

патенту № ТЈ 649 при свободно вращающемся и неподвижном сепараторе.

1,¹ – экспериментальные данные и функциональная зависимость исправления формы шаров от продолжительности обработки при свободно вращающемся сепараторе.;

2,¹ – экспериментальные данные и функциональная зависимость исправления формы шаров от продолжительности обработки при невращающемся сепараторе.

УДК 538.915

ИНЖИНИРИНГ ШИРИНЫ ЗАПРЕЩЕННОЙ ЗОНЫ В ДИХАЛЬКОГЕНИДАХ ТУГОПЛАВКИХ МЕТАЛЛОВ: АВ-INITIO МОДЕЛИРОВАНИЕ

Хорошко Л.С., Баглов А.В.

*Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники
Минск, Республика Беларусь*

Введение. Для создания новых электронных приборов и структур требуются перспективные материалы, среди которых часто выделяют графитоподобные гетерогенные двумерные полупроводниковые дихалькогениды и диселениды тугоплавких металлов – MoS_2 , MoSe_2 , WS_2 и WSe_2 . Данные халькогениды могут быть сформированы как в виде многослойных материалов с различным числом слоев, так и в виде монослоя, что позволяет применять их для изготовления, например, мало-мощных полевых транзисторов [1] и логических схем [2]. Используя сочетание монослоев WSe_2 и MoS_2 авторы [3] экспериментально продемонстрировали двухзатворную приборную структуру. Показано, что структура может вести себя как диод Эсаки с отрицательным дифференциальным сопротивлением, как обратный диод с большим туннельным током обратного смещения или прямой выпрямительный диод с низким током обратного смещения. Подобные двумерные слоистые системы могут быть созданы путем послойного наложения уже сформированных мономолекулярных слоев, а также путем их послойного химического осаждения из газовой фазы [4]. Однако совокупность имеющихся экспериментальных и теоретических данных не позволяет однозначно определить причины сужения запрещенной зоны в гетероструктуре $\text{WSe}_2/\text{MoS}_2$.

В данной работе представлены результаты моделирования объемного MoS_2 , объемного WSe_2 , комбинированной гетероструктуры $\text{WSe}_2/\text{MoS}_2$, проведенного с целью установления фундаментальных электронных свойств слоистых гетерогенных двумерных кристаллов MoS_2 и WSe_2 и их взаимного влияния на ширину запрещенной зоны – энергетического зазора между валентной зоной и зоной проводимости.

Методики проведения численного моделирования. Расчет зонной структуры, парциальной плотности электронных состояний (ППЭС) и

Литература

1. Патент № ТЈ 649, Республика Таджикистан. Устройство для центробежной абразивной обработки сферических поверхностей изделий из самоцветных камней / Т.А. Ходжаев, И.М. [и др.]. №1300825; заявл. 09.12.2013. опубл. 10.11.2014. – С. 15.

2. Ходжаев Т.А. Повышение эффективности процесса изготовления шаровидных изделий из самоцветных камней совершенствованием конструкторско-технологических решений. Дис. канд. технич. наук: 05.02.07 / Т.А. Ходжаев, 2018г.

релаксацию атомов проводили в рамках теории функционала плотности и теории псевдопотенциала, реализованных в пакете *OpenMX* [5 – 8]. В гетероструктуре $\text{WSe}_2/\text{MoS}_2$ атомы верхнего слоя (MoS_2) располагали над атомами нижнего слоя (WSe_2) со смещением друг относительно друга аналогично тому, как это имеет место в объемном материале. В расчете использовали приближение локальной плотности и учитывали следующие электроны атомов как валентные: $\text{W} - 5p, 5d$ и $6s$; $\text{Mo} - 4s, 4p, 4d$ и $5s$; $\text{Se} - 4s$ и $4p$; $\text{S} - 3s$ и $3p$. Энергию отсечки выбирали равной 150 Ry (Ридберг), критерий сходимости расчета самосогласованного поля составлял $5 \cdot 10^{-6} \text{ Ry}$, релаксацию атомов ячейки продолжали до тех пор, пока силы, действующие на атомы, становились менее $0,05 \text{ эВ/\text{Å}}$.

Результаты и обсуждение. Результаты моделирования приведены на рис. 1.

В объемных MoS_2 и WSe_2 расстояние между атомом металла и атомом халькогена составляло $2,402 \text{ \AA}$ и $2,531 \text{ \AA}$, соответственно. При формировании слоистого кристалла $\text{MoS}_2/\text{WSe}_2$ эти расстояния изменялись: связь $\text{Mo} - \text{S}$ увеличивалась до $2,438 \text{ \AA}$ при неизменной длине связи $\text{W} - \text{Se}$. Халькогениды молибдена и вольфрама в объемном состоянии представляют собой непрямозонные полупроводники с шириной запрещенной зоны $1,26 \text{ эВ}$ и $1,36 \text{ эВ}$ для MoS_2 и WSe_2 , соответственно (рис. 1 а, б). Слоистая гетероструктура $\text{WSe}_2/\text{MoS}_2$ демонстрирует значительно меньшую ширину запрещенной зоны, составляющую $0,22 \text{ эВ}$ и обладает первым прямым переходом в точке К.

На рис. 2 представлены парциальные плотности электронных состояний для структур MoS_2 , WSe_2 и $\text{WSe}_2/\text{MoS}_2$.

Проведенный анализ парциальных ПЭС для исследованных структур показал, что для халькогениды молибдена и вольфрама демонстрируют схожую тенденцию: зона проводимости форми-

руется в большей степени вкладом атомов металла, нежели халькогена, как и область высотой 1,2 эВ до потолка валентной зоны. Более глубокие уровни валентной зоны формируются уже большим вкладом атомов халькогена.

