

МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ им. М. В. Ломоносова

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

Кафедра атомной физики, физики плазмы и  
микроэлектроники

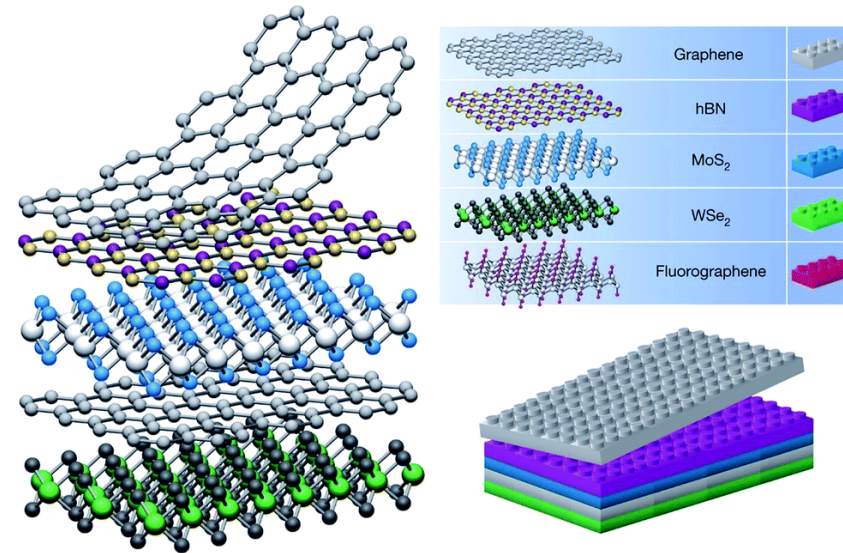
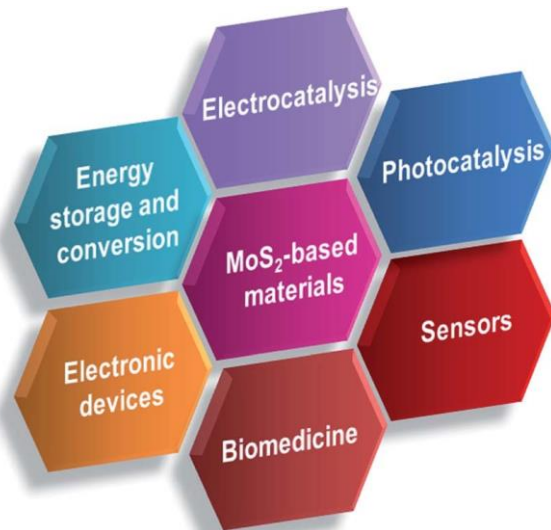
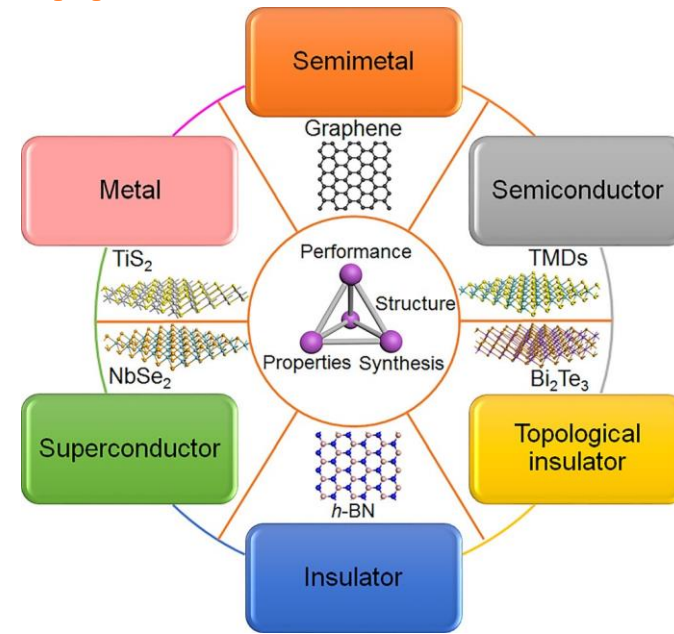
Воздействие радикалов и ионов плазмы  $N_2$  на  
монослой  $MoS_2$

Выполнил студент  
6 курса 211 группы  
Хлебников Сергей Андреевич

Научный руководитель:  
Воронина Екатерина Николаевна

# Дихалькогениды переходных металлов

- Особый интерес к дихалькогенидам переходных металлов (ДПМ) связан с их необычными оптическими, механическими, электронными свойствами, что делает их перспективными полупроводниковыми материалами.
- Поверхностная функционализация двумерных материалов – один из методов легирования, позволяющий направленно изменять их свойства для применения в различных областях оптики, микро- и наноэлектроники.



# Цели и задачи

Цель: исследование поверхностной функционализации  $\text{MoS}_2$  радикалами плазмы различного состава с помощью компьютерного моделирования.

Изучение метода теории функционала плотности (DFT), сопоставление с другими квантовомеханическими расчетными методами, его недостатки и преимущества, сравнение программ моделирования на основе DFT.

Динамическое моделирование процессов адсорбции на монослое  $\text{MoS}_2$  с целью детального понимания процессов, происходящих при взаимодействии налетающих атомов с поверхностью.

Изучение процессов адсорбции на поверхности монослоёв  $\text{MoS}_2$  под действием атомов H, N, O, F, Cl в результате статического моделирования для оценки влияния адсорбированных атомов на электронное строение исследуемых объектов.

# Теория функционала плотности

- Опирается на понятие электронной плотности, зависящей от 3-х координат.
- Трудоёмкость вычислений  $O(k^3)$ .
- Возможность моделирования большого числа частиц, в том числе периодических систем.

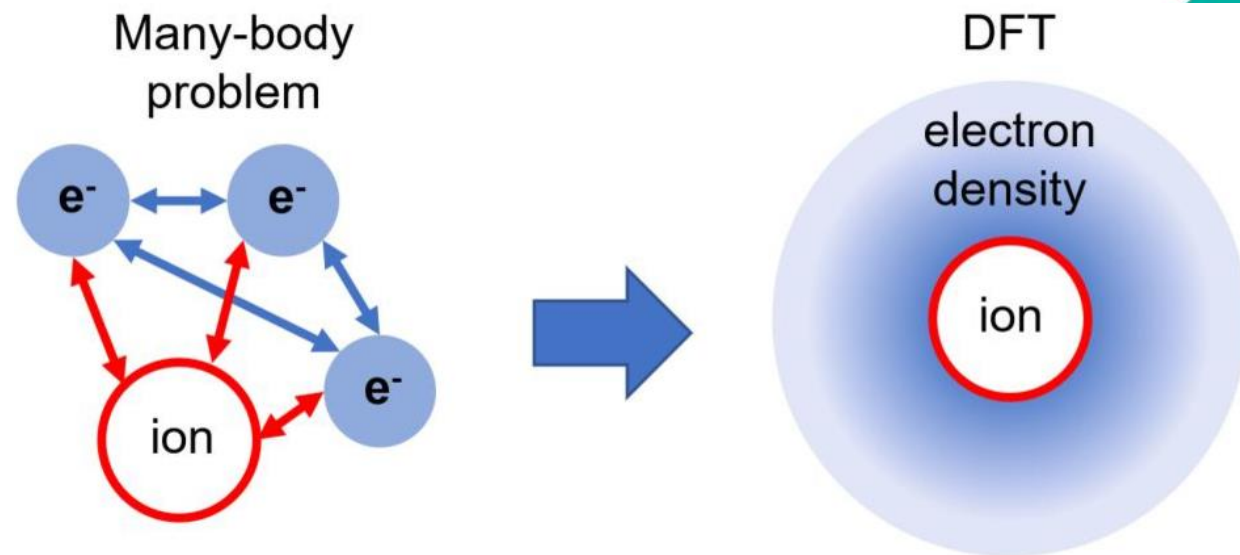
Уравнения Кона – Шэма:

$$\left(-\frac{1}{2}\nabla^2 + \vartheta_{eff}(\mathbf{r}) - \varepsilon_j\right)\varphi_j(\mathbf{r}) = 0$$

