

РАСЧЕТ ЭЛЕКТРОННОГО СПЕКТРА ГЕТЕРОСТРУКТУРЫ MoS₂/WS₂

Муксунов Н.Я.¹

¹) Северо-Восточный Федеральный университет им. М.К. Аммосова,
Белинского 56, Якутск, Россия
E-mail: muksunov97@mail.ru

STRUCTURAL AND ELECTRONIC PROPERTIES OF MoS₂/WS₂ HETEROSTRUCTURE

Muksunov N.Ya.¹

¹) North-Eastern Federal University, Belinsky 56, 677000 Yakutsk, Russia

In this work, based on the density functional theory, we investigate the structural and electronic properties of the MoS₂/WS₂ heterostructure.

В последнее время исследования электронных и оптоэлектронных устройств на основе монослоя MoS₂, получили дальнейшее развитие по следующим причинам. Во-первых, было обнаружено, что монослой MoS₂ имеет прямую запрещенную зону 1,8 эВ с сильной фотолюминесценцией. Во-вторых, на основе монослоя MoS₂ были изготовлены полевые транзисторы с высокой подвижностью заряда. В-третьих, монослой MoS₂ имеет запрещенную зону с двумя впадинами и сильной спин-долинной связью. Все это открывает новые возможности в области долинотроники. Другой перспективный материал – монослой WS₂, который впервые получен в работе и обладает свойствами, близкими к свойствам монослоя MoS₂. Все вышесказанное, естественно, побуждает исследовать электронные свойства многослойных дихалькогенидов переходных металлов.

Появление многослойных дихалькогенидов переходных металлов в качестве новых двумерных полупроводниковых материалов открывает новые возможности для теоретических и экспериментальных исследований [1, 2]. Вертикально уложенные ван-дер-ваальсовы гетероструктуры дихалькогенидов переходных металлов являются основой для создания новых гетероструктур.

В данной работе на основе метода функционала плотности произведен расчет электронного спектра простейшего случая, бислоя MoS₂ и WS₂.

В качестве инструмента *ab initio* расчетов использовался пакет Quantum Espresso. *Ab initio* моделирование проводилось с использованием обобщенного градиентного приближения (GGA). Для ускорения сходимости в расчетах выбрана величина энергии «обрезания» $E_{\text{cut}} = 40 \text{ Ry}$. Во избежание взаимодействия между слоями расстояние между ними устанавливалось равным 20 Å.

Расчеты показали, что максимум валентной зоны бислоя MoS₂/WS₂ в точке Г сильно зависит от межслоевого взаимодействия в гетероструктуре. При увеличении расстояния между слоями MoS₂ и WS₂, гетероструктура MoS₂/WS₂

постепенно переходит из полупроводника с непрямой запрещенной зоной в полупроводник с прямой запрещенной зоной.

1. Shih C. K. Coherently strained in-plane atomic layer heterojunctions //NPG Asia Materials. – 2015. – Т. 7. – №. 12. – С. e231-e231.
2. Huang C. et al. Lateral heterojunctions within monolayer MoSe₂–WSe₂ semiconductors //Nature materials. – 2014. – Т. 13. – №. 12. – С. 1096-1101.. Nat. Mater. 13, 1096–1101 (2014).