

Улсын бүртгэлийн
дугаар: 9095578

Нууцын зэрэглэл: Б

Аравтын бүрэн
ангиллын код

Сэдэвт ажлын хэрэгжүүлэх
гэрээний дугаар: ШУС 2019-08

БОЛОВСРОЛ ШИНЖЛЭХ УХААНЫ ЯАМ
ШИНЖЛЭХ УХААН ТЕХНОЛОГИЙН ИХ СУРГУУЛЬ

**“НАНОХЭМЖЭЭСТ ВОЛЬФРАМ БОЛОН МОЛИБДЕНЫ
ДИСЕЛЕНИД ГАРГАН АВАХ СУДАЛГАА”**

Суурь судалгааны төслийн тайлан

2019-2022 он

Төслийн удирдагч:	Г.Мөнхсайхан, доктор (PhD), дэд профессор
Санхүүжүүлэгч байгууллага:	Шинжлэх ухаан технологийн сан
Захиалагч байгууллага:	Боловсрол, шинжлэх ухааны яам
Тайлан өмчлөгч байгууллага:	Шинжлэх ухаан технологийн их сургууль 8-р хороо, Бага тойруу, Сүхбаатар дүүрэг, Улаанбаатар, Монгол улс 14191 Э-шуудан: gmunkhsaikhan@must.edu.mn

Улаанбаатар хот

2022 он

Гарчиг

1	Хоёр хэмжээст шилжилтийн металлын дихалкогенид	19
1.1	ШМДХ –ын кристалл бүтэц ба электрон бүтэц	20
1.2	ШМДХ –ын бүтэц, электрон ба хэлбэлзлийн шинж чанар	22
1.2.1	Электрон бүтэц	23
1.2.2	Цэнэг зөөгчийн эффектив масс	24
1.2.3	MX_2 –ын хэлбэлзлийн шинж чанар	26
1.3	MoS_2 -ын дан үеийн электроны шинж чанарт деформацийн нөлөө	28
2	Хоёр хэмжээст вольфрам болон молибдены диселенид гарган авах	34
2.1	Туршилтын арга зүй	37
2.1.1	WSe_2 , $MoSe_2$ –ийн цөөн үе гарган авах	37
2.1.2	WSe_2 , $MoSe_2$ нимгэн үеийн оптик судалгаа	40
2.1.3	Атомын хүчний микроскопын судалгаа	50
2.1.4	Тэмтрэх туннелийн микроскопын судалгаа	56
3	Хоёр хэмжээст материалын онолын тооцоолол	61
3.1	Онолын судалгааны аргууд	61
3.2	Нягтын функционалын онол	62
3.2.1	Хоэнбэрг – Коны теоремууд	63
3.2.2	Хоэнбэрг – Коны вариацийн зарчим	65
3.2.3	Кон – Шэмийн тэгшитгэл	67
3.2.4	Локаль нягтын ойролцоолол	70
3.3	Тооцооллын процедур	73
3.4	Тооцооллын үр дүн	74

3.4.1	MoS ₂	74
4	Ерөнхий дүгнэлт	87

Зургийн жагсаалт

1.1	MX_2 үелсэн бүтцийн схемчилсэн диаграмм.	21
1.2	2H-MoS ₂ ба 3R-MoS ₂ –ын бүтэц.	21
1.3	2H-MoS ₂ кристалл бүтцийн дээрээс болон хажуугаас харуулсан байдал. Энд: a, b, c нь торын параметрууд. S ба Mo атомуудыг харгалзан цайвар, бараан өнгөөр харуулсан байна.	23
1.4	Гурван хэмжээст (балк) MoS ₂ –ын электрон хориотой бүсийн бүтэц. . .	24
1.5	(a) MoS ₂ –ын цөөн үеийн хувьд S-Mo-S сэндвичийн тоо ба хориотой бүсийн энергийн хамаарал. Фермийн түвшинг 0 эВ гэж тохируулсан. (b) дан үе, (c) хоёр үеийн хориотой бүсийн энергийн диаграмм.	25
1.6	[1000] кристаллографийн чиглэлийн дагуу харагдах балк MoS ₂ -ын Раманы 4 идэвхит моод, 2 инфра улаан идэвхит моодын атомын шилжилт [29].	27
1.7	MoS ₂ -ын дан ба балк төлвийн нягт ба фононы дисперсийн муруй. График дээрх цэгүүдийг туршлагын үр дүнгээс гаргаж авсан [30].	29
1.8	Раманы E_{2g}^1 ба A_{1g} моодуудын давтамж ба деформацийн хамаарал (онолын тооцоо) [16].	29
1.9	MoS ₂ -ын дан ба давхар үеийн энергийн хориотой бүсийн өргөн деформацийн хамаарал [17].	30
1.10	MoS ₂ -ын дан үеийн энергийн хориотой бүсийн өргөн. (a) 2%-аар сунгах. (b) 10%-аар сунгах. (c) 5%-аар шахах тохиолдол. (d) 15%-аар шахах. Фермийн түвшинг 0 эВ гэж тохируулсан [17].	31
1.11	Раманы E' ба A' моодуудын давтамж ба хүчлэгийн хамаарал [16]. . . .	31
2.1	Наноматериал гарган авах аргууд.	35