$$n(\mathbf{r}) = \sum_{j=1}^N |\varphi_j(\mathbf{r})|^2$$

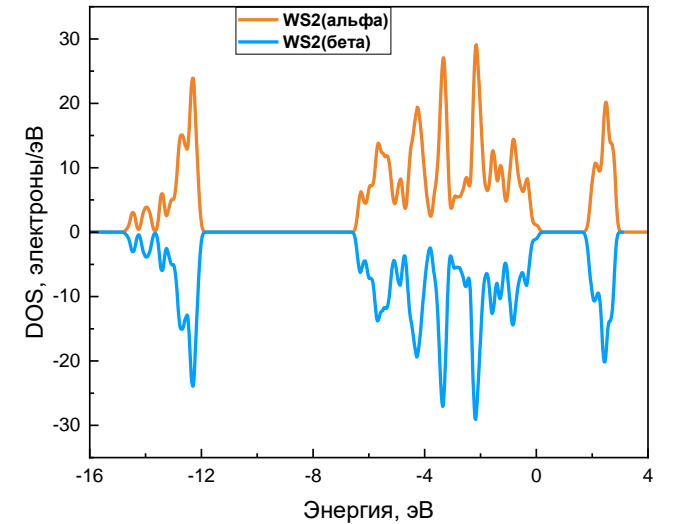
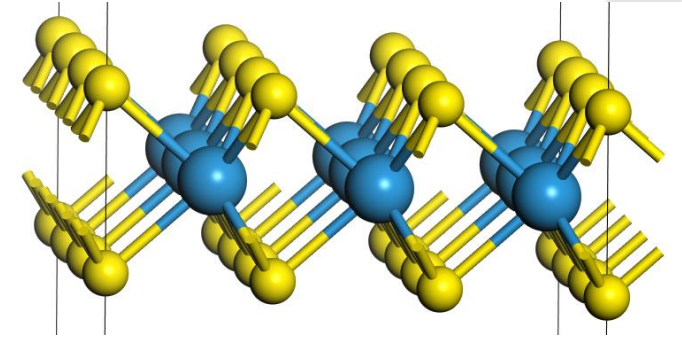
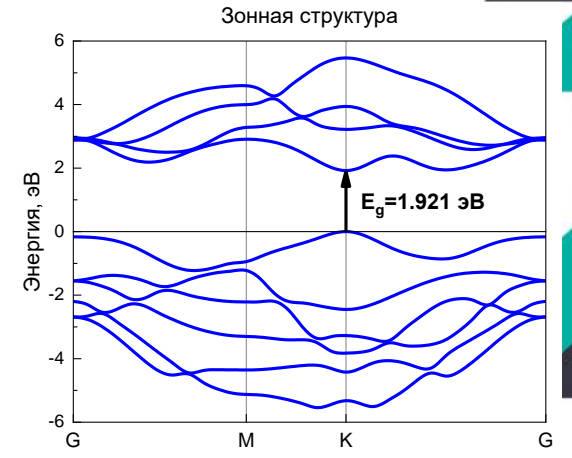
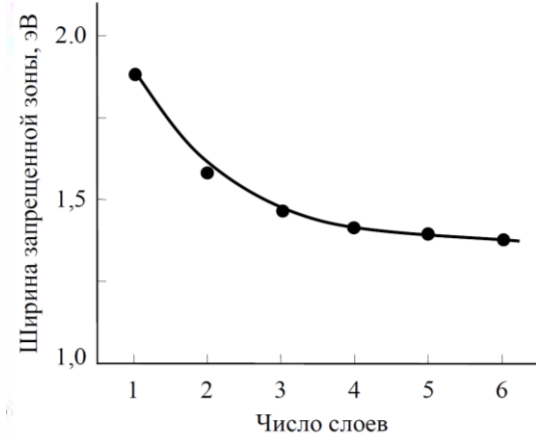
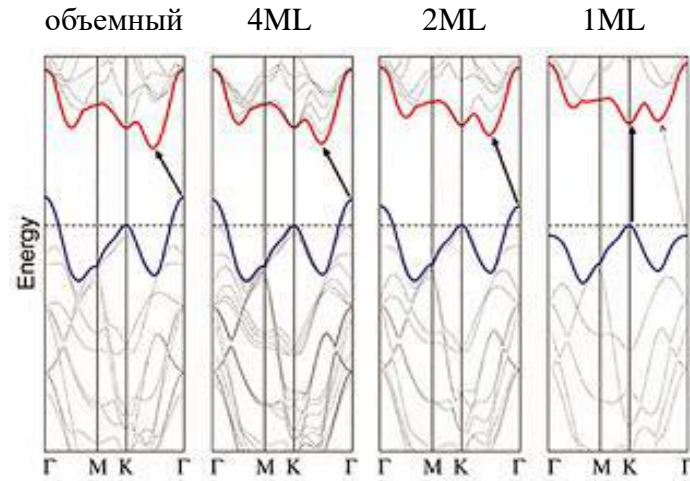
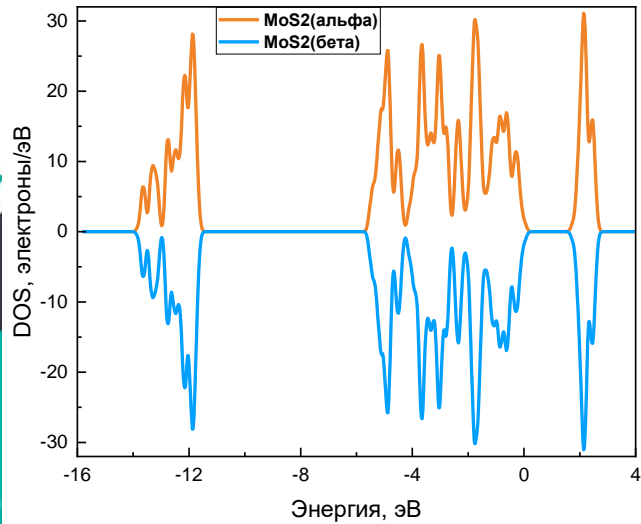
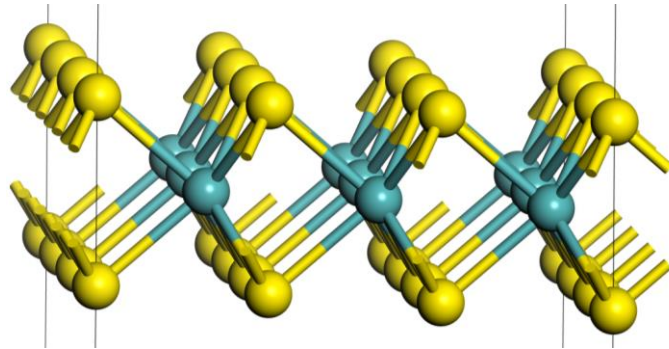
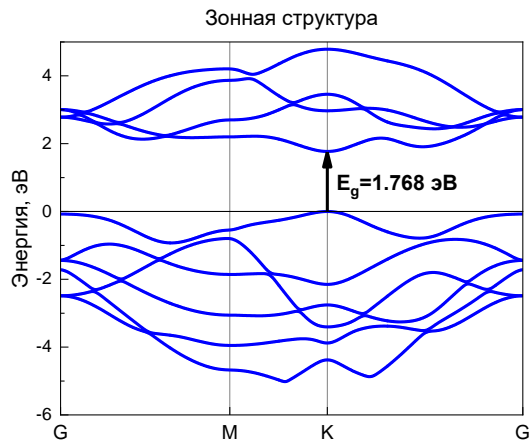
$$\vartheta_{eff}(\mathbf{r}) = \vartheta(\mathbf{r}) + \int \frac{n(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}' + \vartheta_{xc}(\mathbf{r})$$

$$E = \sum_j \varepsilon_j + E_{xc}[n(\mathbf{r})] - \int \vartheta_{xc}(\mathbf{r})n(\mathbf{r})d\mathbf{r} - \frac{1}{2} \int \frac{n(\mathbf{r})n(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}'$$



