

AB-INITIO МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННЫХ СВОЙСТВ ДВУХМЕРНОГО КРИСТАЛЛА MoS_2 КАК ПЕРСПЕКТИВНОГО МАТЕРИАЛА НАНОЭЛЕКТРОНИКИ

О. А. КОЗЛОВА, В. В. НЕЛАЕВ

Ab initio simulation results of two-dimensional (2D) molybdenum disulfide (MoS_2) electronic properties are presented. Electron density and band structure were calculated. It was shown that band structures of $\langle 010 \rangle$ and $\langle 100 \rangle$ 2D MoS_2 are identical. Band structure in the $\langle 001 \rangle$ direction is marked by a direct-gap transition and no by additional wave functions absence. The band structure along that direction is similar to graphene.

Ключевые слова: дисульфид молибдена, двумерные системы, *ab-initio* моделирование

Актуальность исследования электронных характеристик двухмерного соединения MoS_2 определяется перспективами его применения в качестве материала структурных элементов приборов микро-, нано-, оптоэлектроники, солнечных элементов, а также возможностями проявления уникальных физических свойств, подобных интенсивно исследуемым сегодня во всем мире свойствам двумерной углеродной структуры – графена.

В качестве инструмента моделирования использовался программный комплекс VASP [1, с. 94]. Этот пакет предназначен для моделирования атомно-молекулярных и электронно-ядерных систем методами квантовой механики и молекулярной динамики. Взаимодействие между ионами и электронами моделируемой системы описывается с помощью псевдопотенциального подхода или метода присоединенных плоских волн (PAW-метода).

Моделирование структуры проведено методом теории функционала от электронной плотности в приближении PBE (Perdew-Burke-Ernzerhof) [2, с. 1758]. Для интеграции зоны Брютлиэна была выбрана сетка $15 \times 15 \times 1$ k-точек во всех направлениях 2D структуры MoS_2 .

Отметим, что в направлении $\langle 001 \rangle$ 2D структуры MoS_2 произошло перераспределение электронов и расщепление электронных состояний, что вызвало смещение положения уровня Ферми в сторону валентной зоны. Однако можно добавить, что небольшие пики возле уровня Ферми на графике электронной плотности в направлении $\langle 001 \rangle$ 2D структуры MoS_2 , представляющие собой примесные центры, также принимают активное участие в переносе носителей заряда, несмотря на преобладающие переходы. Таким образом, двумерный молибденит в направлении $\langle 001 \rangle$ имеет элементы собственного типа проводимости.

Присутствует большое количество схожих элементов с объемной структурой MoS_2 [3, с. 113]. Особенно схожа зонная структура в направлениях $\langle 010 \rangle$ и $\langle 100 \rangle$: дополнительные волновые функции и непрямозонный переход. Это объясняется симметричным расположением атомов относительно граней ячейки и однотипностью связей между ними. В направлениях $\langle 010 \rangle$ и $\langle 100 \rangle$ двумерной структуры MoS_2 образовались дополнительные разрешенные состояния для электронов в валентной зоне и в зоне проводимости, вызванные разрывом связей на поверхности ячейки. Это привело к уменьшению ширины запрещенной зоны и увеличению спектров обменного взаимодействия. На зонной диаграмме структуры в направлении $\langle 001 \rangle$ переход прямозонный и отсутствуют дополнительные волновые функции, что объясняется тем, что разорванные связи на поверхности ячейки могли замкнуться.

Т. о., наибольший интерес представляет двумерный слой соединения по направлению $\langle 001 \rangle$. Переход носителей заряда в этом направлении прямозонный, что открывает новые возможности использования данного двумерного соединения в сенсорике, оптике и нанoeлектронике. Важно отметить, что появляется возможность варьирования ширины запрещенной зоны, изменяя направление среза двумерной поверхности соединения.

Литература

1. *Kresse G., Furthmuller J.* VASP the GUIDE // University of Vienna. (2007).
2. *Kresse G., Joubert J.* From ultrasoft pseudopotentials to the projector augmented-wave method // Phys. Rev. B 59, 1758 (1999).
3. *Gulay A., Kozlova O., Levchenko N., Nelayev V.* Y₂O₃ and MoS₂ electronic properties simulation // MEMSTECH'2011, 113 (2011).