A. V. Kuklin, G. V. Baryshnikov, R. R. Valiev, H. Ågren // *Nanoscale*. – 2021. – Vol. 13. – P. 4799-4811, Impact Factor: 6.895.
3. Структура и свойства соединений VTe<sub>2</sub>/графен, VTe<sub>2</sub>/графен/VTe<sub>2</sub>, FeSe/Se/SrTiO<sub>3</sub> и допированных атомами металлов тетраоксо[8]циркуленов / **Л.В. Бегунович** // диссертация на соискание учёной степени кандидата физико-математических наук: Красноярск, 2021.
4. 2D organometallic polymers based on tetraoxa[8]circulene and s-metal atoms / **L. V. Begunovich**, A. V. Kuklin, G. V. Baryshnikov, R. R. Valiev, H. Ågren // XII Международной конференции молодых учёных по химии «Mendeleev 2021»: Санкт-Петербург, 2021.
5. Двумерные металлоорганические полимеры на основе тетраоксо[8]циркулена и атомов s-металлов / **Л. В. Бегунович** // Конференция молодых ученых, аспирантов и студентов ФИЦ КНЦ СО РАН 2021 года по секции "Физика": Красноярск, 2021.