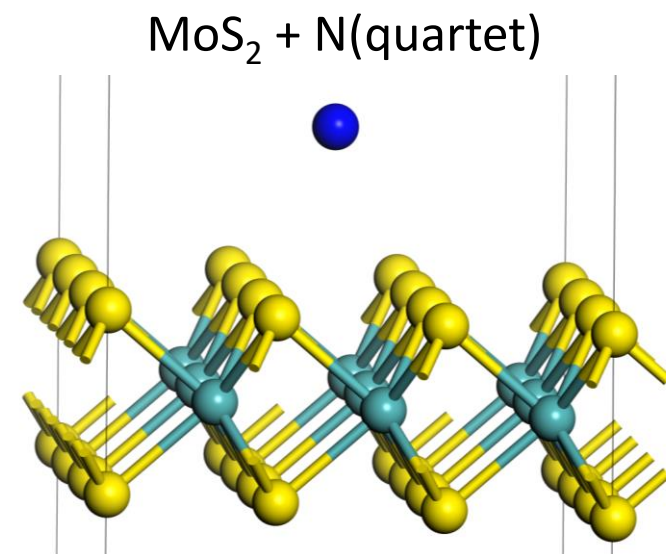
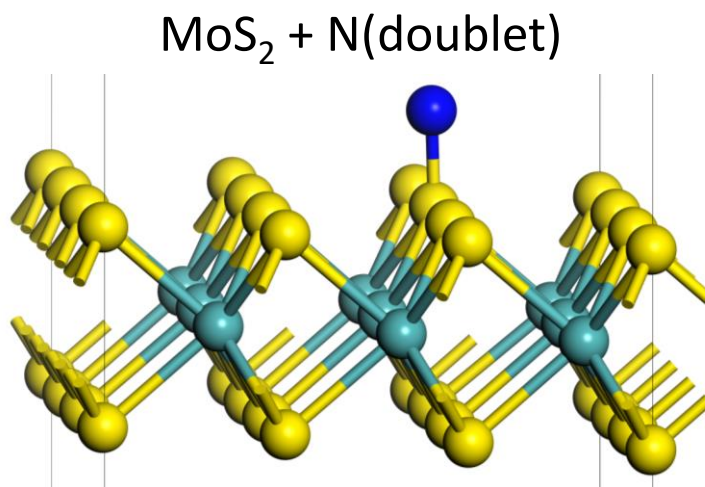
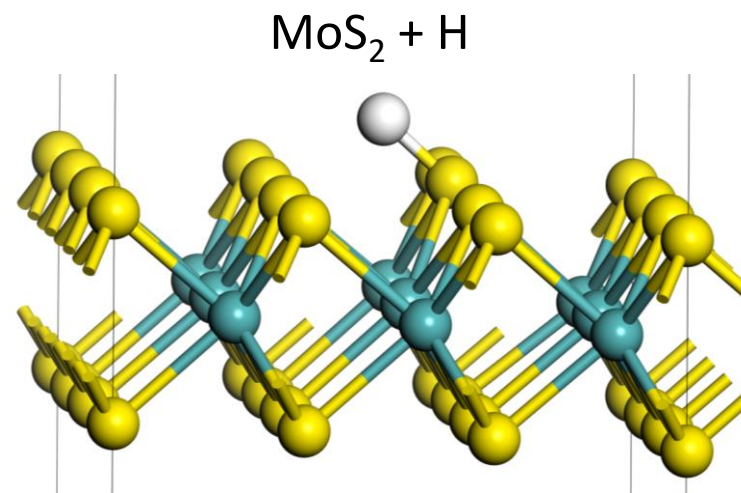
- Плохо описывает межмолекулярные силы, особенно ван-дер-ваальсовы.
- Плохо рассчитывает ширину запрещённой зоны в некоторых полупроводниках.

# MoS<sub>2</sub> и WS<sub>2</sub>

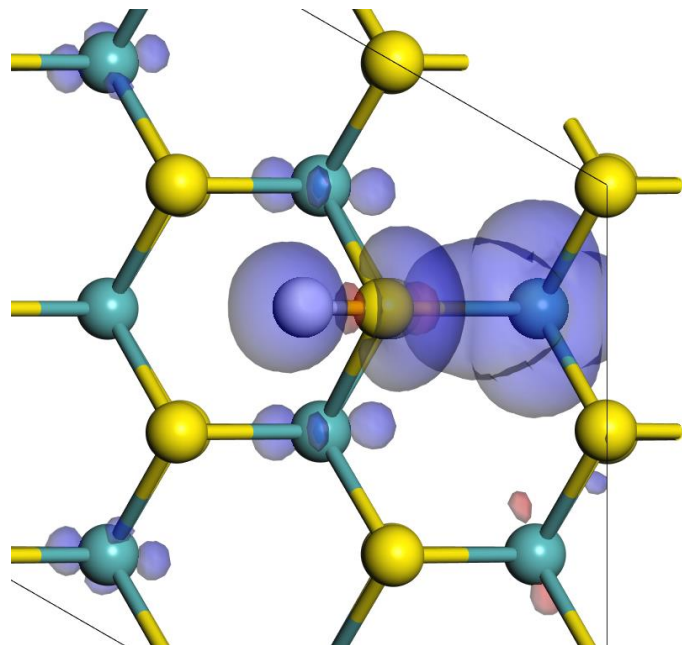


# Адсорбция одиночных атомов

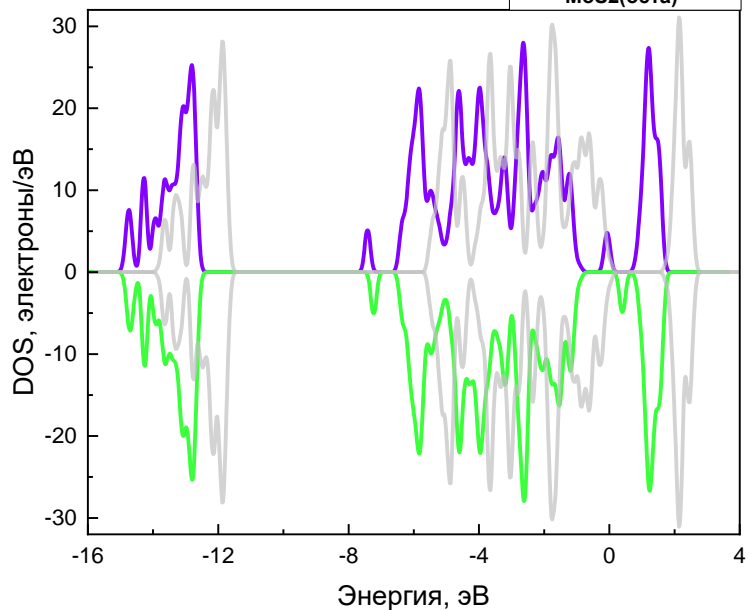
Атом	длина связи, А		Угол, град	$E_{\text{ads}}$ , эВ	$E_{\text{св}}$ , эВ
	Mo-S	S-X	S-X-Oz		
MoS <sub>2</sub> (pristine)	2.42	-	-	-	-
H(d)	2.46; 2.69	1.40	132.4	-0.86	-3,57
N(d)	<b>2.44</b>	<b>1.53</b>	<b>176.3</b>	<b>-1,62</b>	<b>-4,81</b>
N(q)	<b>2.88; 2.61</b>	<b>1.57</b>	<b>148.9</b>	<b>-0.26</b>	
O(s)	2.39	1.49	180.0	-	<b>-5,41</b>
O(t)	2.41	1.50	179.8	-2.20	
F(d)	2.39;2.44	1.86	179.8	-1.85	-3,56
Cl(d)	2.39	2.46	177.8	-0.93	-2,64
S(t)	2,42	1,95	180,0	-2,08	-4,45



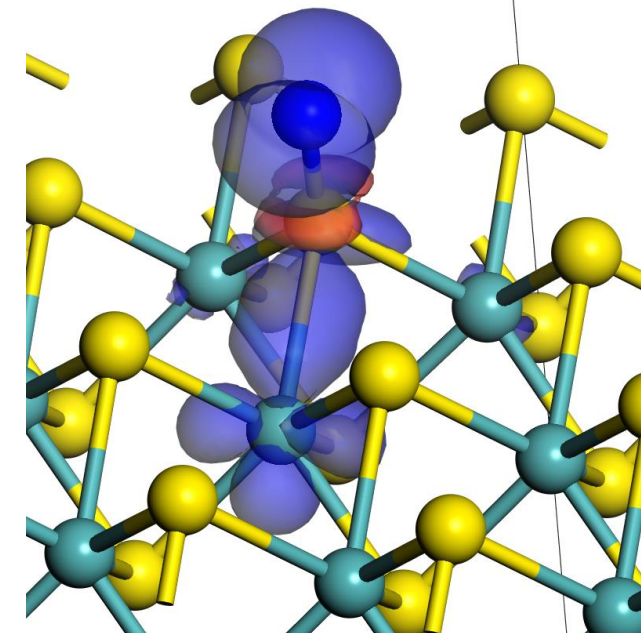
# Плотность состояний и электронная плотность



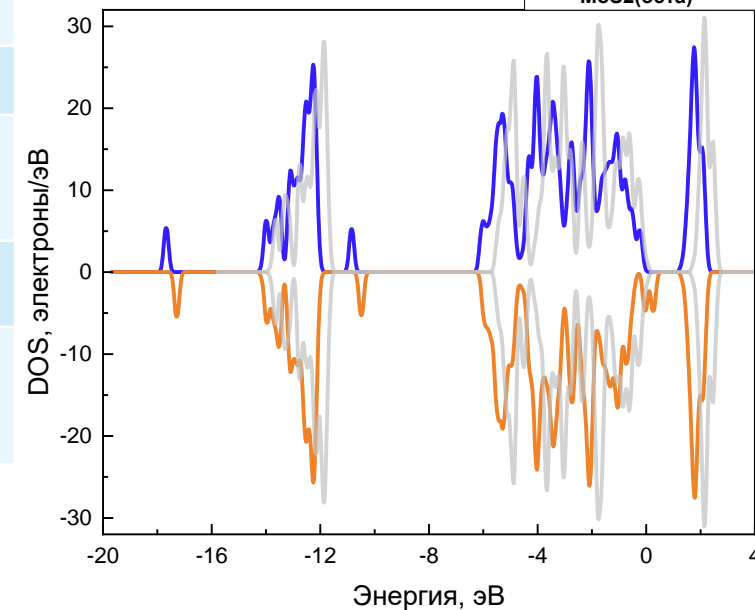
— H(doublet,альфа)  
— H(doublet,бета)  
— MoS2(альфа)  
— MoS2(бета)



