



Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика. 2026. Т. 26, вып. 2. С. 210–217

*Izvestiya of Saratov University. Physics*, 2026, vol. 26, iss. 2, pp. 210–217

<https://fizika.sgu.ru>

<https://doi.org/10.18500/1817-3020-2026-26-2-210-217>, EDN: UKFVOC

Научная статья

УДК 538.915

## Влияние диаметра отверстия и карбонильных групп на электронные свойства тонких плёнок перфорированного графена с почти круглыми отверстиями



П. В. Барков<sup>1✉</sup>, М. М. Слепченков<sup>1</sup>, О. Е. Глухова<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н. Г. Чернышевского, Россия, 410012, г. Саратов, ул. Астраханская, д. 83

<sup>2</sup>Первый Московский государственный медицинский университет имени И. М. Сеченова, Россия, 119991, г. Москва, ул. Большая Пироговская, д. 2, стр. 4

Барков Павел Валерьевич, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры радиотехники и электродинамики, [barkovssu@mail.ru](mailto:barkovssu@mail.ru), <https://orcid.org/0000-0003-2167-1615>, AuthorID: 932768

Слепченков Михаил Михайлович, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры радиотехники и электродинамики, [slepchenkovm@mail.ru](mailto:slepchenkovm@mail.ru), <https://orcid.org/0000-0002-4282-5620>, AuthorID: 712909

Глухова Ольга Евгеньевна, доктор физико-математических наук, <sup>1</sup>заведующий кафедрой радиотехники и электродинамики; <sup>2</sup>ведущий научный сотрудник лаборатории биомедицинских нанотехнологий, [glukhova@sgu.ru](mailto:glukhova@sgu.ru), <https://orcid.org/0000-0002-5670-2058>, AuthorID: 33028

**Аннотация.** В настоящее время перфорированный графен является одним из наиболее перспективных представителей семейства углеродных наноматериалов благодаря своим электронным, оптическим, каталитическим и сенсорным свойствам. Особый интерес для исследователей представляет выявление закономерностей управления свойствами перфорированного графена за счет модификации его атомного строения. Целью данной работы является установление закономерностей изменения электронных свойств тонких плёнок перфорированного графена с отверстиями почти круглой формы диаметром 1, 1.5 и 2 нм при наличии на поверхности перфорированного графена карбонильных групп и атомов водорода. Исследование проводилось с применением самосогласованного метода функционала электронной плотности в схеме сильной связи (SCC DFTB). Все расчеты проводились для температуры 300 К. Выполнена оценка термодинамической устойчивости плёнок перфорированного графена в ходе функционализации. Электронные свойства анализируются на основе рассчитанных энергетических зонных диаграмм. Проводится анализ трансфера заряда в системе «перфорированный графен + карбонильные группы + атомы водорода» на основе рассчитанных распределений парциальных зарядов по Малликену по атомам супер-ячеек исследуемых плёнок. Показана высокая чувствительность размера энергетической щели плёнок перфорированного графена к функционализации для диаметра отверстия 1 нм; по сравнению с чистой поверхностью плёнок перфорированного графена щель увеличилась вдвое. Таким образом, размер отверстий и функционализация краев являются двумя важными факторами, влияющими на свойства перфорированного графена. Эти результаты показывают, что перфорированный графен, функционализированный карбонильными группами, является перспективным материалом в полупроводниковых устройствах.

**Ключевые слова:** зонная структура, энергетическая щель, уровень Ферми, парциальный атомный заряд

**Благодарности:** Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 25-72-00202, <https://rscf.ru/project/25-72-00202/>).

**Для цитирования:** Барков П. В., Слепченков М. М., Глухова О. Е. Влияние диаметра отверстия и карбонильных групп на электронные свойства тонких плёнок перфорированного графена с почти круглыми отверстиями // Известия Саратовского университета. Новая серия. Серия: Физика. 2026. Т. 26, вып. 2. С. 210–217. <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2026-26-2-210-217>, EDN: UKFVOC

Статья опубликована на условиях лицензии Creative Commons Attribution 4.0 International (CC-BY 4.0)

Article

### Influence of hole diameter and carbonyl groups on the electronic properties of thin films of perforated graphene with almost circular holes

P. V. Barkov<sup>1✉</sup>, M. M. Slepchenkov<sup>1</sup>, O. E. Glukhova<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup>Saratov State University, 83 Astrakhanskaya St., Saratov 410012, Russia

<sup>2</sup>I. M. Sechenov First Moscow State Medical University, 2–4 Bolshaya Pirogovskaya St., Moscow 119991, Russia

© Барков П. В., Слепченков М. М., Глухова О. Е., 2026



Pavel V. Barkov, barkovssu@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0003-2167-1615>, AuthorID: 932768

Mikhail M. Slepchenkov, slepchenkovm@mail.ru, <https://orcid.org/0000-0002-4282-5620>, AuthorID: 712909

Olga E. Glukhova, glukhovaoe@info.sgu.ru, <https://orcid.org/0000-0002-5670-2058>, AuthorID: 33028

