

Компьютерное моделирование влияния вакансий серы на электронную структуру MoS₂

ВЦ ДВО РАН: Чибисов А.Н. Булах С.С.

ИФ СО РАН: Федоров А.С.

Цели исследования

В данном исследовании использовались вычислительные методы для анализа:

- Изменений зонной структуры
- Изменений ширины запрещенной зоны
- Смещения уровня Ферми
- Распределения зарядовой плотности
- Распределения потенциала
- Изменение эффективной массы носителей заряда

Применяемые методы

- Исследуемый материал: Дисульфид молибдена (MoS_2).
- Методы: Теория функционала плотности (DFT), метод псевдопотенциала.
- Программное обеспечение: VASP с учетом спин-орбитального взаимодействия и неколлинеарной намагниченности.

Объект исследования

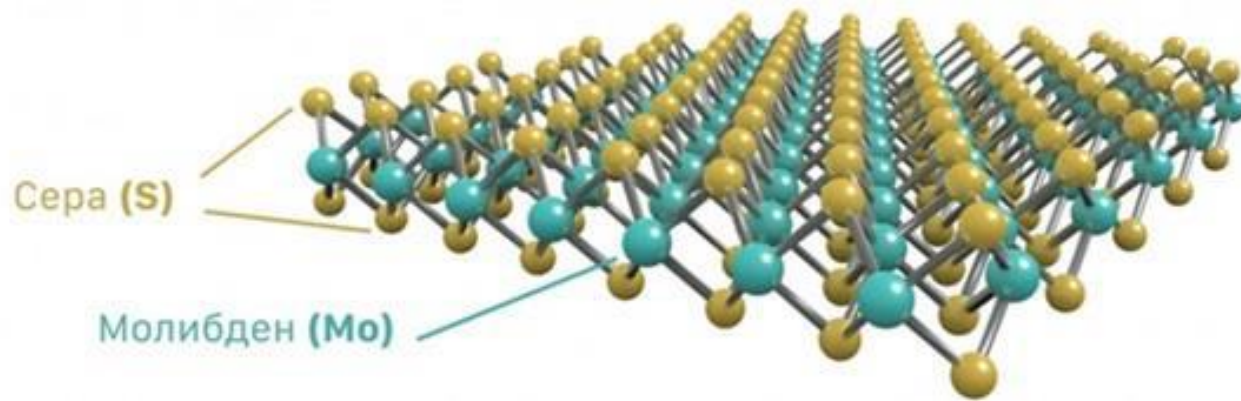


Рисунок 1. Дисульфид молибдена

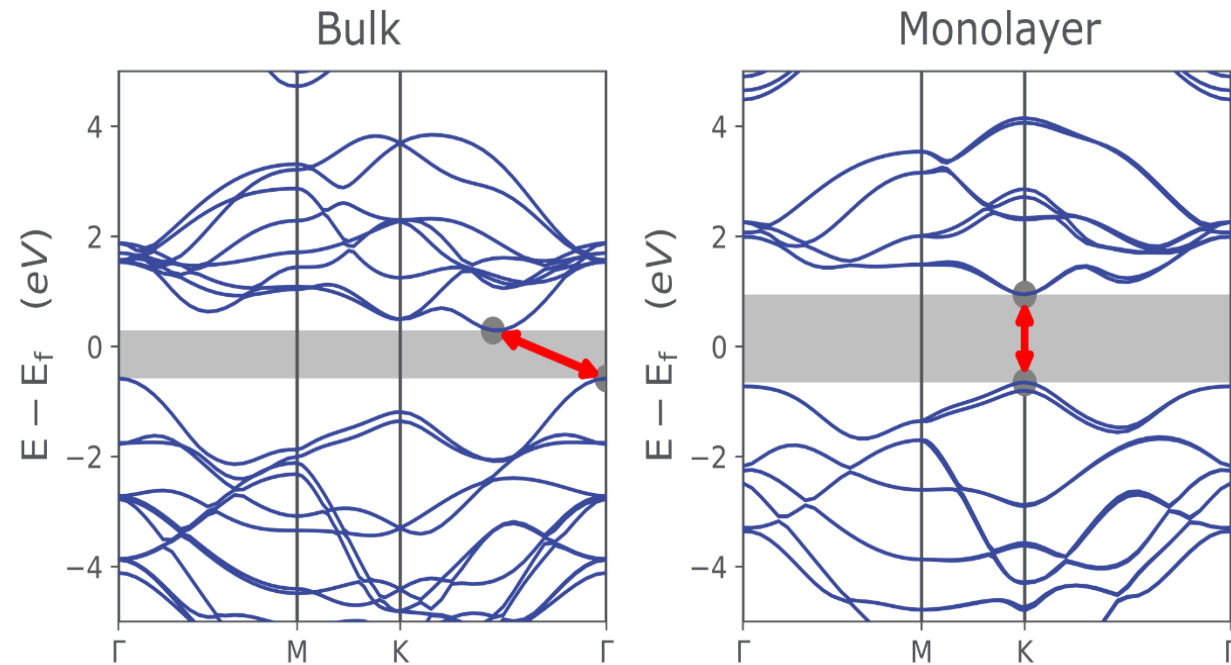


Рисунок 2. Зонная структура объемной и монослойной структуры MoS₂

Образование вакансии серы

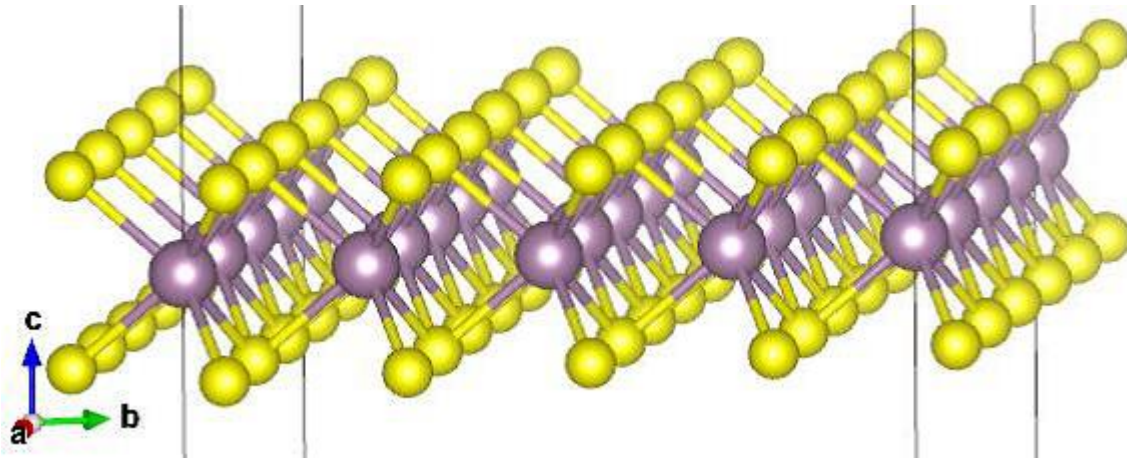


Рисунок 3. Монослой MoS_2

Mo – 16
S – 32

Mo – 16
S – 31

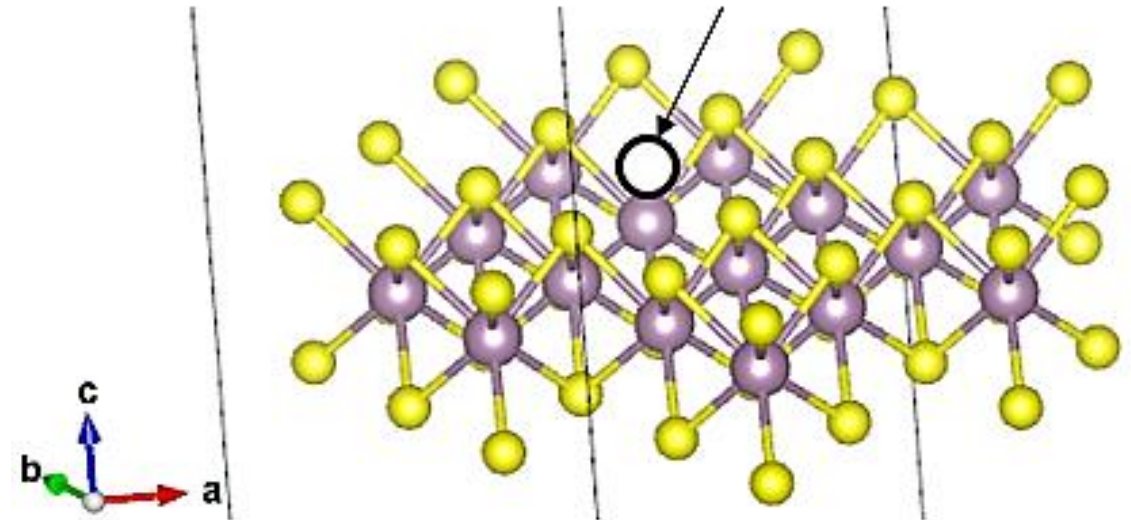


Рисунок 4. Монослой MoS_2 с вакансией серы

Изменение зонной структуры MoS₂

Параметр	Объемная	Монослой	С вакансией серы
Запрещенная зона (эВ)	0.83	1.79	1.16
Уровень валентной зоны (эВ)	7.97	-1.47	-1.68
Уровень зоны проводимости (эВ)	8.81	0.32	-0.52
Энергия Ферми (эВ)	8.08	-1.48	-1.56