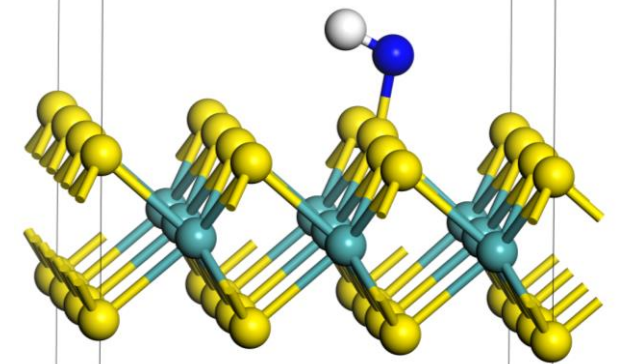
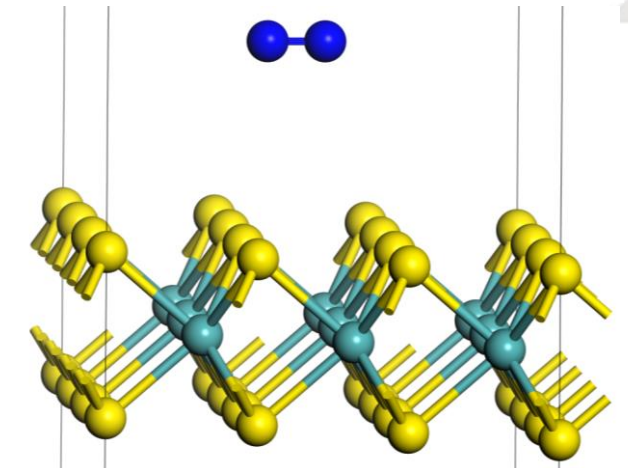
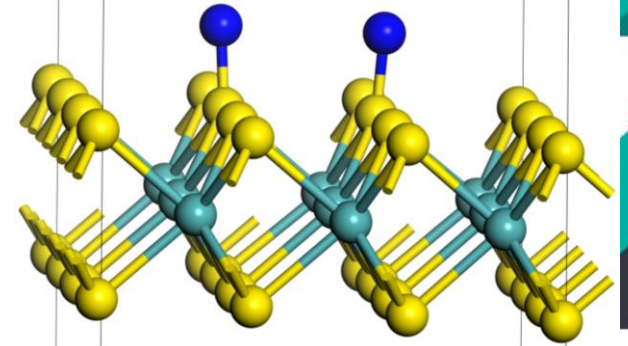
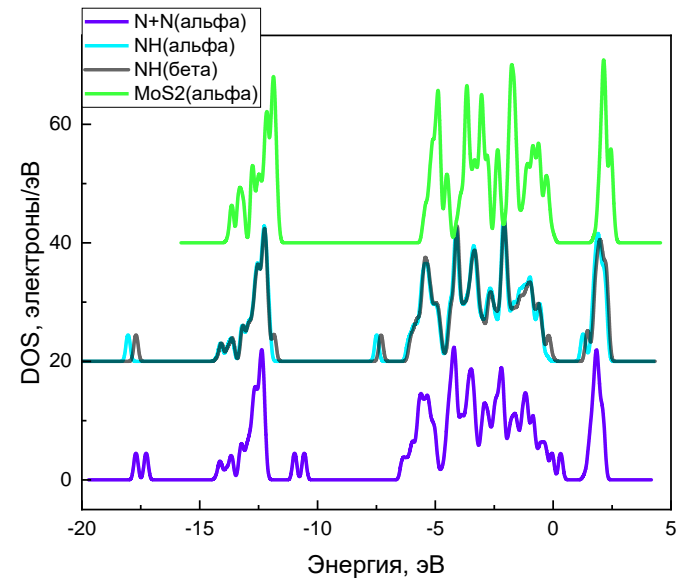
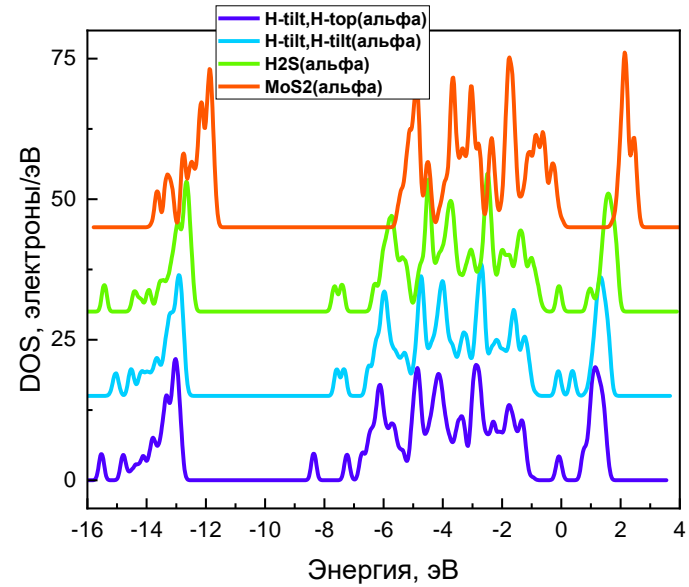
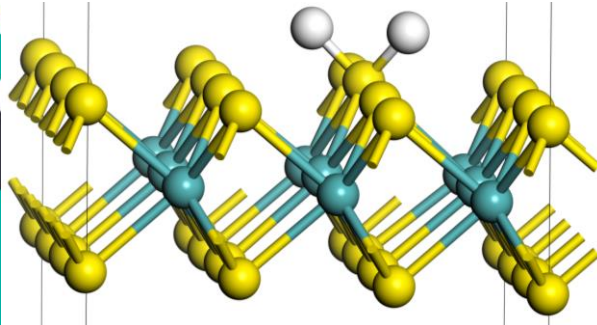
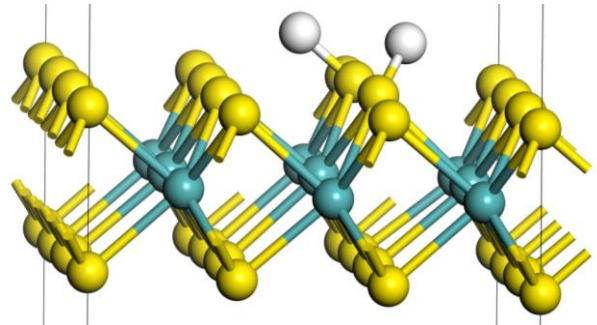
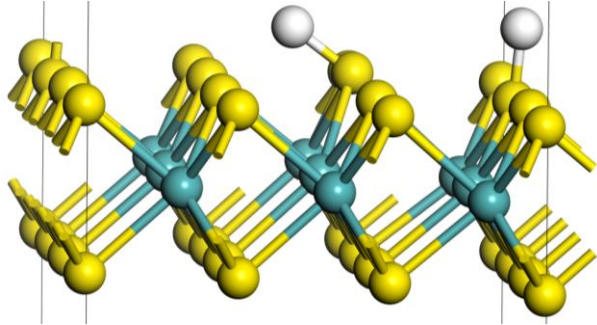
Атом	Частичный заряд, e		
	Mo	S	X
MoS <sub>2</sub> (pristine)	0.74	-0.37	-
H(d)	0.93	-0.18	-0.22
N(d)	0.92	0.18	-0.75
N(q)	0.95;0.85	0.44	-0.64
O(s)	0.92	0.16	-0.67
O(t)	0.92	0.22	-0.68
F(d)	0,64	-0,02	-0.39
Cl(d)	0.58	0.18	-0.37
S(t)	0,59	0,02	-0,19



— N(doublet,альфа)  
— N(doublet,бета)  
— MoS2(альфа)  
— MoS2(бета)