**Abstract. Background and Objectives:** Perforated graphene is currently one of the most promising members of the carbon nanomaterial family due to its electronic, optical, catalytic, and sensor properties. Of particular interest to researchers is identifying patterns in controlling perforated graphene properties by modifying its atomic structure. The aim of this study is to establish patterns in the electronic properties of perforated graphene thin films with nearly circular holes of 1 nm, 1.5 nm, and 2 nm in diameter in the presence of carbonyl groups and hydrogen atoms on the perforated graphene surface. **Materials and Methods:** The study was conducted using the self-consistent charge density functional tight-binding method. All calculations were performed at a temperature of 300 K. **Results:** The thermodynamic stability of the perforated graphene films during functionalization has been assessed. The electronic properties are analyzed based on the calculated energy band diagrams. An analysis of charge transfer in the “Perforated graphene PG + Carbonyl groups + Hydrogen atoms” system has been conducted based on calculated Mulliken partial charge distributions across the atoms of the supercells of the studied films. A high sensitivity of the energy gap size of the perforated graphene films to functionalization has been demonstrated; for a hole diameter of 1 nm, the gap doubled compared to the clean surface of the perforated graphene films. **Conclusion:** Thus, hole size and edge functionalization are two important factors influencing the properties of perforated graphene. These results demonstrate that perforated graphene functionalized with carbonyl groups is a promising material for semiconductor devices.

**Keywords:** band structure, energy gap, Fermi level, partial atomic charge

**Acknowledgments:** The research was supported by the Russian Science Foundation (project No. 25-72-00202, <https://rscf.ru/project/25-72-00202/>).

**For citation:** Barkov P. V., Slepchenkov M. M., Glukhova O. E. Influence of hole diameter and carbonyl groups on the electronic properties of thin films of perforated graphene with almost circular holes. *Izvestiya of Saratov University. Physics*, 2026, vol. 26, iss. 2, pp. 210–217 (in Russian). <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2026-26-2-210-217>, EDN: UKFVOC

This is an open access article distributed under the terms of Creative Commons Attribution 4.0 International License (CC-BY 4.0)

## Введение

Одной из актуальных задач науки о материалах является экспериментальное получение и изучение свойств пористых двумерных наноматериалов [1]. К числу наиболее перспективных представителей этого класса наноматериалов относится перфорированный графен (ПГ), в базальной плоскости которого имеется множество пор (отверстий), размер, форма и плотность которых регулируются с помощью различных методов синтеза [2]. Для создания отверстий в базальной плоскости графена используются химические и физические методы: химическое травление, высокотемпературный нагрев, фотокаталитическое окисление, химическое осаждение из паровой фазы (CVD), ионная бомбардировка, реактивное ионное травление и литография буферного слоя [3–5]. Структуры ПГ обладают большой площадью поверхности и высокой плотностью отверстий, что обеспечивает множество активных участков для миграции и хранения ионного заряда [6, 7]. Это приводит к увеличению накопления заряда за счет полного внедрения / извлечения ионов электролита и противодействует проблемам расширения / сжатия объема электрода в системах накопления энергии [8–12]. Кроме того, материалы на основе ПГ действуют как мембрана для разделения молекулярных ионов, позволяя определенным молекулам/ионам проходить

через них, ограничивая при этом прохождение других, тем самым играя важную роль в системах опреснения воды [13]. Также ПГ находит применение в наноэлектронике при создании полевых транзисторов, играя роль проводящего канала [14, 15]. Опытный образец нанотранзистора на основе нанолента ПГ шириной до 10 нм, изготовленных с использованием наноимпринтной литографии, продемонстрирован в работе [14]. Установлено, что отношение токов  $I_{on}/I_{off}$  разработанного транзисторного устройства увеличивается с уменьшением ширины наноленты ПГ и при 10 нм приближается к отметке 100 в условиях комнатной температуры. Эффективность использования ПГ в качестве чувствительного элемента сенсорных устройств, в том числе газовых, подтверждена в работах [16–18]; в частности, создан и испытан электрохимический сенсор с чувствительным элементом, в роли которого выступает функционализированный азотом ПГ [18]. Разработанный датчик показал высокую чувствительность, широкий линейный диапазон, сверхнизкий предел обнаружения, превосходную стабильность и отсутствие помех.

Важной задачей при создании устройств на основе ПГ является реализация возможности управления физическими свойствами наноматериалов ПГ. Поиск оптимальных вариантов решения этой задачи в настоящее время осуществляется, в том числе с помощью методов



атомистического моделирования. В работе [19], используя методы *ab initio*, авторы показали, что ширина запрещённой зоны ПГ чувствительна к форме отверстий: в случае отверстий почти круглой формы структуры ПГ обладают большей шириной запрещённой зоны, чем в случае отверстий прямоугольной и треугольной форм. Кроме того, как отмечают авторы работы [20], проведя расчеты в рамках теории функционала плотности (DFT), размер энергетической щели между валентной зоной и зоной проводимости чувствителен к тому, вдоль какого из двух направлений гексагональной решётки – «zigzag» или «armchair» – расположены отверстия в массиве.

