**Влияние вакансионных дефектов и примесей на электронную структуру двумерных кристаллов MoS2, MoSе2, WS2 и WSe2**

**Кривошеева А. В.**

**Шапошников В. Л.**

**Борисенко В. Е.**

Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники

**Аннотация.** Исследованы возможности регулирования ширины запрещённой зоны у двумерных дихалькогенидов тугоплавких металлов MoS2, MoSe2, WS2 и WSe2 за счёт примесных атомов или вакансий. Рассмотрены случаи, когда атом кислорода замещает атом халькогена либо адсорбирован на поверхности. Замещающая примесь приводит к незначительному увеличению ширины запрещённой зоны, адсорбция атомов кислорода – к её уменьшению относительно нелегированного материала. Вакансия на месте атома халькогена приводит к изменению дисперсии зон и появлению дополнительных энергетических уровней

**Ключевые слова:** двумерные кристаллы, монослой, электронная структура, примесь, адсорбция, вакансия.

**Источник:** Доклады Национальной академии наук Беларуси. – 2016. - Т. 60. - № 6. - С. 48–53.