2.2	Вольфрам ба молибдены диселенид гарган авах аргачлал. (а) Цэвэр балк материал. (б) Адгезив туузан дээр вольфрам ба молибдены диселенидийн үе үүссэн байдал. (с) Шилэн суурин дээр вольфрам ба молибдены диселенидийн үеийг суулгах процесс.	38
2.3	Механик хуулалтын аргаар гарган авсан ШМДХ –ын дээж.	39
2.4	MoSe ₂ -ын диэлектрик нэвтрэх чадвар болон материалд тусах гэрлийн энергийн хамаарал [48].	42
2.5	WSe ₂ -ын диэлектрик нэвтрэх чадвар болон материалд тусах гэрлийн энергийн хамаарал [48].	42
2.6	MoSe ₂ ба WSe ₂ –ын дан үеийн хугарлын илтгэгч, энергийн хамаарал. .	43
2.7	MoSe ₂ ба WSe ₂ –ын дан үеийн дан үеийн сулруулах коэффициент ба энергийн хамаарал.	43
2.8	MoSe ₂ ба WSe ₂ –ын дан үеийн гадаргаас ойх гэрлийн ойлт ба энергийн хамаарал.	44
2.9	MoSe ₂ ба WSe ₂ –ын дан үеийн гэрэл нэвтрүүлэлт ба энергийн хамаарал.	44
2.10	MoSe ₂ ба WSe ₂ –ын дан үеийн гадаргын гэрэл гадаргын шингээлт ба энергийн хамаарал.	45
2.11	WSe ₂ , MoSe ₂ –ын цөөн үеүдийн оптик ялгарлыг илрүүлэх бүтэц.	45
2.12	Балк молибдены дисульфид болон цөөн үеийн оптик микроскопоор харагдах байдал.	46
2.13	SiO ₂ /Si (270 нм) суурин дээр суулгасан ШМДХ-ын цөөн үеийн оптик ялгарал ба үеийн тооны хамаарал [45].	48
2.14	MoSe ₂ –ын балк болон цөөн үеийн харагдах байдал.	49
2.15	MoSe ₂ –ын балк болон цөөн үеийн харагдах байдал.	49
2.16	WSe ₂ –ын балк болон цөөн үеийн харагдах байдал.	50
2.17	WSe ₂ –ын балк болон цөөн үеийн харагдах байдал.	50
2.18	MoSe ₂ –ын цөөн үеийн атомын хүчний микроскопын зураг. (а) ~2×2 мкм хөндлөн хэмжээтэй 16-20 үе бүхий мөхлөг, (б), (с) 3-4.7 нм зузаантай жижиг мөхлөгүүд, (d) MoSe ₂ –ын 10 үеэс тогтох том хэмжээтэй мөхлөг.	52