Помимо изменения геометрических параметров другим важным фактором, оказывающим влияние на электронную структуру и электронно-энергетические характеристики ПГ, является наличие на его поверхности функциональных групп. В наших предыдущих исследованиях рассматривалось влияние карбоксильных (COOH) [21] и карбонильных (C=O) [22] функциональных групп на энергетические характеристики и электрофизические свойства тонких плёнок ПГ с отверстиями почти круглой формы фиксированного диаметра (~1.5 нм) при различных значениях ширины шейки. В данной публикации нами рассматривается одновременное влияние диаметра отверстия и функционализации поверхности ПГ C=O группами на электронные и электропроводные свойства тонких плёнок ПГ с отверстиями почти круглой формы.

## 1. Методы исследования

Базовым методом, выбранным для проведения исследований, являлся самосогласованный метод функционала электронной плотности в схеме сильной связи (SCC DFTB) [23]. Расчёты проводились в программном пакете открытого доступа DFTB+ с использованием набора параметров Слэтера–Костера rbc-0-3, обеспечивающих наилучшее соответствие расчётных значений геометрических и энергетических характеристик углеродных наноструктур данным эксперимента [24]. Равновесная конфигурация суперъячеек плёнок ПГ находилась путём минимизации полной энергии суперъячеек по координатам всех атомов и по длинам векторов трансляции. Критерием оптимизации являлось достижение значения межатомных сил менее  $10^{-4}$  эВ·Å<sup>-1</sup>. Расчёты энергетических зонных диаграмм выполнялись для температуры 300 К.

Обход первой зоны Бриллюэна, представлявшей собой прямоугольник, осуществлялся по её высокосимметричным точкам в направлении М–Г–J–K–Г.

## 2. Атомистическая модель объекта исследования

В работе рассматриваются тонкие плёнки ПГ с формой отверстий, близкой к круглой, и значениями диаметра 1, 1.5 и 2 нм. Ранее экспериментально было показано, что плёнки ПГ с такой формой отверстия характеризуются более высокой структурной стабильностью по сравнению с отверстиями другой формы (треугольник, прямоугольник) [26]. Значения ширины шейки (наименьшее расстояние между краями соседних отверстий) были фиксированными для структур ПГ с выбранными диаметрами отверстий и составляли  $W_x = 0.74$  нм (вдоль направления «zigzag» гексагональной решетки) и  $W_y = 0.99$  нм (вдоль направлении «armchair» гексагональной решетки). Геометрические параметры моделируемых структур отвечают данным натурального эксперимента по синтезу ПГ [27]. Для каждой построенной суперъячейки плёнок ПГ проводилось моделирование процесса поэтапной функционализации поверхности ПГ C=O группами с помощью оригинального подхода, подробно изложенного в работе [28]. Функциональные группы присоединились ковалентными связями к атомам по краям отверстия ПГ, характеризующимся наибольшей величиной избыточного парциального (маликенового) заряда. С целью предотвращения формирования ковалентных связей между ближайшими соседями атома ПГ, к которому присоединяется C=O группа, и самой C=O группой к этим соседним углеродным атомам ковалентно присоединялись атомы водорода. Функционализация прекращалась, когда все атомы по краям отверстия суперъячейки были насыщены C=O группами. Для суперъячейки с диаметром отверстия 1 нм насыщение наступало при присоединении 6 функциональных групп (рис. 1, а), для суперъячейки с диаметром отверстия 1.5 нм – при присоединении 9 групп (рис. 1, б) и для суперъячейки с диаметром отверстия 2 нм – при присоединении 12 групп (рис. 1, в) при фиксированной ширине шейки.

## 3. Результаты и их обсуждение

В ходе моделирования поэтапной функционализации отверстия ПГ проводилась оценка термодинамической устойчивости системы

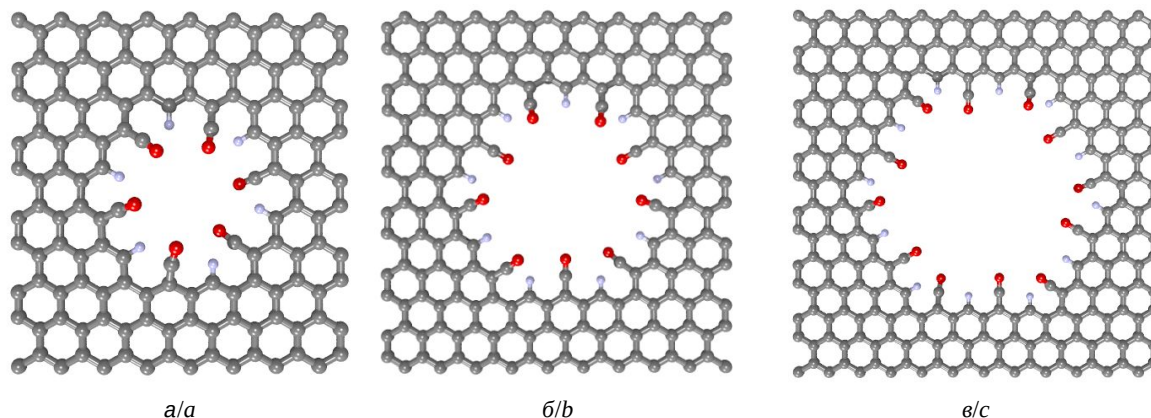


Рис. 1. Суперъчейки тонких плёнок перфорированного графена с присоединёнными С=О группами и атомами водорода с диаметрами отверстий 1 (а), 1.5 (б) и 2 нм (в). Ширина шейки  $W_x = 0.74$  нм,  $W_y = 0.99$  нм (цвет онлайн)

