**Зонная структура и оптические свойства дихалькогенидов молибдена и вольфрама**

**А. В. Кривошеева**

**В. Л. Шапошников**

**В. Е. Борисенко**

Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники

2016 г.

**Источник:** Вестник Фонда фундаментальных исследований. - 2016. - № 3. - С. 41 - 48.

**Abstract/Аннотация.** Представлены результаты расчетов электронных зонных спектров и диэлектрической функции двумерных (дихалькогенидов переходных металлов (MoS2, MoSе2, WS2 и WSe2). Установлено, что исследуемые материалы в объёмном состоянии являются непрямозонными полупроводниками, в то время как монослои сульфидов становятся прямозонными полупроводниками со значением ширины запрещённой зоны 1,84 эВ (MoS2) и 1,97 эВ (WS2), при этом прямой переход сдвигается в точку K. Монослои диселенидов молибдена и вольфрама остаются непрямозонными полупроводниками с шириной запрещённой зоны 1,60 эВ и 1,66 эВ, соответственно. Проанализированы возможности создания электронных приборов на основе исследованных материалов.

**Ключевые слова:** непрямозонные полупроводники, диселениды молибдена, диселениды вольфрама, монослои, электронные зонные спектры.

**http://** <http://nasb.gov.by/rus/publications/vffr/>