2.19	MoSe ₂ –ын цөөн үеийн атомын хүчний микроскопын зураг. (a) MoSe ₂ –ын 5 нм зузаантай мөхлөг, (b) том хэмжээтэй 2-3 үе, (c) 7 мкм орчим хөндлөн хэмжээтэй 5-6 үе бүхий мөхлөг.	53
2.20	MoSe ₂ –ын цөөн үеийн атомын хүчний микроскопын зураг. (a) MoSe ₂ –ын дутуу хуулагдсан 4.5 нм зузаантай мөхлөг, (b) MoSe ₂ –ын том хэмжээтэй 5-6 үе, (c) MoSe ₂ –ын 5-6 үе.	54
2.21	WSe ₂ –ын цөөн үеийн атомын хүчний микроскопын зураг. (a) WSe ₂ –ын 7.9 нм зузаантай мөхлөг, (b) 1.5 мкм ² орчим хөндлөн хэмжээтэй 6.02-6.4 нм зузаантай мөхлөг, (c) ~8×8 мкм хөндлөн хэмжээтэй 27 үе бүхий мөхлөг.	54
2.22	WSe ₂ –ын цөөн үеийн атомын хүчний микроскопын зураг. (a) WSe ₂ –ын 10-11 үеэс тогтох мөхлөг, (b) ~1×0.8 мкм хөндлөн хэмжээтэй 7-8 үе, (c) WSe ₂ –ын 9-10 үеэс тогтох мөхлөг.	55
2.23	WSe ₂ –ын 7-9-р дээжний цөөн үеийн атомын хүчний микроскопын зураг. (a) WSe ₂ –ын 6-10 үеэс тогтох мөхлөгүүд, (b) захаараа хуулагдаж нимгэрсэн 10 үе бүхий мөхлөг, (c) захаараа нимгэрсэн мөхлөгийн гадаргуугийн зураг.	55
2.24	WSe ₂ -ын цэвэр гадаргуугийн ТТМ –ынн зураг. (a) WSe ₂ -ын цэвэр гадаргуу дээрх степ террасыг харуулсан том хэмжээтэй буюу 450 нм-ийн ТТМ –ынн зураг. (b) WSe ₂ -ын цэвэр гадаргуугийн атомын түвшний нарийвчлал бүхий зураг. Зураг дээрх тод толбо нь гадаргуугийн селенийн атомууд болно. Мөн гадаргуугийн шугаман анализ хийсэн хэсгийг зураг дээр ногоон сумаар тэмдэглэв. Гадаргуугийн (1×1) эгэл торыг нил ягаан өнгийн параллелограммаар дүрслэв.	57

2.25	WSe ₂ -ын гадаргуугийн атомын түвшинд гарган авсан ТТМ-ын зураг. (a) ба (b) зурагт А болон В гэсэн гадаргуугийн хоёр цэгэн гажиг харагдаж байна. (a) Дээжний гадаргуугийн селенийн атомын доод үе дэх вольфрамдын атомын байрлал дахь донор хольц атомын (W ваканс) үүсгэсэн гажиг. Зураг дээр гажиг байгаа хэсгийг ногоон өнгийн тойргоор тэмдэглэв. (b) Дээжний гадаргуугийн селенийн доод үе дэх вольфрамдын атомын байрлал дахь акцептор хольц атомын үүсгэсэн гажиг. Зураг дээр гажиг байгаа хэсгийг цэнхэр өнгийн тойргоор тэмдэглэв.	58
2.26	WSe ₂ -ын гадаргуу дээрх гажгуудын нарийвчилсан зураг. (a) А гажгийн өндөр нарийвчлалтай авсан ТТМ –ын зураг. (b) В гажгийн өндөр нарийвчлалтай авсан ТТМ –ын зураг. Ногоон гурвалжингаар А ба В гажгийн ерөнхий хэлбэрийг дүрслэв. Гурвалжингуудын төв дэх цэгээр гажгийн байршлыг нарийвчлан харуулав. (c) WSe ₂ –ын кристалл торыг дээрээс болон хажуугаас харуулсан атомын геометр загварчлал. Гажгуудын байрлалыг хар өнгийн сумаар тэмдэглэв. Мөн (1×1) эгэл торыг ногоон өнгөтэй параллелограммаар дүрслэн харуулав.	59
3.1	Хоэнберг –Коны теоремын схем	66
3.2	Кон-Шэмийн тэгшитгэлийг бодох схем зураг	69
3.3	(a) MoS ₂ дан үеийн 3×3 суперторын бүтэц. Том хар болон жижиг шар өнгийн бөмбөлгүүд нь Мо ба S атомуудыг илэрхийлнэ. (b) Хүхрийн нэг атомын ваканс дээр осмийн атом суусан болохыг харуулсан схем диаграмм.	73
3.4	(a) Os атомгүй болон (b) Os атом бүхий MoS ₂ дан үеийн төлөвийн фононы нягт (ТФН). (c) $\eta = -4\%$ (зүүн талын), $\eta = 0$ (дунд талын) ба $\eta = 4\%$ (баруун талын) үед Os/MoS ₂ –ын фононы давтамжийн дисперсийн муруй.	76