Fig. 1. Supercells of thin films of perforated graphene with attached C=O groups and hydrogen atoms with hole diameters of 1 (a), 1.5 (b) and 2 nm (c). Neck width  $W_x = 0.74$  nm,  $W_y = 0.99$  nm (color online)

«ПГ + С=О группы + водород» по величине энергии связи  $E_b$ :

$$E_b = E_{gr+nC=O+mH} - E_{gr} - E_{nC=O} - E_{mH}, \quad (1)$$

где  $E_{gr}$  – энергия нефункционализованного ПГ,  $E_{gr+nC=O+mH}$  – энергия суперъчейки ПГ с присоединёнными С=О группами и атомами водорода,  $E_{nC=O}$  – энергия С=О групп ( $n$  – число функциональных групп),  $E_{mH}$  – энергия атомов водорода ( $m$  – число атомов водорода). Результаты расчётов показали, что  $E_b$  изменяется: в интервале от  $-1.3$  до  $-12.7$  эВ при диаметре отверстия 1 нм; в интервале от  $-1.6$  до  $-12.8$  эВ при диаметре отверстия 1.5 нм и в интервале от  $-1.7$  до  $-7.3$  эВ при диаметре отверстия 2 нм. Полученные отрицательные значения энергии связи  $E_b$  свидетельствуют о термодинамической устойчивости системы «ПГ + С=О группы + водород» на каждом этапе функционализации поверхности ПГ.

Далее проводился анализ электронного строения функционализированных плёнок ПГ с отверстиями разного диаметра на основе результатов расчёта их зонной структуры. Рассчитанные энергетические диаграммы плёнок ПГ с полностью насыщенными атомами по краям отверстий показаны на рис. 2 для интервала энергии вблизи уровня Ферми. Хорошо видно, что плёнки ПГ с диаметром отверстия 1.5 нм (рис. 2, б) характеризуются почти нулевой щелью ( $E_g = 0.02$  эВ) между валентной зоной и зоной проводимости, в то время как плёнки ПГ с диаметрами отверстия 1 нм (рис. 2, а) и 2 нм (рис. 2, в) имеют заметную энергетическую щель в 0.27 и 0.33 эВ соответственно.

Для установления характера влияния С=О групп и атомов водорода на электронное строение плёнок ПГ с разными диаметрами отверстий на рис. 3 приведены энергетические зонные диаграммы вблизи уровня Ферми для чистых плёнок ПГ. Сравнение зонных диаграмм на рис. 2 и 3 демонстрирует, что наличие присоединённых С=О групп и атомов водорода оказывает наибольшее влияние на размер энергетической щели в случае плёнок ПГ с диаметром отверстия 1 нм. Для чистого ПГ с таким диаметром отверстия величина  $E_g$  составляет 0.13 эВ. Следовательно, наличие С=О групп и атомов водорода приводит к расширению энергетической щели ПГ почти вдвое по сравнению с чистым ПГ. В случае плёнок ПГ с двумя другими диаметрами отверстий (1.5 нм и 2 нм) размер энергетической щели практически не изменяется при полном насыщении атомов по краям отверстий ПГ. Для плёнок чистого ПГ с диаметрами 1.5 нм и 2 нм размер энергетической щели составил 0.02 и 0.31 эВ соответственно. В то же время для всех рассмотренных плёнок ПГ с разными диаметрами отверстий наблюдается смещение положения уровня Ферми по оси энергий вверх (в направлении 0 эВ) при функционализации, что свидетельствует об изменении электронной структуры ПГ, заключающемся в расширении валентной зоны. В зависимости от диаметра отверстия величина смещения уровня Ферми количественно различается, но в каждом из рассмотренных случаев она составила более 1 эВ: при диаметре отверстия 1 нм наблюдается сдвиг уровня Ферми с  $-5.16$  до  $-4.26$  эВ, в двух других случаях – с  $-5.47$  до  $-4.09$  эВ (диаметр отверстия

