Министерство образования Республики Беларусь
Учреждение образования
Белорусский государственный университет
информатики и радиоэлектроники

УДК 539.2

Козич
Александра Витальевна

# Структурные и электронные свойства аксиально деформированных монослоев дисульфида рения

**АВТОРЕФЕРАТ**
на соискание степени магистра
по специальности 7-06-0717-01 «Нанотехнологии и наноматериалы»

Научный руководитель
Мигас Дмитрий Борисович
доктор физ.-мат. наук, доцент

Минск 2026

# КРАТКОЕ ВВЕДЕНИЕ

Двумерные материалы занимают важное место в современной наноэлектронике благодаря уникальному сочетанию электронных, оптических и механических свойств. Особый интерес среди них представляют дихалькогениды переходных металлов, поскольку их структурные, электронные и оптические свойства могут эффективно изменяться под действием внешних воздействий, в частности механической деформации.

Дисульфид рения ($ReS_2$) является представителем семейства дихалькогенидов переходных металлов VII группы и отличается от большинства аналогичных материалов низкой симметрией кристаллической структуры, наличием цепочек Re-Re и выраженной анизотропией свойств. В отличие от широко исследованных соединений $MoS_2$ и $WS_2$, дисульфид рения сохраняет прямозонный характер электронного спектра в широком диапазоне толщин, что делает его перспективным материалом для создания фотодетекторов, сенсоров и гибких электронных устройств.

Одним из наиболее эффективных способов управления свойствами двумерных материалов является деформационная инженерия. Изменение межатомных расстояний под действием механического растяжения позволяет модифицировать зонную структуру, ширину запрещенной зоны и транспортные характеристики материала без изменения химического состава.

Несмотря на значительное количество исследований, посвященных $ReS_2$, влияние одноосной деформации на его структурные и электронные свойства изучено недостаточно полно. В связи с этим в работе выполнено исследование структурных и электронных свойств аксиально деформированных монослоев дисульфида рения методами квантово-механического моделирования из первых принципов.

# ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Целью работы является исследование влияния деформации монослоя $ReS_2$ триклинной сингонии путем аксиального растяжения на его структурные и электронные свойства с помощью численного квантово-механического моделирования методами из первых принципов.

Задачами исследования являются построение структурных моделей дисульфида рения, разработка методики проведения численного квантово-механического моделирования, исследование динамической устойчивости различных политипов монослоя $ReS_2$, исследование кристаллической структуры

аксиально-деформированных монослоев дисульфида рения, расчет плотностей электронных состояний, построение дисперсионных кривых энергетических зон.

Личный вклад автора заключается в проведении анализа научной литературы по теме исследования (отечественные и зарубежные источники, более 50 наименований), построении структурных моделей монослоев $ReS_2$ различных политипов (1H, 1T, 1T′, 1T″), выполнении расчетов фононных спектров и анализе динамической устойчивости исследуемых политипов, выполнении квантово-механических расчетов структурных и электронных свойств материала в рамках теории функционала плотности с использованием пакета *OpenMX*, моделировании аксиально-деформированных структур монослоя $ReS_2$ (растяжение вдоль осей *a* и *b* в диапазоне от 1 до 10 % с шагом 1 %), обработке и анализе полученных результатов, выявлении закономерностей, включая анизотропию механического отклика и эволюцию типа электронного перехода, подготовке материалов для апробации результатов на научных конференциях.

Научная новизна работы заключается в установлении закономерностей влияния аксиальной деформации на структуру и электронные свойства монослоя $ReS_2$. В частности, установлено, что при растяжении вдоль оси *a* монослой $ReS_2$ демонстрирует ауксетическое поведение (отрицательный коэффициент Пуассона). Выявлен анизотропный характер механического и электронного отклика материала, установлен деформационно-индуцированный переход от прямозонного к непрямозонному типу электронного спектра, определены роли *d*-состояний атомов рения и *p*-состояний атомов серы в формировании электронной структуры деформированного материала.

Полученные результаты могут быть использованы при проектировании и оптимизации устройств на основе ДПМ, в которых механическая деформация применяется в качестве инструмента управления электронными характеристиками материала. В частности, результаты представляют интерес для разработки гибких полевых транзисторов, фотодетекторов нового поколения, сенсорных систем и элементов наноэлектроники, функционирующих в условиях внешних механических воздействий.