- 3.5 (a) $\eta = -4\%$ (цэгтэй тасархай шугам), $\eta = 0$ (үргэлжилсэн шугам) ба $\eta = 4\%$ (тасархай шугам) үед Os атомгүй (цэгэн шугам) болон Os атом бүхий MoS₂ дан үеийн электроны, хэлбэлзлийн болон магноны чөлөөт энергийн температураас хамаарах хамаарал. (b) Os атомгүй (цэгэн шугам) болон Os атом бүхий (үргэлжилсэн шугам) MoS₂ дан үеийн чөлөөт энергийн өөрчлөлт болон температурын хамаарал. 77
- 3.6 (a) $\eta = -4\%$, (b) $\eta = 0$, (c) $\eta = 4\%$ тохиолдлууд дахь MoS₂ дан үеийн гадарга дэх Os атомын спин ба d -орбиталын ПТН. (d)–(f) Os атомын доор байрлах Mo атомд харгалзах ТН. Улаан ба цэнхэр өнгөөр будсан хэсэг нь харгалзан үндсэн ба үндсэн бус спины төлөвийг харуулна. Фермийн түвшинг тэг байхаар тохируулсан. 78
- 3.7 (a) z тэнхлэгийн дагуу (\perp) ба xy хавтгай дээрх (\parallel) μ_0 орбитын соронзон момент. (b) $\eta = 0$, (c) $\eta = 4\%$ тохиолдлууд дахь MoS₂ дан үеийн гадарга дэх Os атомын соронзон кристаллын анизотропын энерги $E_{СКА}$ 80
- 3.8 $\eta = -4, 0, 4\%$ байх үед MoSe₂ –ын дан үед суусан Os атомын (a), (b), (c) d -орбиталын үүсгэх соронзон кристаллын анизотропын энерги, (d), (e), (f) хольцын спины электрон бүтэц. (a), (b), (c) зураг дахь шар ба гана нь $E_{СКА}$ –ийн эерэг ба сөрөг утгуудыг харуулна. (d), (e) ба (f) зурагт $e'(d_{xy/x^2-y^2})$, $e''(d_{xz/yz})$ ба $a_1(d_{z^2})$ орбиталын төлөвийг хар/хөх, ногоон/улбар шар ба улаан өнгөөр үзүүлэв. Фермийн түвшинг тэг байхаар тохируулав. 81
- 3.9 MoS₂ –ын дан үед суулгасан Os атомын (a) спины соронзон момент болон (b) СКА –ын энергийн эффе́ктив хүчлэгээс хамаарах хамаарал. Энд: Деформацын хэмжээ харилцан адилгүй байгаа болно. 82

3.10 $\eta = 4\%$ деформацад орсон MoSe_2 -ын дан үеийн $E_{\text{эфф}} = -0.23B/\text{\AA}$ ба $E_{\text{эфф}} = 0.23B/\text{\AA}$ хүчлэгтэй байх тохиолдолд d орбиталаар үүсгэгдэх $E_{\text{СКА}}$ (a) ба (b), (c) ба (d) хольцын спины электроны бүсийн бүтэц. (a) ба (b) зураг дахь шар болон хөх багана нь $E_{\text{СКА}}$ энергийн эерэг ба сөрөг утгыг харуулна. (c) ба (d) зурагт тэг-орны бүсийн бүтцийг тасархай шугамаар зурж харьцуулав. (d) зурагт a_1 бүс нь Фермийн түвшнээс доогуур \overline{KM} шугам дагуу байрлана. Фермийн түвшинг тэг байхаар тохируулав. 84