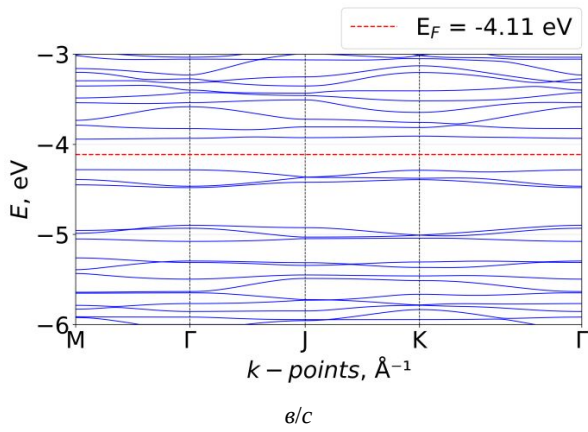
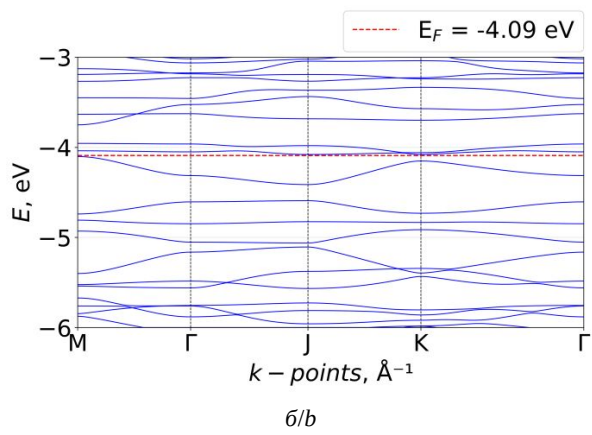
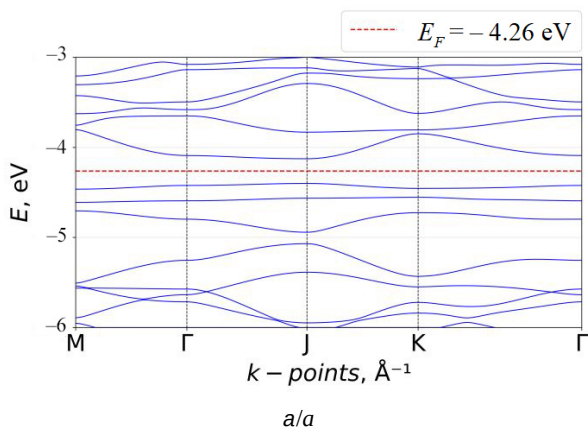


Рис. 2. Энергетические зонные диаграммы перфорированного графена с присоединёнными С=О группами и атомами водорода вблизи уровня Ферми (красная горизонтальная пунктирная линия) с диаметром: 1 нм (а), 1.5 нм (б), 2 нм (в) (цвет онлайн)

Fig. 2. Energy band diagrams of perforated graphene with attached C=O groups and hydrogen atoms near the Fermi level (marked with a red horizontal dotted line): with a hole diameter: of 1 nm (a), of 1.5 nm (b), of 2 nm (c) color online

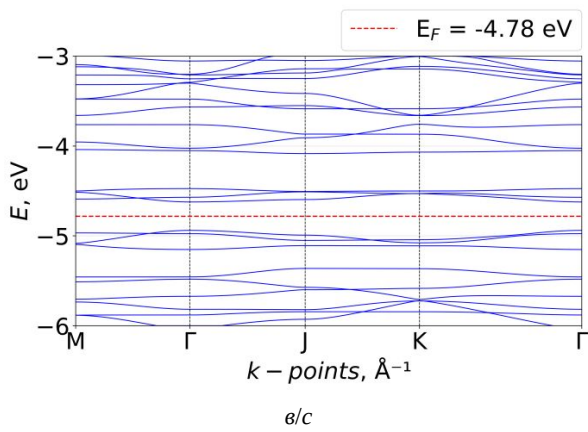
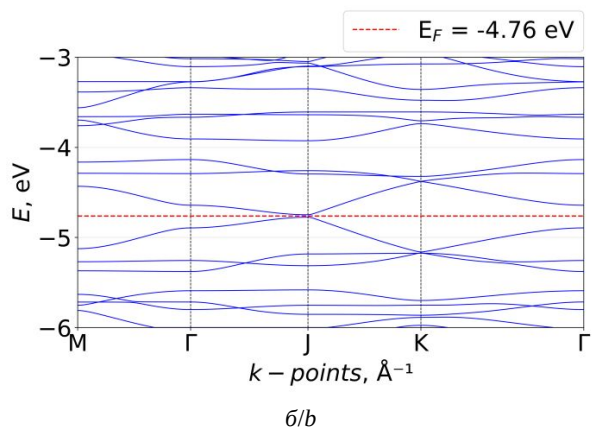
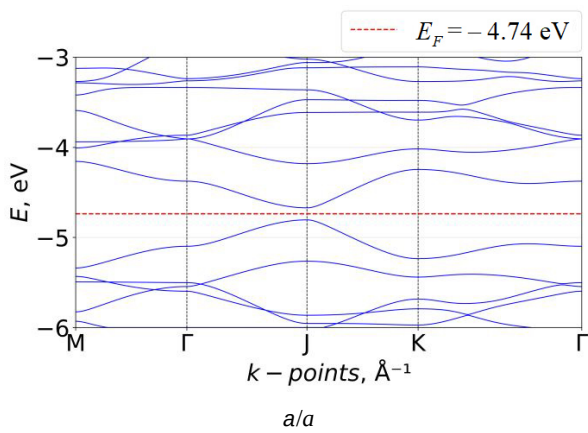


Рис. 3. Энергетические зонные диаграммы чистого перфорированного графена вблизи уровня Ферми (красная горизонтальная пунктирная линия) с диаметром отверстия: 1 нм (а), 1.5 нм (б), 2 нм (в) (цвет онлайн)

Fig. 3. Energy band diagrams of pure perforated graphene near the Fermi level (marked with a red horizontal dotted line): with a hole diameter: of 1 nm (a), of 1.5 nm (b), of 2 nm (c) color online



1.5 нм) и с  $-5.69$  до  $-4.11$  эВ (диаметр отверстия 2 нм).