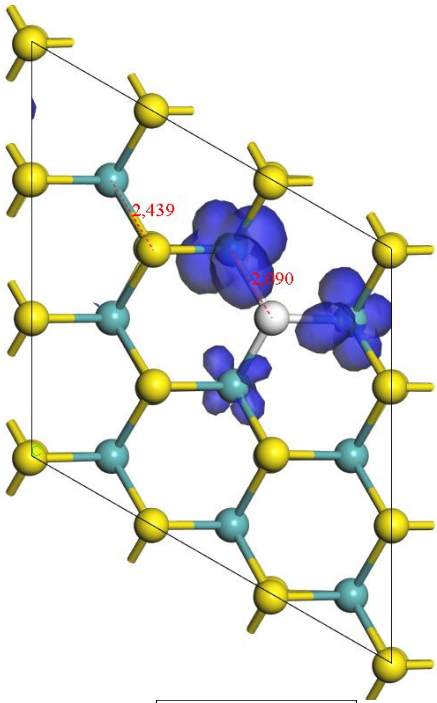


# Адсорбция двух атомов

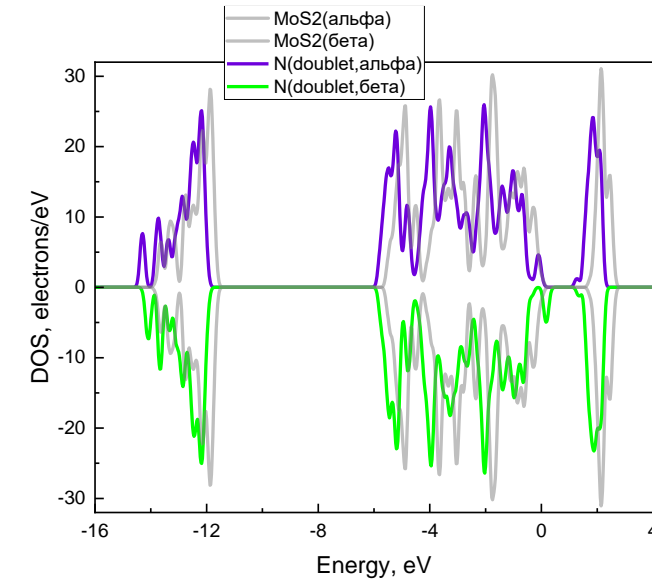
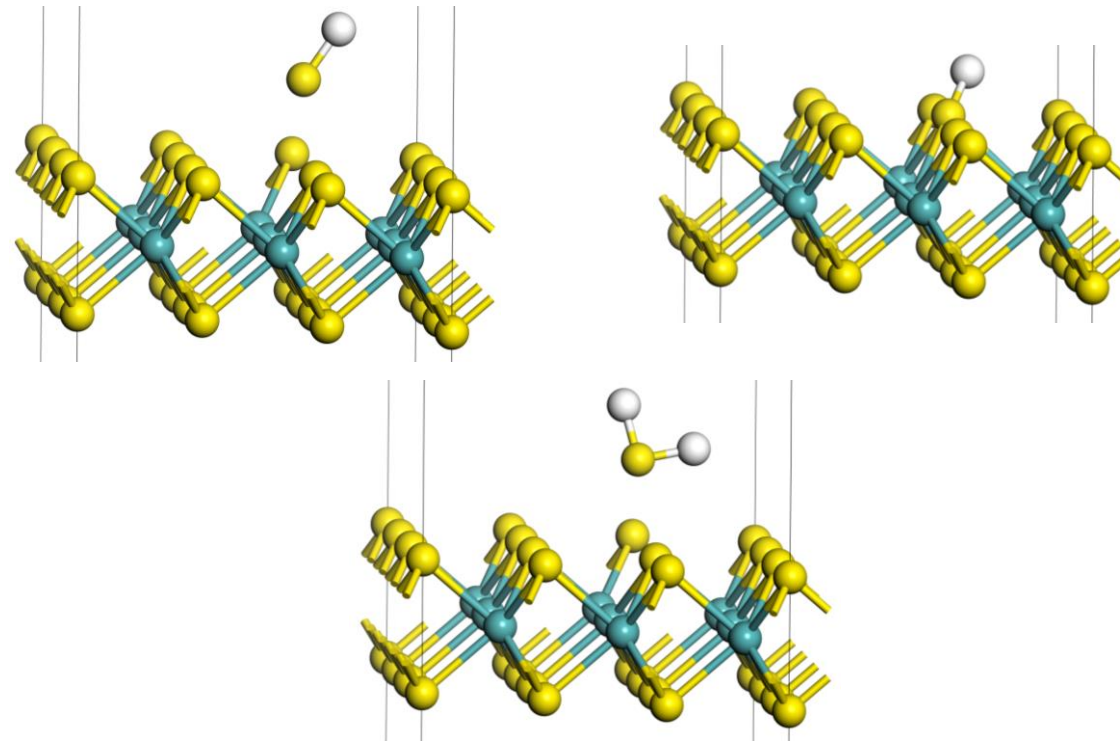
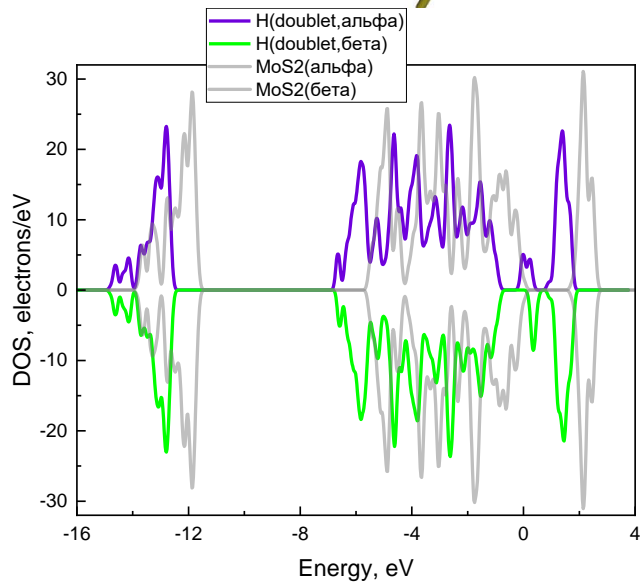
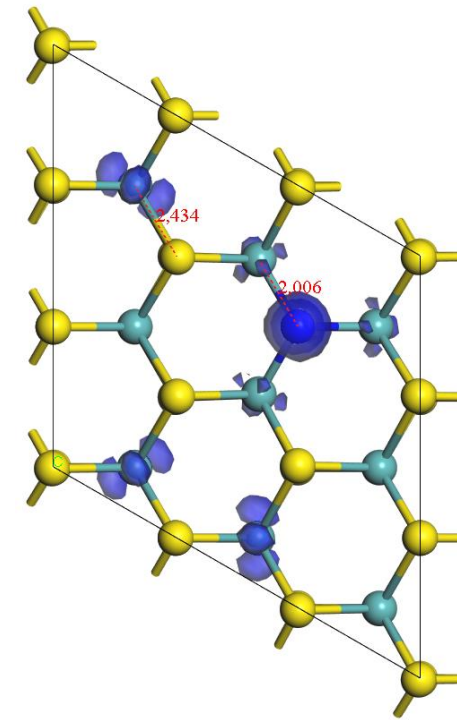




