

## **ВЛИЯНИЕ ДЕФЕКТОВ И ПРИМЕСЕЙ НА ЭЛЕКТРОННЫЕ И МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА ЛАТЕРАЛЬНЫХ ГЕТЕРОСТРУКТУР НА ОСНОВЕ ДИСУЛЬФИДОВ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ**

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

Белорусский государственный университет информатики  
и радиоэлектроники, г. Минск

Гетеропереходы между трехмерными полупроводниками с различной шириной запрещенной зоны составляют основу современных светодиодов, полупроводниковых лазеров и высокоскоростных транзисторов [1]. Формирование гетеропереходов между двумерными полупроводниками [2] позволит осуществить управление шириной запрещенной зоны в плоскости пленки и открыть новые области в материаловедении и физике приборов. Недавно была продемонстрирована возможность выращивания латеральных гетероструктур (ЛГС) из монослоев двумерных полупроводников, таких как  $\text{MoSe}_2$  и  $\text{WSe}_2$  [3, 4]. Их структура представляет собой неискаженную решетку, на границе раздела которой происходит замена одного металла другим [5]. Это даст возможность интегрировать новые приборы, такие как планарные транзисторы и диоды, в один атомарно тонкий слой. В таких структурах могут проявляться физические явления, отсутствующие в исходных объемных полупроводниках. При этом формирование высококачественных латеральных структур из нескольких соединений с заданными характеристиками остается сложной задачей. Компьютерное моделирование может помочь в анализе свойств наногетероструктур с учетом взаимного расположения слоев и легирования их различными

ми примесями. Таким образом, исследование способов управления свойствами материала за счет наличия дефектов и примесей, а также путей их возможного применения, является актуальным.

Моделирование электронных и магнитных свойств ЛГС на основе двумерных кристаллов ( $\text{MoS}_2$ ,  $\text{WS}_2$ ,  $\text{MoSe}_2$ ,  $\text{WSe}_2$ ) осуществлялось с помощью метода псевдопотенциала с базисом на плоских волнах (программный код VASP [6]). Предварительно данная методика была апробирована при расчете свойств бинарных двумерных кристаллов и вертикальных гетероструктур на их основе и показала хорошее согласие с имеющимися теоретическими и экспериментальными данными [7].

Вначале проводилась атомно-структурная оптимизация ЛГС, не содержащих дефекты. В результате установлено, что все ЛГС являются термодинамически стабильными полупроводниковыми соединениями с шириной запрещенной зоны, лежащей в диапазоне от 1,3 до 1,7 эВ. Расстояние между атомом металла и ближайшим к нему атомом халькогена оказалось минимальным в  $\text{WS}_2/\text{MoS}_2$  и составило 2,41 нм. Максимальное межатомное расстояние (2,55 нм) наблюдалось в системах  $\text{MoS}_2/\text{WSe}_2$  и  $\text{WS}_2/\text{WSe}_2$ . Анализ парциальных плотностей электронных состояний (ПЭС) показал, что у бездефектной ЛГС как валентная зона, так и зона проводимости вблизи уровня Ферми формируются, главным образом, за счет  $d$ -электронов атомов металла и  $p$ -электронов атомов халькогена. При этом орбитальный состав волновых функций вблизи уровня Ферми существенно не изменяется в зависимости от рассматриваемого типа атома металла (Mo или W) или халькогена (S или Se).

Были рассмотрены различные виды дефектов и примесей замещения: вакансионный дефект по атому металла или халькогена; замещение атома халькогена атомом кислорода или другого халькогена. Установлено, что, несмотря на все

структурные особенности рассмотренных вариантов, гетероструктуры сохраняют свою стабильность. В качестве примера на рис. 1 и 2 представлены зонные спектры систем  $\text{MoS}_2/\text{WSe}_2$  и  $\text{WS}_2/\text{MoSe}_2$  с различными видами дефектов.