Основные результаты работы докладывались и обсуждались на следующих научных конференциях:

1. Компьютерное проектирование в электронике (Минск, БГУИР, 2024). Форма участия – очная.
2. Актуальные проблемы физики твердого тела (Минск, НПЦ НАН Беларуси по материаловедению, 2025). Форма участия – очная.

По теме диссертации опубликовано 2 работы в сборниках материалов конференций:

1. Козич, А.В. Зонная структура аксиально-деформированного в направлении (100) монослоя дисульфида рения / А.В. Козич, А.В. Баглов, Л.С. Хорошко, Д.Б. Мигас // Компьютерное проектирование в электронике : сб. тр. / БГУИР, редкол.: В.Р. Стемпицкий (пред.) [и др.]. – Минск, 2024. – С. 92–95.
2. Баглов, А.В. Динамическая нестабильность высокосимметричных политипов дисульфида рения / А.В. Баглов, Л.С. Хорошко, А.В. Козич, Д.Б. Мигас // Актуальные проблемы физики твердого тела : сб. ст. / ГО «НПЦ НАН Беларуси по материаловедению» ; редкол.: В.М. Федосюк (пред.) [и др.]. – Минск, 2025. – С. 403–406.

## КРАТКОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Общий объем магистерской диссертации составляет 75 страниц, включая 33 иллюстрации, 5 таблиц, библиографический список из 56 наименований, 1 приложение.

Во введении обоснована актуальность темы, сформулированы цели и задачи, показана научная новизна и практическая значимость исследования.

В первой главе «Современное состояние исследований дисульфида рения: синтез, структура, свойства и их модификация» проведен обзор литературы (более 50 источников). Рассмотрены методы получения объемных кристаллов и наноразмерных форм $ReS_2$ (механическое/жидкофазное расслоение, ХОГФ). Детально проанализирована уникальная триклинная структура, механизмы формирования цепочек Re-Re и кластеров $Re_4$, а также физические свойства: прямозонная структура, слабое межслоевое взаимодействие, анизотропия механических и оптических свойств. Показано, что влияние одноосной деформации на электронную структуру монослоя $ReS_2$ изучено недостаточно.

Во второй главе «Методы и методика проведения исследований» изложены теоретические основы метода функционала плотности, теории псевдопотенциала и формализма Кубо-Гринвуда. Описана методика построения модели монослоя $ReS_2$ с последующим добавлением вакуумного зазора и заданием аксиальной деформации (растяжение от 0 до 10 % с шагом 1 %) вдоль осей *a* и *b*. Обоснован выбор параметров моделирования в пакете *OpenMX*: псевдопотенциалы, базис, *k*-сетка. Представлена методика расчета фононных спектров методом конечных смещений в *Phonopy*.

В третьей главе «Структурные и электронные свойства аксиально деформированных монослоев дисульфида рения» представлены результаты исследования динамической устойчивости различных политипов $ReS_2$, влияния аксиальной деформации на кристаллическую структуру и электронные свойства монослоя. Выполнен анализ фононных спектров, зонных структур и плотностей электронных состояний. Показано, что аксиальная деформация приводит к анизотропному изменению структурных и электронных характеристик материала, включая ауксетическое поведение при растяжении вдоль оси *a* (отрицательный коэффициент Пуассона), уменьшение ширины запрещенной зоны и переход от прямозонного к непрямозонному типу электронного перехода.

## ПОЛОЖЕНИЯ, ВЫНОСИМЫЕ ЗА ЗАЩИТУ

1. Среди политипов монослоя $ReS_2$ (1H, 1T, 1T′, 1T″) наиболее энергетически выгодной и динамически устойчивой является структурная модификация 1T″, которая демонстрирует выраженную анизотропию структурного и электронного отклика на одноосную деформацию вдоль кристаллографических направлений *a* и *b*, что проявляется в изменении параметров кристаллической решетки и ширины запрещенной зоны.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Методами квантово-механического моделирования из первых принципов в приближении локальной плотности с использованием псевдопотенциалов и базиса локализованных псевдоатомных орбиталей выполнен расчет структурных и электронных свойств аксиально деформированных монослоев дисульфида рения. По результатам проведенного исследования можно сделать следующие основные выводы.