Для объяснения наблюдаемых изменений в электронном строении плёнок ПГ в процессе функционализации был выполнен анализ трансфера заряда в системе «ПГ + С=О группы + водород» на основе рассчитанных распределений парциальных (маллиkenовых) зарядов. Распределения парциального заряда для каждой из рассматриваемых суперъячеек ПГ с полностью насыщенными атомами по краям отверстий приведены на рис. 4. Анализ показал, что ковалентное присоединение С=О групп и атомов водорода к поверхности ПГ индуцирует трансфер заряда на атомы ПГ с функциональных групп и водорода, что приводит к увеличению избыточного положительного заряда в системе «ПГ + С=О группы + водород». С ростом диаметра отверстия величина парциального заряда, перешедшего на атомы ПГ, возрастает, поскольку максимальное число присоединяемых к атомам по краям отверстия функциональных групп и атомов водорода возрастает с 6 до 12. Для суперъячейки ПГ с диаметром отверстия 1 нм суммарная величина отданного на ПГ заряда составила  $1.6|e|$ , для суперъячейки ПГ с диаметром отверстия 1.5 нм –  $2.51|e|$  и для суперъячейки ПГ с диаметром отверстия 2 нм –  $3.37|e|$ .

Была также определена доля парциально-го заряда, переданного каждой функциональной группой и каждым атомом водорода в от-

дельности на каждом этапе функционализации поверхности ПГ. Установлено, что величина парциального заряда, переданного с атомов С=О групп на ПГ, в 2–5 раз больше (с увеличением числа присоединяемых функциональных групп), чем величина парциального заряда, переданного на ПГ атомами водорода.

Таким образом, трансфер заряда с С=О групп и атомов водорода на ПГ обуславливает отмеченные выше изменения электронного строения (возрастание величины переданного на ПГ парциального заряда), в том числе тот факт, что уровень Ферми функционализированного ПГ изменяется в более широких пределах с увеличением диаметра отверстия ПГ.

### Заключение

Квантовым методом SCC DFTB было проведено исследование влияния диаметра отверстия на электронно-энергетические характеристики и электронные свойства тонких плёнок ПГ, поверхность которых функционализирована карбонильными группами и атомами водорода. Основываясь на результатах расчёта энергии связи, было установлено, что для всех рассмотренных диаметров отверстия (1, 1.5 и 2 нм) процесс ковалентной функционализации поверхности ПГ является энергетически выгодным, и система «ПГ + С=О группы + атомы водорода» характеризуется высокой термодинамической устойчивостью.

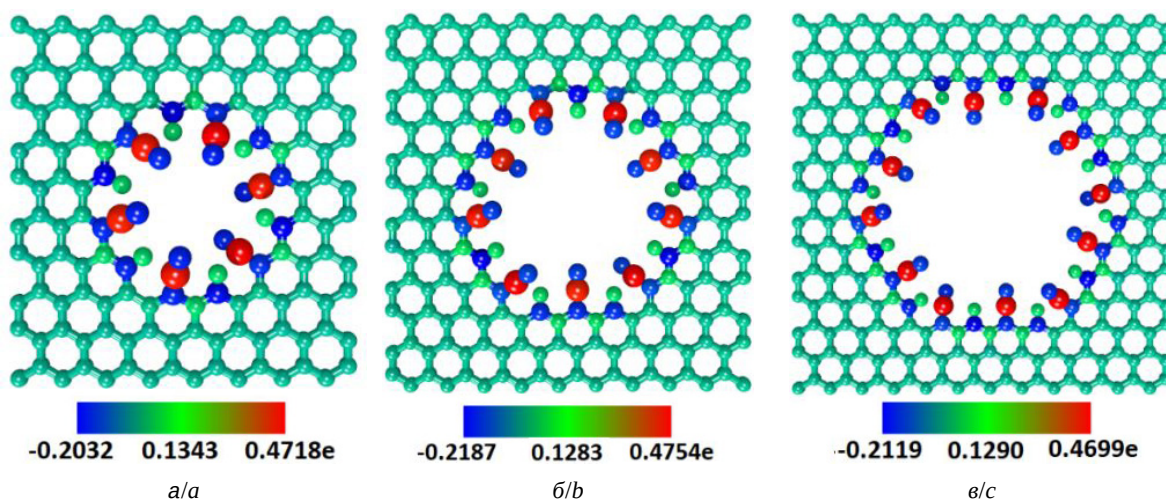


Рис. 4. Распределение парциального (маллиkenового) заряда по атомам суперъячейки перфорированного графена, функционализированного С=О группами и атомами водорода с диаметром отверстия: 1 нм (а), 1.5 нм (б), 2 нм (в) (цвет онлайн)