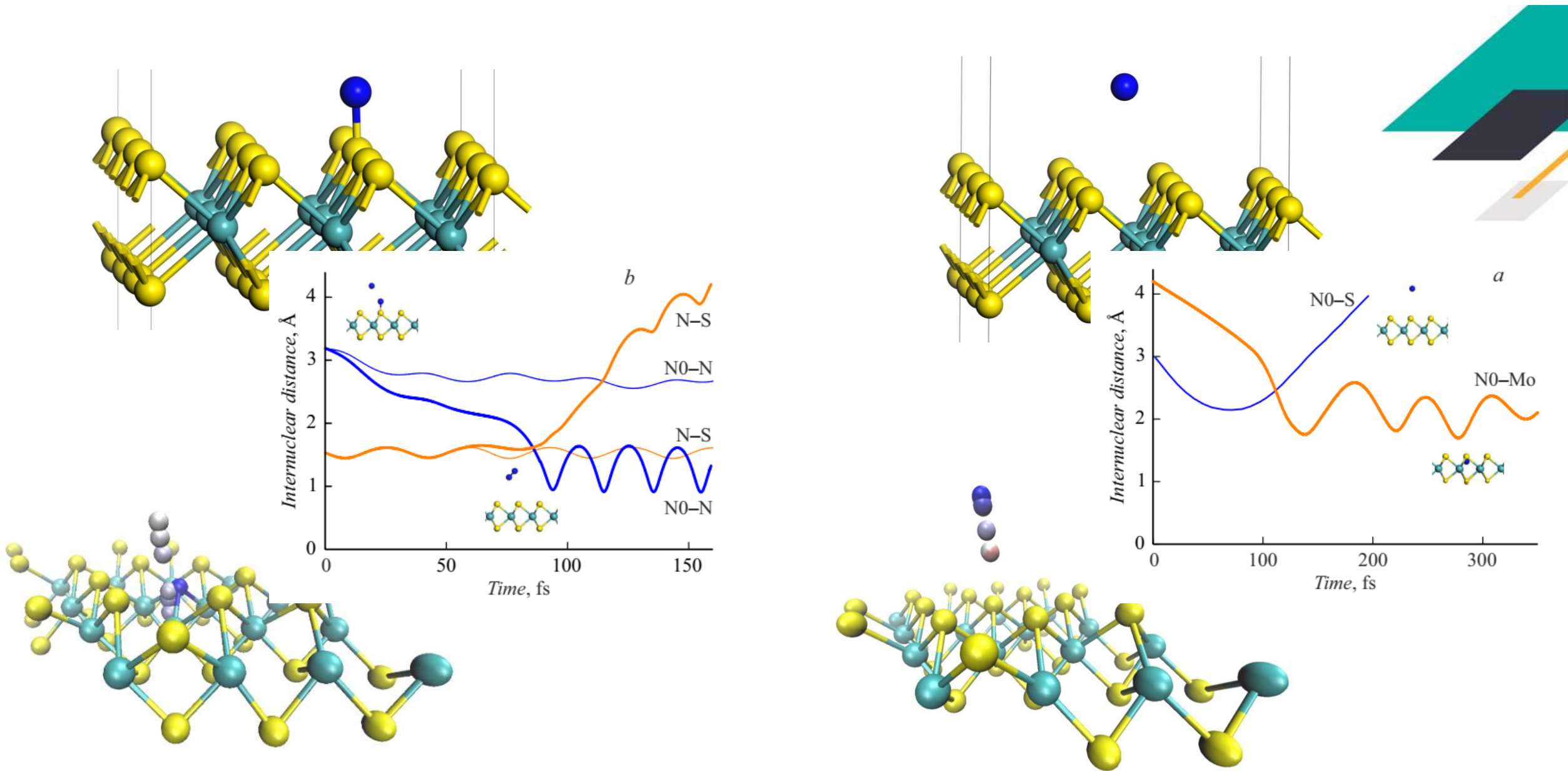
# Адсорбция на монослое с вакансией



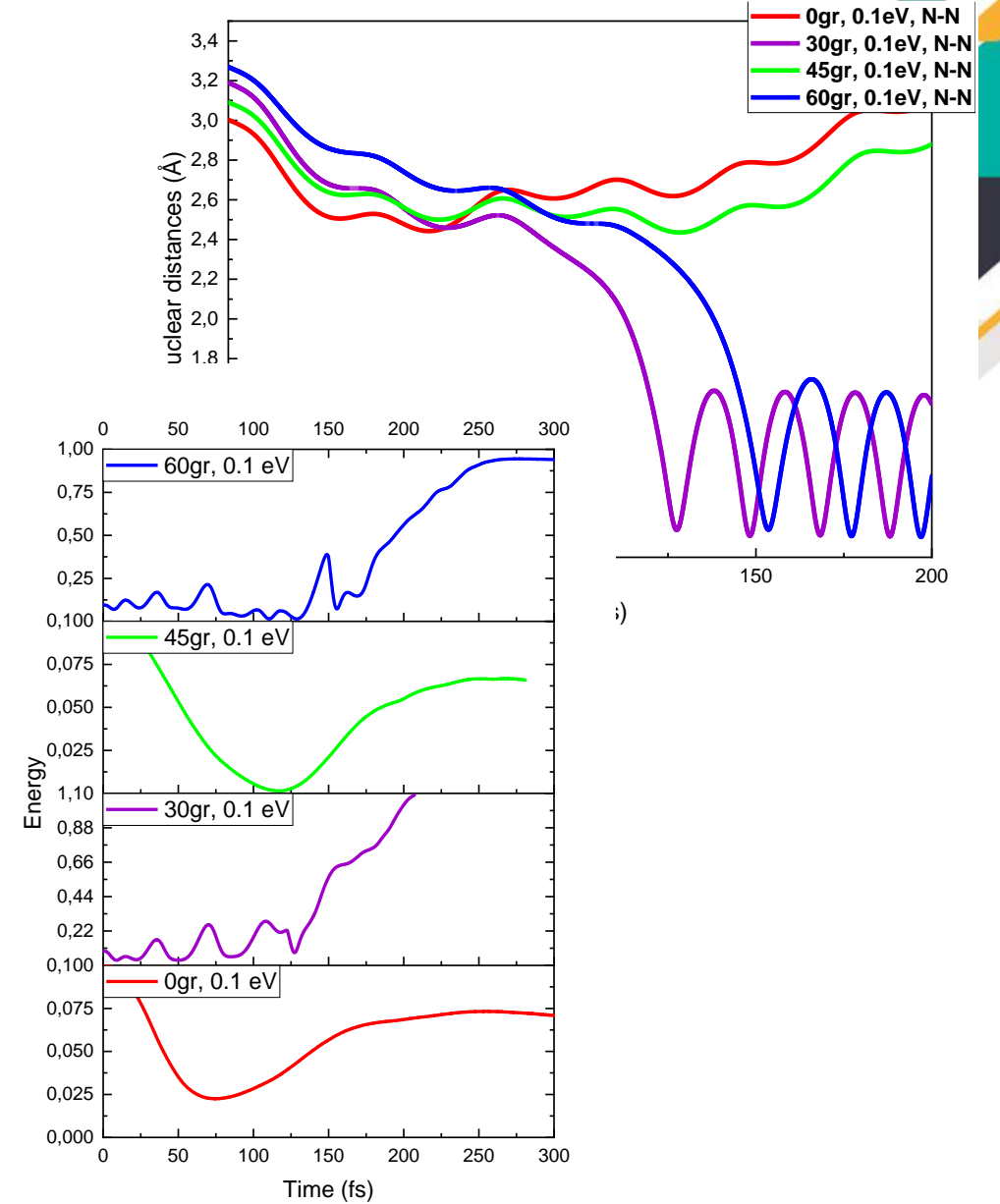
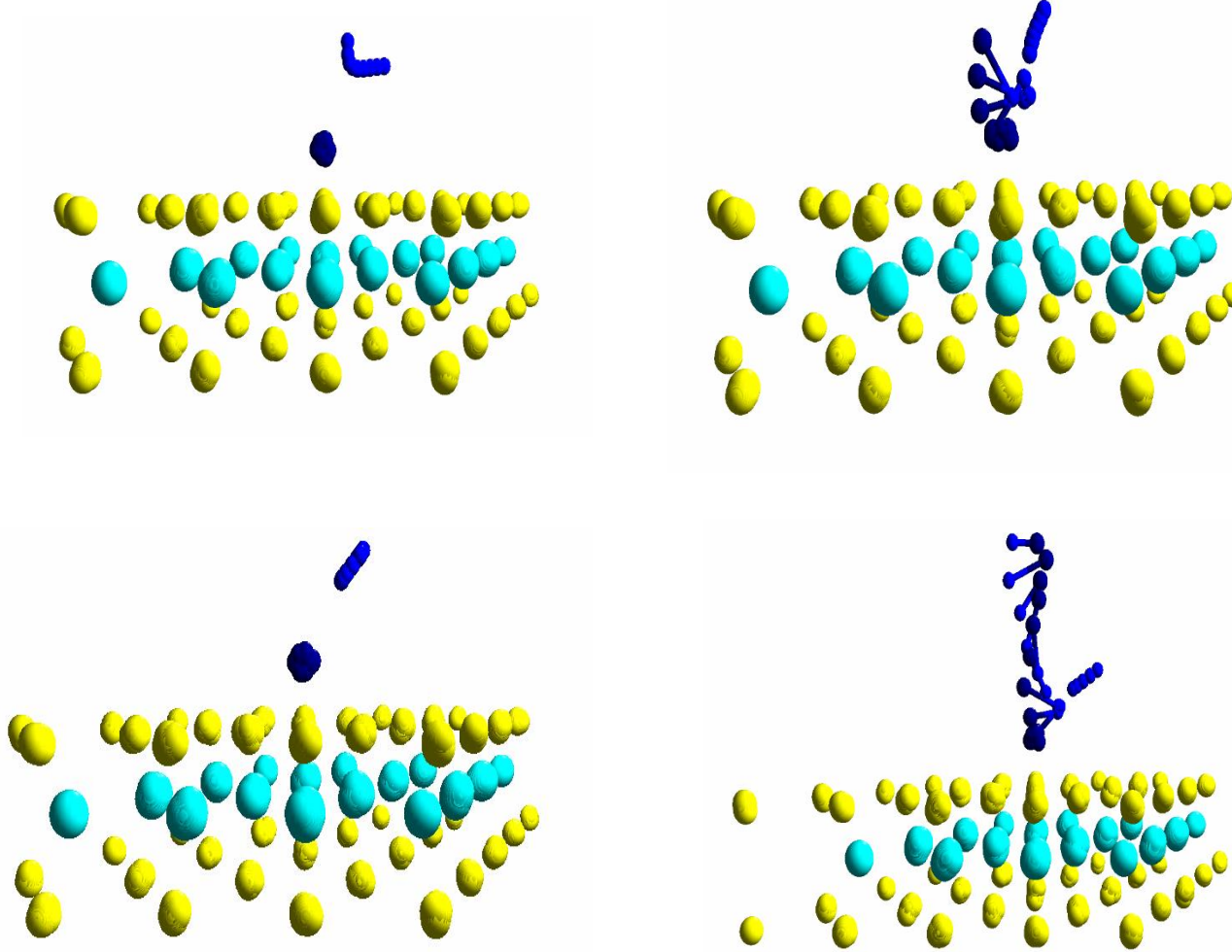
Атом	длина связи, Å		Угол, град	$E_{\text{ads}}$ , эВ
	Mo-S	Mo-X	Mo-X-Oz	
H(d)	2,44	2,09	118,1	-2,8
<b>N(d)</b>	<b>2,43</b>	<b>2</b>	<b>119,1</b>	<b>-3,45</b>
O(t)	2,43	2,07	121,7	-7,5
F(d)	2,41	2,16; 2,64	128,4; 124,2	-4,75
Cl(d)	2,42	2,5; 2,78	134,7; 132,6	-3,2