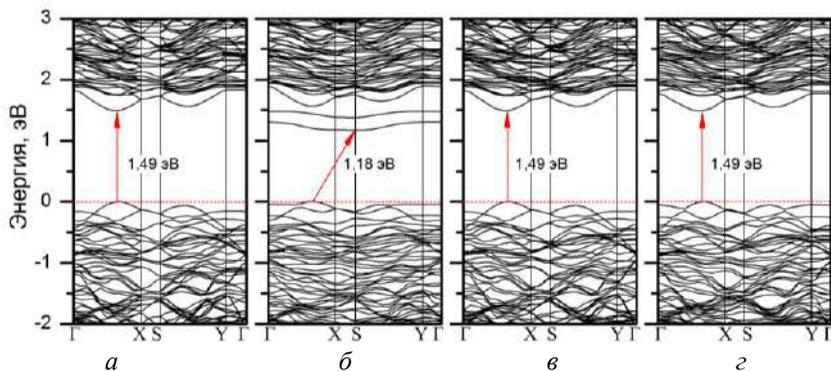


Рис. 1. Зонная структура латеральной гетероструктуры  $\text{MoS}_2/\text{WSe}_2$ : бездефектная (*a*), с вакансией на месте атома Se (*б*), с замещением атома S атомом Se (*в*), с замещением атома S атомом O (*г*)

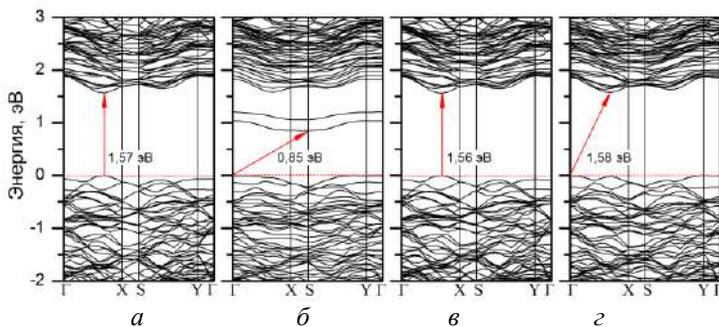


Рис. 2. Зонная структура латеральной гетероструктуры  $\text{WS}_2/\text{MoSe}_2$ : бездефектная (*a*), с вакансией на месте атома Se (*б*), с замещением атома S атомом Se (*в*), с замещением атома S атомом O (*г*)

Показано, что замещение атомов халькогена атомами кислорода или второго халькогена не оказывает значительного влияния на вид зонного спектра или ширину запрещенной зоны, в то время как внедрение вакансионного дефекта в позиции атома халькогена приводит к появлению двух дополнительных отдельно стоящих зон в запрещенной зоне вблизи уровня Ферми и существенно снижает величину энергетического зазора (в 1,5–2 раза в зависимости от типа ЛГС и позиции атома); при этом наблюдается смещение экстремумов зон.

Спин-поляризованные расчеты показали, что наличие структурных дефектов или легирование атомом кислорода не приводит к появлению магнитного момента для всех рассмотренных ЛГС.

В то же время замещение атомов Mo или W атомами переходных металлов может приводить к появлению магнитного момента, величина которого зависит от типа легирующей примеси и замещаемого атома. Так, замещение атомов металла атомом Mn приводит к появлению магнитного момента в  $1 \mu_B$  независимо от типа ЛГС и позиции замещаемого атома. В случае легирования атомами железа характер зависимости более сложный: в структуре  $WS_2/MoSe_2$  замещение атома W атомом Fe сопровождается появлением магнитного момента в  $2 \mu_B$ , а при нахождении атома Fe в позиции атома Mo значения магнитного момента оказываются в диапазоне от 0 до  $1 \mu_B$  в зависимости от занимаемой позиции. В структуре  $MoS_2/WSe_2$  замещение атома W атомом Fe не приводит к появлению магнитного момента, в то время как при замещении атома Mo атомом Fe магнитный момент составляет  $2 \mu_B$ . В этом случае при замещении атомами Fe или Mn соединения становятся полуметаллами, т. е. они являются проводниками для одного из направлений спина и полупроводниками – для противоположного направления.