Хүснэгтийн жагсаалт

1.1	ШМДХ –ын хориотой бүсийн өргөн ба соронзон шинж чанарыг "Ab initio" аргаар тооцоолсон үр дүн (Ферросоронзон-ФС, антиферросоронзон -АФС)	22
1.2	MoS ₂ -ын олон үеийн хориотой бүсийн өргөн. Нүх ба электроны эффектив массыг электроны массаар m_0 илэрхийлнэ (ВБМ-валентын бүсийн максимум, ДБМ-дамжууллын бүсийн минимум).	26
1.3	Локал нягтын ойролцооллоор тооцоолсон фононы давтамж [16].	28
1.4	Деформацад орсон MoS ₂ -ын дан үеийн электрон ба нүхний эффектив массыг тооцоолсон утга	33
1.5	Шахах болон сунгах деформацад орсон MoS ₂ -ын дан үеийн хэлбэлзлийн давтамжийн тооцоолсон утгууд	33
2.1	ШМДХ –ын оптик микроскопийн шинжилгээний дүн. Дээжний үеийн тоо ба зузааны хамаарал.	51
3.1	Харилцан адилгүй деформацад орсон Os/MoS ₂ –ын a - торын тогтмол (\AA), h - Os атомын Mo атомуудын хавтгайгаас алслагдах өндөр (\AA), μ_s - спины соронзон момент ($\mu_B/\text{атом}$), $\delta\mu_o$ - орбитын моменты анизотроп ($\mu_B/\text{атом}$), $E_{\text{МКА}}$ - соронзон кристаллын анизотропын энерги (мэВ/атом).	85
3.2	Харилцан адилгүй деформацад орсон Os/MoS ₂ системийн үндсэн төлөвийн энерги E_0 , энтальпи H_f , a ба b торын параметр, μ_s - спины соронзон момент болон K_U - соронзон кристаллын анизотропын утгуудыг тодорхойлсон үр дүн.	85

3.3	Харилцан адилгүй деформацад орсон Os/MoSe ₂ системийн үндсэн төлөвийн энерги E_0 , энтальпи H_f , a ба b торын параметр, μ_s - спины соронзон момент болон K_U - соронзон кристаллын анизотропын утгуудыг тодорхойлсон үр дүн.	86
3.4	Харилцан адилгүй деформацад орсон Os/WS ₂ системийн үндсэн төлөвийн энерги E_0 , энтальпи H_f , a ба b торын параметр, μ_s - спины соронзон момент болон K_U - соронзон кристаллын анизотропын утгуудыг тодорхойлсон үр дүн.	86
3.5	Харилцан адилгүй деформацад орсон Os/WSe ₂ системийн үндсэн төлөвийн энерги E_0 , энтальпи H_f , a ба b торын параметр, μ_s - спины соронзон момент болон K_U - соронзон кристаллын анизотропын утгуудыг тодорхойлсон үр дүн.	86

РЕФЕРАТ

Шинжлэх ухаан, технологийн сантай байгуулсан ШУСс-2019/08 тоот гэрээний дагуу “Нанохэмжээст вольфрам болон молибдены диселенид гарган авах судалгаа” суурь судалгааны төсөл нь 2019-2022 онд ШУТИС-ийн Хэрэглээний Шинжлэх Ухааны Сургууль дээр хэрэгжсэн.

Энэ төслийн хүрээнд хоёр хэмжээст вольфрам болон молибдены диселенид гарган авах зорилго дэвшүүлж, дэвшүүлсэн зорилгод хүрэхийн тулд дараах зорилтуудыг дэвшүүлж ажилласан. Үүнд:

- Орчин үеийн материал судлалын шинэ аргууд дээр тулгуурлан нанотехнологийн үйлдвэрлэлийн хэрэгцээг хангах хоёр хэмжээст материал гарган авах;
- Гарган авсан материалын гадаргуугийн судалгааг гүйцэтгэх;
- Дээрх материалын соронзон шинж чанарыг НФО-оор тооцоолох;
- ШУТИС-ийн ХШУС-д хэрэгжиж буй «Наношинжлэх ухаан, инженерчлэл» хөтөлбөрийн бакалавр болон ахисан түвшний оюутнуудыг эрдэм шинжилгээний ажилд сургаж дадлагажуулах зэрэг болно.