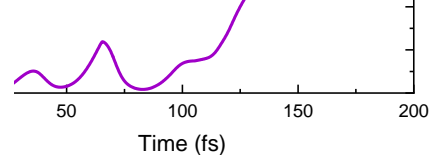
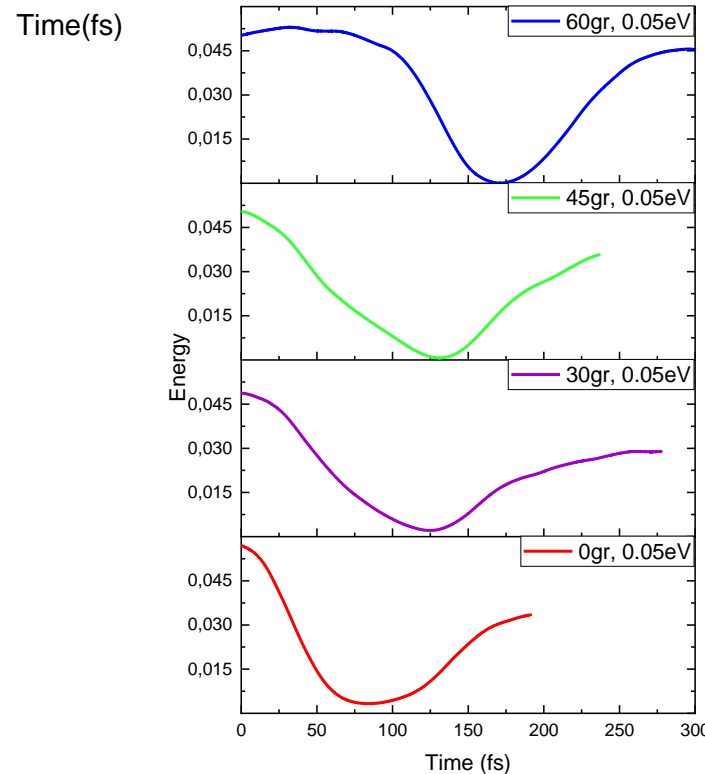
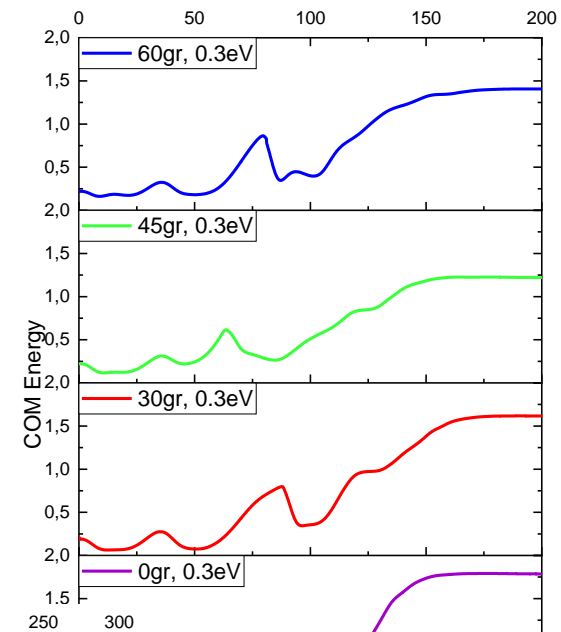
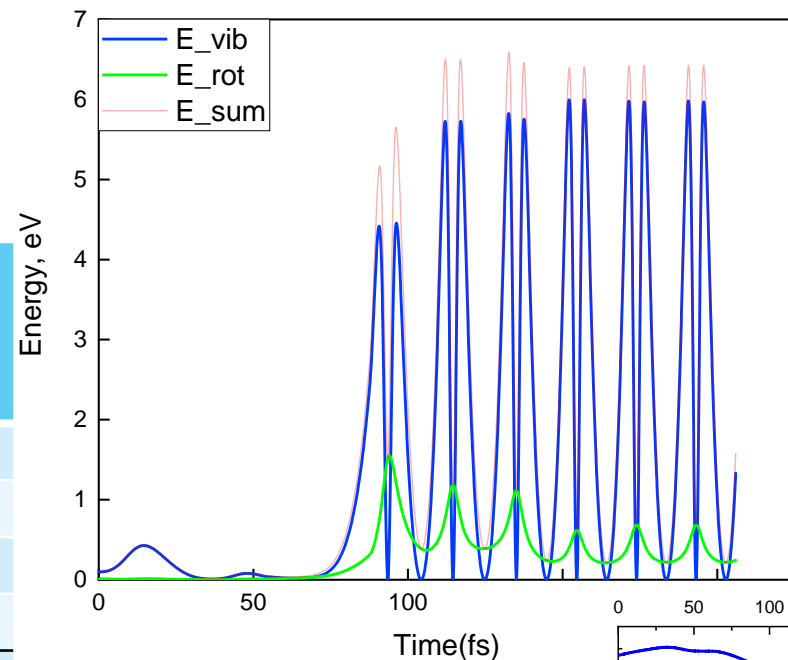
# Динамическое моделирование воздействия атомов N на поверхность монослоя MoS<sub>2</sub>



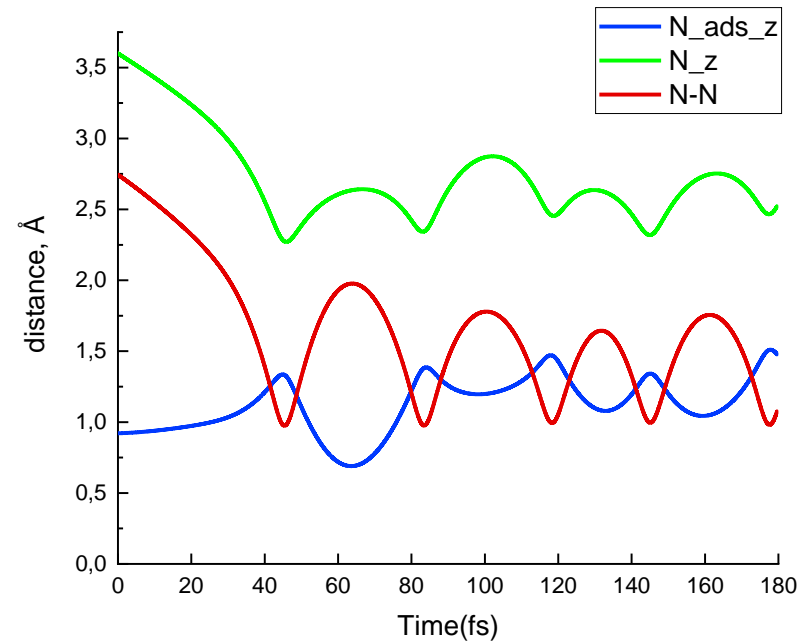
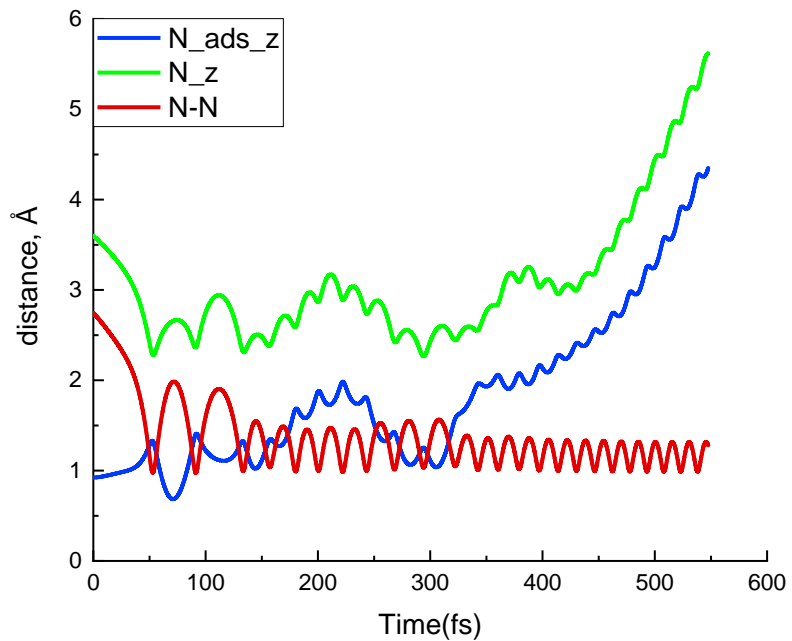
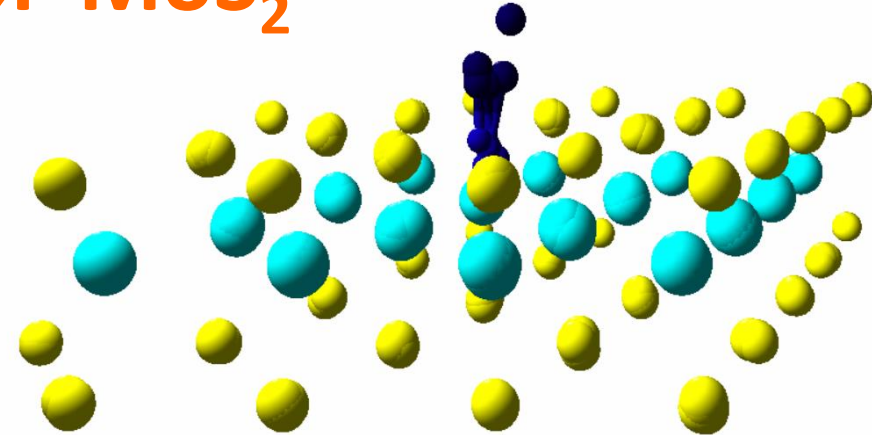
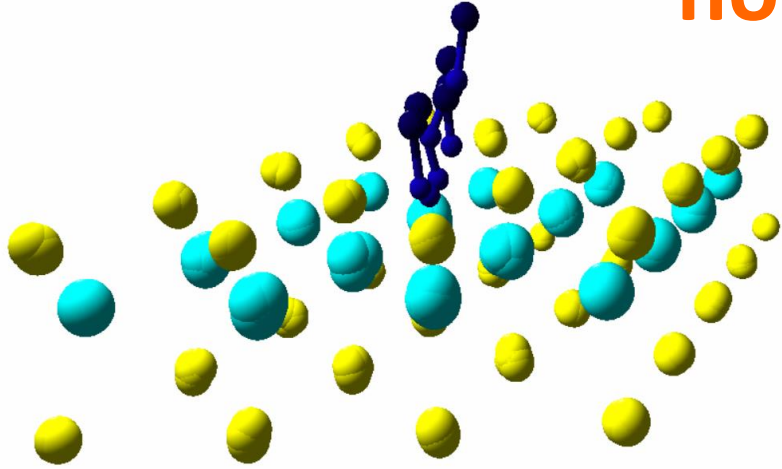
# Воздействие атома N на SN группу на поверхности монослоя MoS<sub>2</sub>



