

**ЭЛЕКТРОННЫЕ И ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА
ЛАТЕРАЛЬНЫХ ГЕТЕРОСТРУКТУР
ИЗ ДИСУЛЬФИДОВ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ,
СОДЕРЖАЩИХ ДЕФЕКТЫ И ПРИМЕСИ**

В. Л. Шапошников, А. В. Кривошеева, В. Е. Борисенко

Белорусский государственный университет
информатики и радиоэлектроники, г. Минск

Двумерные (2D) структуры атомарной толщины привлекают повышенное внимание благодаря своим уникальным физическим и химическим свойствам и рассматриваются в качестве основы полупроводниковых материалов для наноустройств нового поколения [1]. В последние годы существенно возросло количество теоретических и экспериментальных исследований таких материалов как графена, h-BN, фосфорена, дихалькогенидов переходных металлов. По сравнению с прочной ковалентной связью между слоями в традиционных полупроводниках, в 2D-материалах отдельные слои атомарной или молекулярной толщины связаны между собой слабыми силами Ван-дер-Ваальса, которые способствуют существованию стабильной многослойности в них.

Создание гетероструктур из нескольких 2D-материалов может приводить к изменению в них значений ширины запрещенной зоны, подвижности носителей заряда и коэффициента оптического поглощения света [2–4]. В зависимости от взаимного расположения отдельных слоев гетероструктуры могут быть классифицированы на вертикальные (ВГС) и латеральные (ЛГС). В ВГС слои определенного состава эпитаксиально располагают друг над другом. Они связаны сила-

ми Ван-дер-Ваальса. ЛГС образуются 2D кристаллическими блоками из материалов разного состава, расположенными в одной плоскости и связанными, как правило, более сильными ковалентными связями. Поскольку свойства ЛГС потенциально привлекательны для нанoeлектронных и оптоэлектронных применений, но остаются малоизученными, нами выполнено компьютерное моделирование структурных, электронных и оптических свойств ЛГС из 2D кристаллов сульфидов и селенидов молибдена и вольфрама методом псевдопотенциала с базисом на плоских волнах (программный пакет VASP [5]). Энергетические зонные диаграммы и оптические спектры рассчитывали с помощью метода линейаризованных присоединённых плоских волн (программный пакет WIEN2K [6]) на основе оптимизированных позиций атомов.

Установлено, что все рассмотренные бездефектные ЛГС являются прямозонными полупроводниковыми соединениями с шириной запрещенной зоны, лежащей в диапазоне от 1,4 до 1,7 эВ. Их зонные структуры представлены на рис. 1.

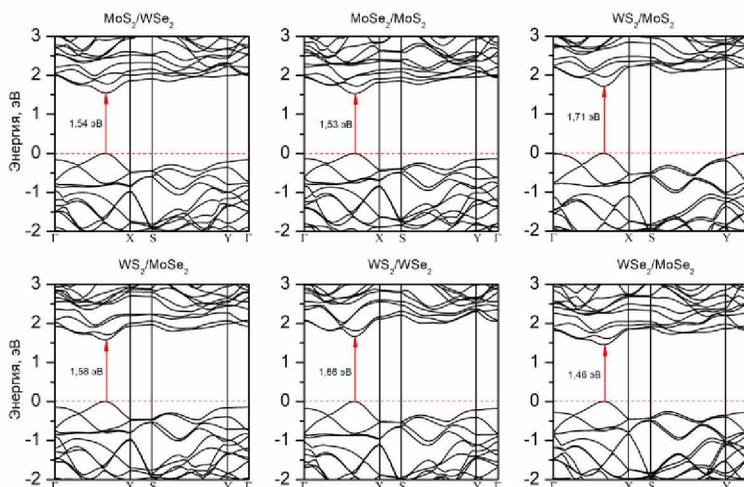


Рис. 1. Структура электронных энергетических зон в бездефектных ЛГС вдоль направлений высокой симметрии

Анализ орбитального состава волновых функций вблизи уровня Ферми показал, что у бездефектных ЛГС независимо от элементного состава валентная зона и зона проводимости образуются, в основном, *d*-электронами атомов металла и *p*-электронами атомов халькогена.

Исследовали влияние на устойчивость атомарных конфигураций и электронные свойства различных точечных дефектов – вакансии в позициях атомов металла или халькогена, замещение атомов халькогена атомами кислорода, замещение атомов халькогена атомами другого халькогена.

Концентрации этих дефектов составляли от 3 до 12 ат. % в зависимости от размера ЛГС. Установлено, что все рассмотренные гетероструктуры сохраняют свою термодинамическую стабильность. Замещение атомов халькогена атомами кислорода или другого халькогена слабо влияет на зонный спектр или ширину запрещенной зоны, в то время как появление вакансий в позициях атомов халькогена существенно снижает величину энергетического зазора в 1,5–2 раза в зависимости от типа ЛГС и позиции атома. При этом может происходить смещение экстремумов энергетических зон.