Төслийн хүрээнд хэрэгжүүлсэн судалгааны ажлын хүрээнд бид дараах үр дүнд хүрсэн. Үүнд:

- Механик хуулалтын аргаар MoSe_2 ба WSe_2 -ын цөөн үе бүхий дээжүүд амжилттай гарган авсан.
- Гарган авсан дээжин дэх цөөн үеийн тоог оптик судалгааг явуулж оптик судалгаагаар цөөн үе хэмээн тогтоогдсон дээжнүүдийг атомын хүчний микроскопын судалгаагаар баталгаажуулсан. Атомын хүчний судалгаагаар дээжний үеийн тоо болон зузааны тогтоож MoSe_2 ба WSe_2 –ын цөөн үе гаргасан болохыг баталгаажуулсан.
- Өндөр вакуумын камерт хуулалтын арга ашиглан хэдэн зуун нанометрийн өргөнтэй атомын хэмжээний гөлгөр шаталсан үет бүтэц бүхий MoSe_2 ба WSe_2

дээжийн цэвэр гадаргууг гарган авсан. Шаталсан үет бүтэц дээр атомын түвшинд нарийвчлан авсан ТТМ-ын хэмжилтээр гадаргуугийн морфологийг судалж, гадаргууд хоёр төрлийн гажиг үүссэн болохыг тогтоосон.

- НФО-оор хоёр хэмжээст MoSe_2 ба WSe_2 -ийн соронзон шинж чанарыг тодорхойлсон. Цахилгаан орон болон деформацын нөлөөгөөр дээрх хоёр материалын соронзон шинж чанарыг тохируулах боломжтойг харуулсан.

Төслийн үр дүнгээр эрдэм шинжилгээний эрдэм шинжилгээний өгүүлэл - 7, нэг сэдэвт бүтээл нэгийг хэвлүүлж, зохиогчийн эрхийн гэрчилгээ -1 -ийг авсан болно. Мөн дотоод болон олон улсын эрдэм шинжилгээний хуралд 6 илтгэл, ШУТИС-ийн Физикийн тэнхимийн профессорын семинарт 6 удаа, ШУТИС, ХШУС-ийн эрдмийн зөвлөлөөр 3 удаа хэлэлцүүлсэн. Төсөл хэрэгжих хугацаанд хоёр оюутан (ШУТИС-ийн "Наношинжлэх ухаан, инженерчлэл" хөтөлбөрийн 4-р ангийн оюутан Г.Уянга, Н.Батням) бакалаврын дипломын ажил хамгаалж, нэг докторант оюутан докторын судалгааны ажлаа гүйцэтгэж байна. Төгсөгч оюутан Г.Батням судалгааны ажлаа үргэжлүүлэн БНСУ-ын Инчоны Үндэсний Их Сургуульд магистрын хөтөлбөрт тэтгэлэгтэй суралцахаар шалгарсан байна.

Түлхүүр үг: Хоёр хэмжээст материал; гадаргуугийн морфологи; цэгэн гажиг; механик хуулалтын арга; үеийн зузаан; террас; НФО-ын тооцоолол, соронзон шинж чанар, хольцын нөлөө.

Төслийн гүйцэтгэгчдийн нэрсийн жагсаалт

1. Г.Мөнхсайхан (ШУТИС, ХШУС, профессор) удирдагч
2. Д.Отгонбаяр (ШУТИС, ХШУС, ЭНБ дарга) гүйцэтгэгч
3. Б.Одонтуяа (ШУТИС, ХШУС, докторант) гүйцэтгэгч
4. Д.Наранчимэг (ШУТИС, ХШУС) гүйцэтгэгч
5. Р.Буянжаргал (ШУТИС, ХШУС, докторант) гүйцэтгэгч
6. Л. Сарантуяа (ШУА, ФТХ, эрдэм шинжилгээний ажилтан, доктор) гүйцэтгэгч
7. Г.Мөнгөнцэцэг (ШУА, ФТХ, техникийн ажилтан, магистр) гүйцэтгэгч