Угол налёта	Энергия атома азота, эВ	рекомбинация	Угол рассеяния	Отданная энергия монослою(в процентах)
0	0.05	Нет	43	41
	0.1	Нет	82	28
	0.2	Да	4	
	0.3	Да	0	
30	0.05	Нет	24	41
	0.1	Да	13	
	0.2	Да	26	
	0.3	Да	32	
45	0.05	Нет	47	29
	0.1	Нет	47	35
	0.3	Да	31	
60	0.05	Нет	67	46
	0.1	Да	10	
	0.2	Да	22	
	0.3	да	27	

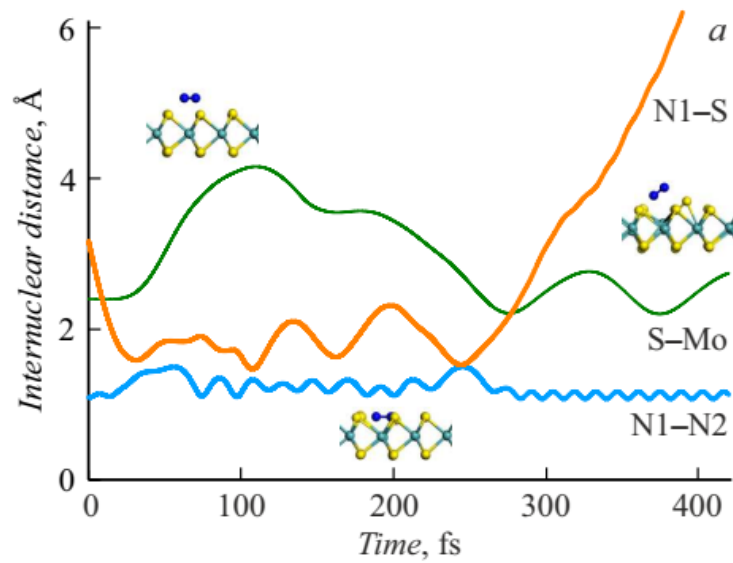
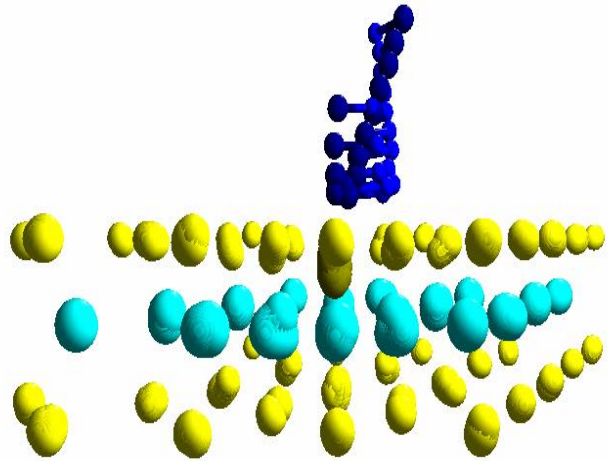


# Воздействие атома N на адсорбированный атом N на поверхности MoS<sub>2</sub>

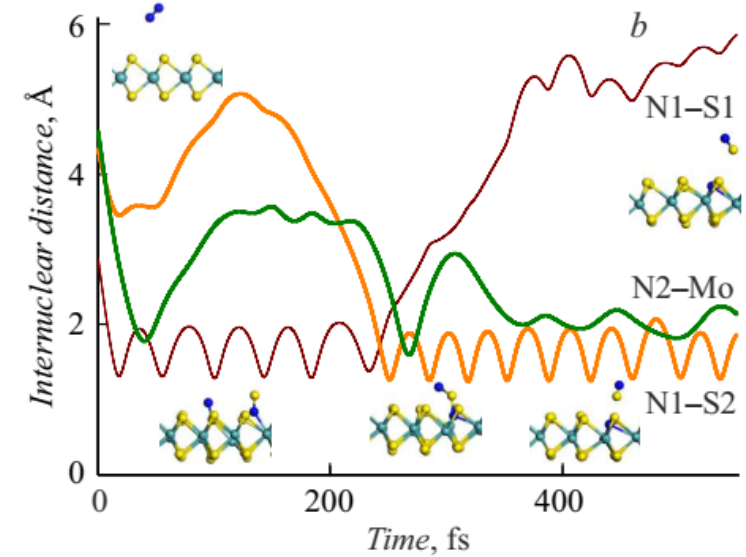
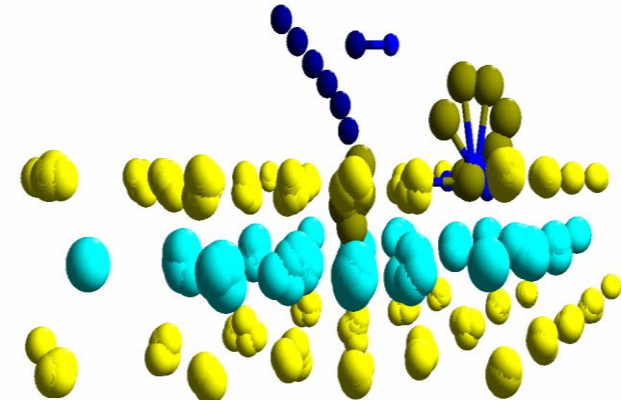


# Воздействие ионов $N_2^+$ на поверхность $MoS_2$

Рассеяние



Диссоциация при ударе и образование NS группы



# Основные результаты

1. Вероятность адсорбции тепловых атомов N в основном состоянии на поверхности монослоя MoS<sub>2</sub> является весьма низкой, а появление азота на поверхности может быть связано с воздействием возбужденных атомов N(<sup>2</sup>D,<sup>2</sup>P), наличием дефектов или ударами атомов и ионов с относительно высокой энергией (около 20 эВ).
2. При последовательном воздействии нескольких атомов N наблюдалась рекомбинация налетающего и адсорбированных атомов с образованием молекул N<sub>2</sub>, однако, как показали расчеты, для осуществления такого процесса требуется кинетическая энергия свыше 0,1 эВ
3. Воздействие быстрых атомов N и ионов N<sub>2</sub><sup>+</sup> с энергией около 20–30 эВ может вызывать смещение атомов S из узлов решетки с образованием поверхностных групп –NS или отрывом радикала SN.