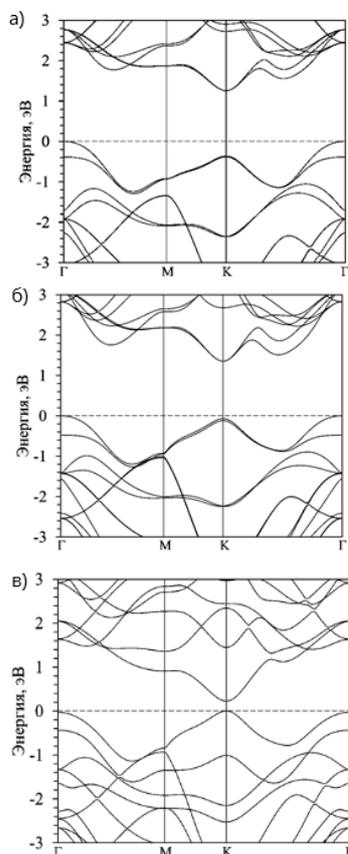


Рисунок 1 – Зонная структура халькогенидов тугоплавких металлов в приближении локальной плотности:

a – MoS₂; *b* – WSe₂; *в* – WSe₂/MoS₂

В случае гетероструктуры WSe₂/MoS₂ резкое сужение запрещенной зоны связано с перераспределением электронов атомов молибдена и серы, которые и образуют дно зоны проводимости (рис. 2, в).

Заключение. Проведено компьютерное моделирование электронных свойств объемных халькогенидов тугоплавких металлов MoS₂, WSe₂ и гетероструктуры MoS₂/WSe₂. Определены величины энергетических зазоров рассмотренных материалов: 1,26 эВ для MoS₂, 1,36 эВ для WSe₂ и 0,22 эВ для WSe₂/MoS₂. Установлено влияние вкладов отдельных атомов структур на состояния вблизи уровня Ферми. Показано, что резкое сужение запрещенной зоны в случае гетероструктуры обусловлено опусканием дна зоны проводимости за счет *s*- и *p*-электронов молибдена и серы. Учитывая наличие прямозонного характера гетероструктуры данный материал может быть использован для создания изделий фотоэлектроники как

твердотельная альтернатива микролометрам ближнего инфракрасного диапазона.

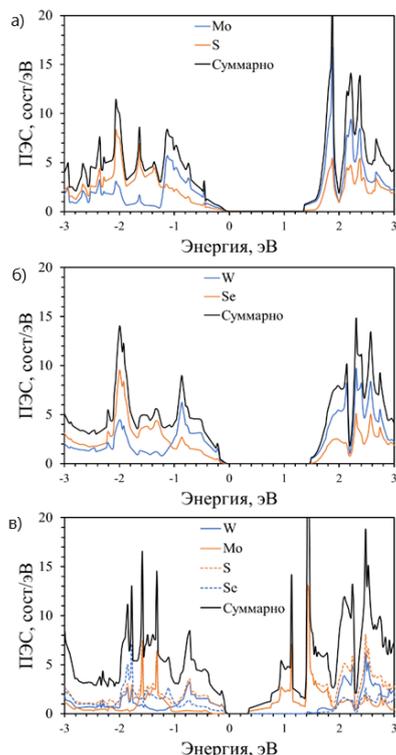


Рисунок 2 – Парциальные плотности электронных состояний (*s+p*) для исследуемых структур: *a* – MoS₂; *b* – WSe₂; *в* – WSe₂/MoS₂

Литература

1. Radisavljevic, B. Single-layer MoS₂ transistors / B. Radisavljevic, A. Radenovic, J. Brivio, V. Giacometti, A. Kis // Nature Nanotechnology. 2011. Vol. 6. – P. 147–150.
2. Radisavljevic, B. Integrated Circuits and Logic Operations Based on Single-Layer MoS₂ / B. Radisavljevic, A. Radenovic, M.B. Whitwick, A. Kis // ACS Nano. 2011. – Vol. 5. – no. 12. – P. 9934–9938.
3. Liu, H.F. CVD Growth of MoS₂-based Two-dimensional Materials / H.F. Liu, S.L. Wong, D.Z. Chi // Chemical Vapor Deposition. – 2015. – Vol. 211. – no. 10-11-12. – P. 241–259.
4. Roy, T. Dual-Gated MoS₂/WSe₂ van der Waals Tunnel Diodes and Transistors / T. Roy, M. Tosun, X. Cao, H. Fang, D.-H. Lien, P. Zhao, Y.-Z. Chen, Y.-L. Chueh, J. Gu, A. Javey // ACS Nano. 2015. – Vol. 9. – no. 2. – P. 2071–2079.
5. Ozaki T. Variationally optimized atomic orbitals for large-scale electronic structures / T. Ozaki // Phys. Rev. B. 2003. – Vol. 67. – no. 15. – P. 155108.
6. Ozaki T. Numerical atomic basis orbitals from H to Kr / T. Ozaki, H. Kino // Phys. Rev. B. 2004. – Vol. 69. – no. 19. – P. 195113.
7. Ozaki T. Efficient projector expansion for the ab initio LCAO method / T. Ozaki, H. Kino // Phys. Rev. B. 2005. – Vol. 72. – no. 4. – P. 045121.
8. Reproducibility in density functional theory calculations of solids / Kurt Lejaeghere [et al.] // Science. – 2016. – Vol. 351. – Iss. 6280. – P. ad3000.