Моделирование оптических свойств ЛГС показало, что исследованные материалы обладают ярко выраженной анизотропией оптических функций для направлений поляризации света вдоль и поперек плоскости мономолекулярного слоя. Она проявляется в смещении положений основных пиков на спектре диэлектрической функции на 2–3 эВ в область больших энергий в зависимости от типа замещающей примеси, а также в изменении амплитуды этих пиков. Анализ спектральной зависимости мнимой части диэлектрической функции (ϵ_2), изучаемых ЛГС позволил установить, что наличие вакансионного дефекта на месте атома серы, а также замещение атома серы атомом кислорода приводят к резкому

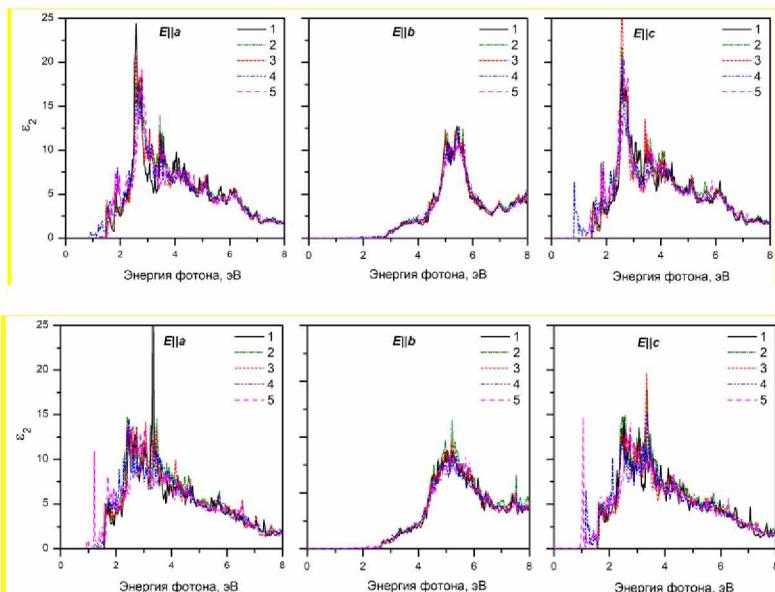


Рис. 2. Спектральная зависимость мнимой части диэлектрической функции ЛГС $\text{MoS}_2/\text{WSe}_2$ (вверху) и $\text{WS}_2/\text{MoSe}_2$ (внизу) вдоль основных направлений поляризации света: 1 – идеальная структура; 2 – структура с замещением атома S атомом O; 3 – структура с замещением атома Se атомом S; 4 – структура с вакансией по атому S; 5 – структура с вакансией по атому Se

возрастанию ϵ_2 при энергии, соответствующей первому прямому переходу, что свидетельствует о высоком значении силы осциллятора этого перехода (рис. 2).

В дальнейшем эта особенность может быть использована в оптоэлектронике для создания светоизлучающих элементов на базе латеральных гетероструктур из дисульфидов переходных металлов.

На рис. 3 представлены спектры усредненного коэффициента оптического поглощения двух ЛГС с различными видами дефектов. Очевидно, что в исследуемом диапазоне длин

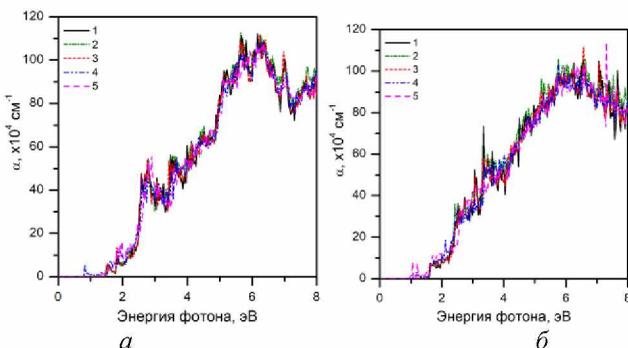


Рис. 3. Усредненный коэффициент оптического поглощения ЛГС $\text{MoS}_2/\text{WSe}_2$ (а) и $\text{WS}_2/\text{MoSe}_2$ (б): 1 – идеальная структура; 2 – структура с замещением атома S атомом O; 3 – структура с замещением атома Se атомом S; 4 – структура с вакансией по атому S; 5 – структура с вакансией по атому Se

волн кривые не претерпевают существенных изменений независимо от типа ЛГС или типа точечного дефекта. Значения коэффициента поглощения вблизи края собственного поглощения (рис. 3) оказываются больше 10^5 см^{-1} , что говорит о перспективах использования данных ЛГС в фотовольтаике для создания солнечных элементов.

Литература

1. Recent advances in ultrathin two-dimensional nanomaterials / C. Tan [et al.] // Chem. Rev. – 2017. – Vol. 117. – P. 6225–6331.
2. A review on vertical and lateral heterostructures of semiconducting 2D- MoS_2 with other 2D materials: a feasible perspective for energy conversion / G. Swain [et al.] / Nanoscale. – 2021. – Vol. 13. – P. 9908–9944.
3. Recent advances in 2D lateral heterostructures / J. Wang [et al.] / Nano-Micro Lett. – 2019. – Vol. 11:48. – P. 1–31.
4. Krivosheeva, A. V. Heterostructures of two-dimensional

transition metal dichalcogenides: formation, ab initio modelling and possible applications / A. V. Krivosheeva, V. L. Shaposhnikov, V. E. Borisenko, J.-L. Lazzari // *Mater. Today: Proceedings.* – 2022. – Vol. 54. – P. 73–79.

5. Kresse, G. Efficient interactive schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set / G. Kresse, J. Furthmüller / *Phys. Rev. B.* – 1996. – Vol. 54, No 16. – P. 11169–11186.

6. WIEN2k: An APW+lo program for calculating the properties of solids. / P. Blaha [et al.] // *J. Chem. Phys.* – 2020. – Vol. 152. – P. 074101.