Распределение зарядовой плотности и электростатического потенциала

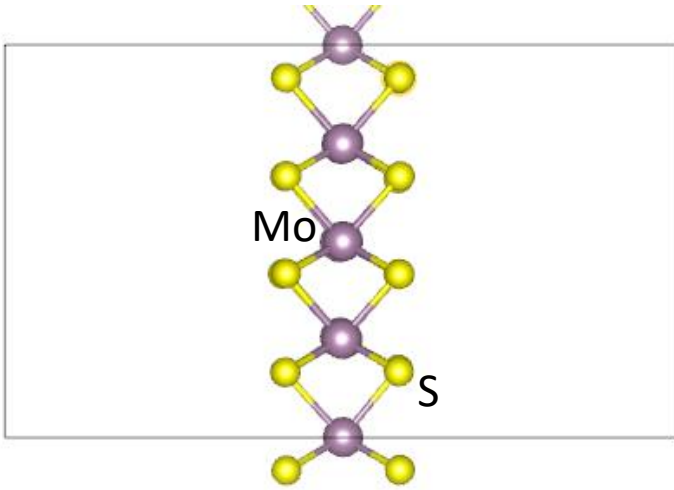


Рисунок 5. Поверхности в монослое

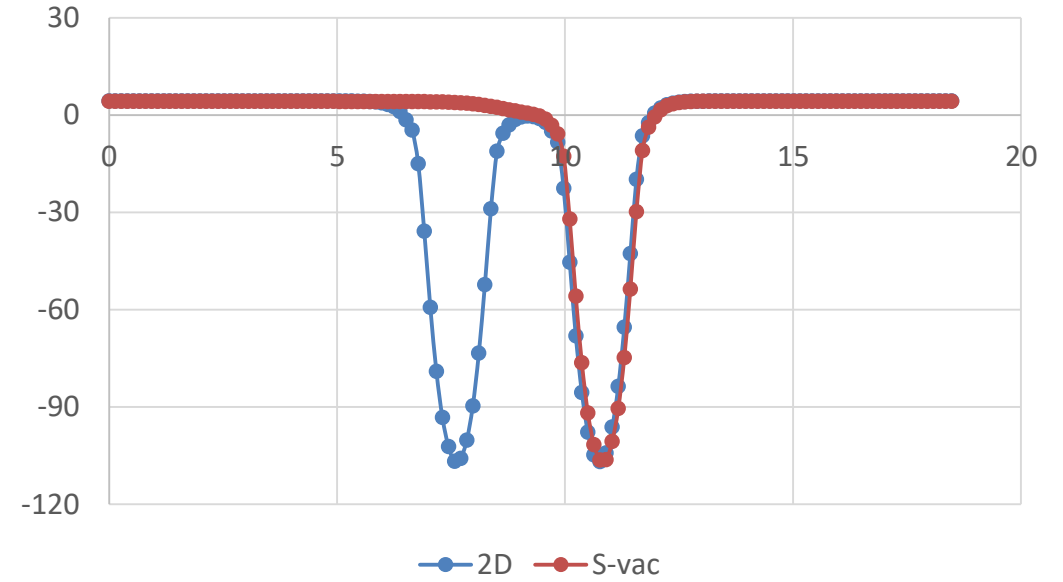


Рисунок 6. Распределение электростатического потенциала

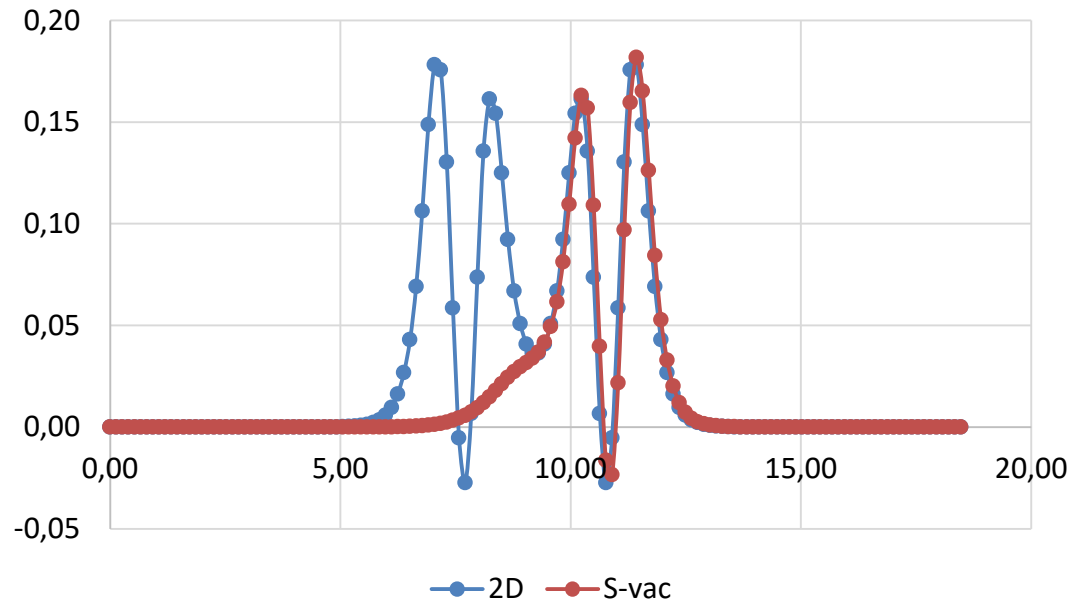


Рисунок 7. Распределение зарядовой плотности

Эффективная масса носителей заряда в монослое MoS₂

Путь по k-точкам	Масса электронов	Масса дырок
Монослой		
K->G	0.483	-0.556
K->M	0.530	-0.679
Монослой с вакансией серы		
K->G	6.56	6.031
K->M	3.973	126.663

Выводы и заключения

- **Монослой MoS₂**: увеличение ширины запрещенной зоны до 1,8 эВ по сравнению с объемной структурой
- **Вакансия серы**: уменьшение ширины запрещенной зоны до 1,2 эВ
- Плотность заряда и потенциал смещаются к поверхности с вакансией серы
- При образовании вакансии серы в монослое эффективная масса носителей заряда увеличивается

Полученные данные важны для изучения дефектов в двумерных полупроводниках. Эти параметры могут быть использованы для разработки наноустройств и квантовых технологий на их основе.

Спасибо за внимание