Fig. 4. Distribution of partial (mulliken) charge over the atoms of the supercell of perforated graphene functionalized with C=O groups and hydrogen atoms: with a hole diameter: of 1 nm (a), of 1.5 nm (b), of 2 nm (c) (color online)



Анализ рассчитанных распределений парциального (маллиkenового) заряда и энергетических зонных диаграмм позволил выявить следующие физические закономерности: ковалентное присоединение С=О групп и атомов водорода к атомам по краям отверстия ПГ приводит к смещению уровня Ферми ПГ вверх по оси энергий (в направлении дна зоны проводимости) и увеличению избыточного положительного заряда в системе «ПГ + С=О группы + водород». Показана высокая чувствительность размера энергетической щели плёнок ПГ к функционализации в случае диаметра отверстия 1 нм: по сравнению с чистой поверхностью плёнок ПГ щель увеличилась вдвое.

Выявленные закономерности открывают предпосылки для создания на основе функционализированного кислород-содержащими группами ПГ различных полупроводниковых устройств с настраиваемыми электронно-энергетическими характеристиками.

### Список литературы / References

1. Wang D., Dou Y., Zhang X., Bi K., Panneerselvam I. R., Sun H., Jiang X., Dai R., Song K., Zhuang H., Lu Y., Wang Y., Liao Y., Ding L., Nian Q. Manufacturing and applications of multi-functional holey two-dimensional nanomaterials – A Review. *Nano Today*, 2024, vol. 55, art. 102162. <https://doi.org/10.1016/j.nantod.2024.102162>
2. Nazarian-Samani M., Haghghat-Shishavan S., Nazarian-Samani M., Kashani-Bozorg S. F., Ramakrishna S., Kim K.-B. Perforated two-dimensional nanoarchitectures for next-generation batteries: Recent advances and extensible perspectives. *Progr. Mater. Sci.*, 2021, vol. 116, art. 100716. <https://doi.org/10.1016/j.pmatsci.2020.100716>
3. Bai J., Zhong X., Jiang S., Duan X. Graphene nanomesh. *Nature Nanotechnology*, 2010, vol. 5, pp. 190–194. <https://doi.org/10.1038/nnano.2010.8>
4. Yang J., Ma M., Li L., Zhang Y., Huang W., Dong X. Graphene nanomesh: New versatile materials. *Nanoscale*, 2014, vol. 6, pp. 13301–13313. <https://doi.org/10.1039/C4NR04584J>
5. Rajput N. S., Zadjali S. A., Gutierrez M., Esawi A. M. K., Teneiji M. A. Synthesis of holey graphene for advanced nanotechnological applications. *RSC Adv.*, 2021, vol. 11, pp. 27381–27405. <https://doi.org/10.1039/d1ra05157a>
6. Ma R., Zhou Y., Bi H., Yang M., Wang J., Liu Q., Huang F. Multidimensional graphene structures and beyond: Unique properties, syntheses and applications. *Progr. Mater. Sci.*, 2020, vol. 113, art. 100665. <https://doi.org/10.1016/j.pmatsci.2020.100665>
7. Lin Y., Liao Y., Chen Zh., Connell J. W. Holey graphene: A unique structural derivative of graphene. *Mater. Res. Lett.*, 2017, vol. 5, pp. 209–234. <https://doi.org/10.1080/21663831.2016.1271047>
8. Liu T., Zhang L., Cheng B., Hu X., Yu J. Holey Graphene for Electrochemical Energy Storage. *Cell Reports Phys. Sci.*, 2020, vol. 1, art. 100215. <https://doi.org/10.1016/j.xcrp.2020.100215>
9. Yang C.-H., Huang P.-L., Luo X.-F., Wang C.-H., Li C., Wu Y.-H., Chang J.-K. Holey Graphene Nanosheets with Surface Functional Groups as High-Performance Supercapacitors in Ionic-Liquid Electrolyte. *Chem. Sus. Chem.*, 2015, vol. 8, pp. 1779–1786. <https://doi.org/10.1002/cssc.201500030>
10. Sammed K. A., Pan L., Asif M., Usman M., Cong T., Amjad F., Imran M. A. Reduced holey graphene oxide film and carbon nanotubes sandwich structure as a binder-free electrode material for supercapacitor. *Sci. Rep.*, 2020, vol. 10, art. 2315. <https://doi.org/10.1038/s41598-020-58162-9>
11. Su F., Zheng S., Liu F., Zhang X., Su F., Wu Z.-S. Nitrogen-doped holey graphene nanoscrolls for high-energy and high-power supercapacitors. *Chin. Chem. Lett.*, 2021, vol. 32, pp. 914–917. <https://doi.org/10.1016/j.ccl.2020.07.025>
12. Jeong J. H., Lee G.-W., Kim Y. H., Choi Y. J., Roh K. C., Kim K.-B. A holey graphene-based hybrid supercapacitor. *Chem. Eng. J.*, 2019, vol. 378, art. 122126. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2019.122126>
13. Liu G., Jin W., Xu N. Graphene-based membranes. *Chem. Soc. Rev.*, 2015, vol. 44, pp. 5016–5030. <https://doi.org/10.1039/C4CS00423J>
14. Kim M., Safron N. S., Han E., Arnold M. S., Gopalan P. Fabrication and Characterization of Large-Area, Semiconducting Nanoperforated Graphene Materials. *Nano Lett.*, 2010, vol. 10, pp. 1125–1131. <https://doi.org/10.1021/nl9032318>
15. Liang X., Jung Y. S., Wu S., Ismach A., Olynick D. L., Cabrini S., Bokor J. Formation of Bandgap and Subbands in Graphene Nanomeshes with Sub-10 nm Ribbon Width Fabricated via Nanoimprint Lithography. *Nano Lett.*, 2010, vol. 10, pp. 2454–2460. <https://doi.org/10.1021/nl100750v>
16. Sun Q., Dai M., Hong J., Feng S., Wang C., Yuan Z. Graphene Nanopore Fabrication and Applications. *Int. J. Mol. Sci.*, 2025, vol. 26, art. 1709. <https://doi.org/10.3390/ijms26041709>
17. Esfandiari A., Kybert N. J., Dattoli E. N., Han G. H., Lerner M. B., Akhavan O., Irajizad A., Johnson A. T. C. DNA-decorated graphene nanomesh for detection of chemical vapors. *Applied Physics Letters*, 2013, vol. 103, art. 183110. <https://doi.org/10.1063/1.4827811>
18. Chen Z., Zhang Y., Yang Y., Shi X., Zhang L., Jia G. Hierarchical nitrogen-doped holey graphene as sensitive electrochemical sensor for methyl parathion detection. *Sens. Actuators B Chem.*, 2021, vol. 336, art. 129721. <https://doi.org/10.1002/cssc.201501169>
19. Oswald W., Wu Z. Energy gaps in graphene nanomeshes. *Phys. Rev. B*, 2012, vol. 85, art. 115431. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.85.115431>
20. Tang G., Zhang Z., Deng X., Fan Z., Zeng Y., Zhou J. Improved scaling rules for bandgaps in graphene nanomeshes. *Carbon*, 2014, vol. 76, pp. 348–356. <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2014.04.086>