Анализ фононных спектров для четырех политипов монослоя $ReS_2$ (1H, 1T, 1T′, 1T″) показал, что динамически стабильным является только сильно искаженный триклинный политип 1T″. Отсутствие мнимых частот в его фононном спектре во всем диапазоне волновых векторов свидетельствует о реализуемости данной структуры, что согласуется с экспериментальными данными. Данный политип был выбран в качестве базовой структуры для дальнейшего исследования влияния аксиальной деформации.

Установлено, что отклик кристаллической решетки монослоя $ReS_2$ на одноосное растяжение носит выраженный анизотропный характер. При растяжении вдоль оси *a* (вдоль цепочек Re-Re) коэффициент Пуассона

отрицателен и составляет $\nu$ = -0,07, что свидетельствует о поперечном расширении материала при продольном растяжении (ауксетическое поведение). При растяжении вдоль оси *b* коэффициент Пуассона положителен ($\nu$ = 0,06). В обоих случаях деформация сопровождается сжатием монослоя в направлении, перпендикулярном плоскости (вдоль кристаллографической оси *c*), причем величина этого сжатия не зависит от направления растяжения и составляет 3,9 % при 10 % деформации.

Показано, что ширина запрещенной зоны монослоя $ReS_2$ монотонно уменьшается с ростом деформации. Растяжение вдоль кристаллографической оси *a* является более эффективным способом управления электронными свойствами: при 10 % деформации ширина запрещенной зоны уменьшается до 0,689 эВ (более чем в 2 раза от исходной 1,475 эВ). При деформации вдоль оси *b* ширина запрещенной зоны снижается до 0,943 эВ.

Обнаружено, что тип электронного перехода зависит от величины и направления деформации. В исходном недеформированном состоянии монослой $ReS_2$ демонстрирует квазипрямозонный характер перехода. При растяжении вдоль оси *a* до 6 % сохраняется прямозонный характер перехода, тогда как при деформации от 7 до 10 % реализуется непрямозонный переход. В случае растяжения вдоль оси *b* во всем исследованном диапазоне деформаций (от 1 до 10 %) наблюдается непрямозонный характер перехода.

Установлено, что вклад *d*-состояний рения в формирование электронной структуры вблизи уровня Ферми существенно чувствительнее к направлению деформации по сравнению с *p*-состояниями серы. Обнаружены осцилляции интегральной парциальной плотности электронных состояний для Re-5*d* с характерными периодом от 1 до 2 %, что свидетельствует о высокой чувствительности *d*-состояний к малым изменениям межатомных расстояний и перестройке кристаллического поля.

Выявленная анизотропия механического и электронного отклика, а также возможность контролируемого управления типом электронного перехода имеют важное значение для прогнозирования поведения данного материала в составе гибких оптоэлектронных устройств, поляризационно-чувствительных фотодетекторов и датчиков механических напряжений. Полученные результаты могут быть использованы при проектировании и оптимизации устройств на основе ДПМ, в которых механическая деформация применяется в качестве инструмента управления электронными характеристиками материала. В частности, результаты представляют интерес для разработки гибких полевых транзисторов, фотодетекторов нового поколения, сенсорных систем и элементов наноэлектроники, функционирующих в условиях внешних механических воздействий. Результаты работы расширяют фундаментальные представления о

физико-химических свойствах низкосимметричных двумерных дихалькогенидов переходных металлов и могут служить основой для разработки новых наноэлектронных компонентов.

## СПИСОК ОПУБЛИКОВАННЫХ РАБОТ

1. Козич, А.В. Зонная структура аксиально-деформированного в направлении (100) монослоя дисульфида рения / А.В. Козич, А.В. Баглов, Л.С. Хорошко, Д.Б. Мигас // Компьютерное проектирование в электронике : сб. тр. / БГУИР, редкол.: В.Р. Стемпицкий (пред.) [и др.]. – Минск, 2024. – С. 92–95.

2. Баглов, А.В. Динамическая нестабильность высокосимметричных политипов дисульфида рения / А.В. Баглов, Л.С. Хорошко, А.В. Козич, Д.Б. Мигас // Актуальные проблемы физики твердого тела : сб. ст. / ГО «НПЦ НАН Беларуси по материаловедению» ; редкол.: В.М. Федосюк (пред.) [и др.]. – Минск, 2025. – С. 403–406.