При замещении атомов металла атомами хрома соединения остаются немагнитными.

Зонные спектры и плотности электронных состояний в латеральной гетероструктуре  $WS_2/MoSe_2$  при замещении атома W атомами Mn или Cr показаны на рис. 3. Очевидно, что замещение атома вольфрама атомом марганца ведет к появлению магнитного момента, а соединение становится полуметаллическим (т. е. имеет запрещенную зону только для одного направления спина). При замещении атома вольфрама атомом хрома соединение остается немагнитным полупроводником, у которого не наблюдается отличий в зонных спектрах и в ПЭС для обоих направлений спинов.

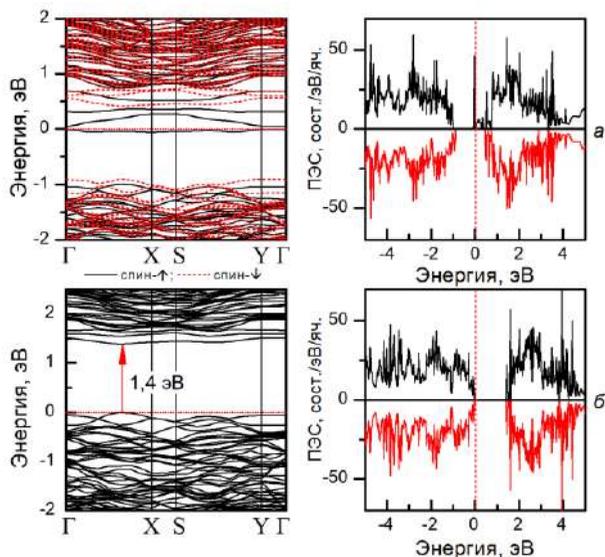


Рис. 3. Зонные спектры и ПЭС ЛГС  $WS_2/MoSe_2$  с замещением атома W атомами Mn (а) или Cr (б)

Таким образом, разработана модель латеральной гетероструктуры на основе дисульфидов переходных металлов с дефектами и примесями. Показано, что наличие вакансий и

замещение немагнитными атомами не приводит к появлению магнитного момента, хотя влияет на электронные свойства структуры. Замещение атомов Mo или W атомами Mn или Fe превращает исследованные наноструктуры в полуметаллы с величиной магнитного момента до 2  $\mu_B$ .

## Литература

1. Valizadeh P. Field effect transistors, a comprehensive overview: from basic concepts to novel technologies. – 2016. – John Wiley & Sons Inc. – 480 p.
2. Heteroepitaxial growth of two-dimensional hexagonal boron nitride templated by graphene edges / L. Liu [et al.] // *Science*. – 2014. – Vol. 343. – P. 163–167.
3. Swain, G. A review on vertical and lateral heterostructures of semiconducting 2D-MoS<sub>2</sub> with other 2D materials: a feasible perspective for energy conversion / G. Swain, S. Sultana, K. Parida // *Nanoscale*. – 2021. – Vol. 13. – P. 9908–9944.
4. Recent advances in 2D lateral heterostructures / J. Wang [et al.] // *Nano-Micro Lett.* – 2019. – Vol. 11:48. – P. 1–31.
5. Direct epitaxial synthesis of selective two-dimensional lateral heterostructures / J. Lee [et al.] // *ACS Nano*. – 2019. – Vol. 13, № 11. – P. 13047–13055.
6. 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, № 16. – P. 11169–11186.
7. Krivosheeva, A. V. Heterostructures of twodimensional transition metal dichalcogenides: formation, ab initio modelling and possible applications / A. V. Krivosheeva, V. L. Shaposhnikov, V. E. Borisenko, J.-L. Lazzari // *Materials Today: Proceedings*. – 2022. – Vol. 54. – P. 73–79.