21. Barkov P. V., Slepchenkov M. M., Glukhova O. E. Sensor properties of thin films of perforated graphene functionalized with COOH groups: DFTB study. *Izvestiya of Saratov University. Physics*, 2025, vol. 25, iss. 4, pp. 485–494 (in Russian). <https://doi.org/10.18500/1817-3020-2025-25-4-485-494>
22. Barkov P. V., Slepchenkov M. M., Glukhova O. E. Influence of metric parameters on the electrical conductivity properties of thin films of perforated graphene functionalized with carboxyl groups. *Technical Physics*, 2025, vol. 95, iss. 5, pp. 954–960 (in Russian). <https://doi.org/10.61011/JTF.2025.05.60286.464-24>
23. Elstner M., Porezag D., Jungnickel G., Elsner J., Haugk M., Frauenheim Th., Suhai S., Seifert G. Self-consistent-charge density-functional tight-binding method for simulations of complex materials properties. *Phys. Rev. B*, 1998, vol. 58, pp. 7260–7268. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.58.7260>
24. Aradi B., Hourahine B., Frauenheim Th. DFTB+, A sparse matrix-based implementation of the DFTB method. *J. Phys. Chem. A*, 2007, vol. 111, iss. 26, pp. 5678–5684. <https://doi.org/10.1021/jp070186p>
25. Kohn W. Nobel Lecture: Electronic structure of matter – wave functions and density functionals. *Reviews of Modern Physics*, 1999, vol. 71, iss. 5, pp. 1253–1266. <https://doi.org/10.1103/revmodphys.71.1253>
26. Winter A., Ekinci Y., Götzhäuser A., Turchanin A. Freestanding carbon nanomembranes and graphene monolayers nanopatterned by EUV interference lithography. *2D Materials*, 2019, vol. 6, art. 021002. <https://doi.org/10.1088/2053-1583/ab0014>
27. Rabchinskii M. K., Saveliev S. D., Stolyarova D. Yu., Brzhezinskaya M., Kirilenko D. A., Baidakova M. V., Ryzhkov S. A., Shnitov V. V., Sysoev V. V., Brunkov P. N. Modulating nitrogen species via N-doping and post annealing of graphene derivatives: XPS and XAS examination. *Carbon*, 2021, vol. 182, pp. 593–604. <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2021.06.057>
28. Glukhova O. E., Barkov P. V. A new method for determining energetically favorable landing sites of carboxyl groups during the functionalization of graphene nanomesh. *Letters on Materials*, 2021, iss. 12, no. 4, pp. 392–396. <https://doi.org/10.22226/2410-3535-2021-4-392-396>

Поступила в редакцию 18.02.2026; одобрена после рецензирования 03.03.2026; принята к публикации 07.04.2026; опубликована 30.06.2026

The article was submitted 18.02.2026; approved after reviewing 03.03.2026; accepted for publication 07.04.2026; published 30.06.2026