Сэдэвт ажлын хүрээнд хэвлэгдсэн бүтээлийн жагсаалт

1. Dorj Odkhuu, Gonchigsuren Munkhsaikhan, Shirchinnamjil Nyamdelger, Deleg Sangaa. Electric and strain engineering of a single magnet anisotropy on transition metal dichalcogenides. Accepted to Physical Chemistry Chemical Physics. 2022
2. G.Munkhsaikhan, D.Otgonbayar, B.Odontuya, R.Buyanjarгал, D.Naranchimeg. Scanning Tunneling Microscopy Observation of WSe₂ Surface. 2021. Solid State Phenomena 323:140
3. G. Munkhsaikhan, D. Otgonbayar, R. Buyanjargal, B. Odontuya, D.Naranchimeg. Optical and AFM studies of few layers of transition metal dichalcogenides. JASE-A, Volume1, Issue1, p.28-31, 2019.
4. Munkhsaikhan Gonchigsuren, Odkhuu Dorj. Electric-field and strain effect on magnetism on transition metal dichalcogenides. JASE-A, Volume2, Issue1, 2021
5. Г.Мөнхсайхан, Б.Одонтуяа, Р.Буянжаргал, Д.Отгонбаяр, О.Сүх, Д. Наранчимэг. “MoSe₂ ба WSe₂-ийн дан үеийн оптик шинж чанарын судалгаа”. Физик сэтгүүл. №29(518). х.28-31 (Онолын тооцооллын үр дүн)
6. G.Munkhsaikhan, R.Buyanjarгал, B.Odontuya, D.Otgonbayar, D.Naranchimeg, L. Sarantuya, N.Tuvjargal. Optical Identification of Few Layers of MoS₂, MoSe₂, WS₂ and WSe₂. Физик сэтгүүл. №29(518). х.32-35, 2019. (Туршилтын ажлын үр дүн)

7. Д. Отгонбаяр, Г.Мөнхсайхан, Б.Одонтуяа, Д.Наранчимэг. WSe₂-ийн гадаргуугийн сканнин туннелийн микроскопын судалгаа. Физик сэтгүүл №30(527). х. 15-18. 2021.

Сэдэвт ажлын үр дүнг эрдэм шинжилгээний хуралд хэлэлцүүлсэн байдал:

1. G. Munkhsaikhan and etc., Mechanical exfoliation and layered TMDs. First International Conference on Applied Science and Engineering 2019, April 2019. Ulaanbaatar, Mongolia. Oral Presentation.
2. G.Munkhsaikhan, R.Buyanjargal, B.Odontuya, D.Otgonbayar, D.Naranchimeg, L. Sarantuya, N.Tuvjargal. Optical Identification of Few Layers of MoS₂, MoSe₂, WS₂ and WSe₂. "ICMS₂019" , Ulan-Ude, Russia. 2019. Poster presentation.
3. G.Munkhsaikhan, D.Otgonbayar, B.Odontuya, R.Buyanjargal, D.Naranchimeg. Scanning Tunneling Microscopy Observation of WSe₂ Surface. 9th International Conference of Material Science -2020, Ulaanbaatar Mongolia. Oral presentation.
4. G.Munkhsaikhan, D.Odkhuu. Strain effect on magnetism on strained transition metal dichalcogenides. 10th International Conference of Material Science -2021, Ulaanbaatar Mongolia. Oral presentation.
5. Г.Мөнхсайхан, Б.Одонтуяа, Р.Буянжаргал, Д.Отгонбаяр, О.Сүх, Д. Наранчимэг. "MoSe₂ ба WSe₂-ийн дан үеийн оптик шинж чанарын судалгаа". "Физик, Физик боловсролын асуудал -V", МФН-ийн ЭШ-ний хурал, 2019 он, Улаанбаатар хот.
6. G.Munkhsaikhan, R.Buyanjargal, B.Odontuya, D.Otgonbayar, D.Naranchimeg, L. Sarantuya, N.Tuvjargal. Optical Identification of Few Layers of MoS₂, MoSe₂, WS₂ and WSe₂. "Физик, Физик боловсролын асуудал -V", МФН-ийн ЭШ-ний хурал, 2019 он, Улаанбаатар хот.

7. ШУТИС-ийн Физикийн тэнхимийн профессорын семинарт 6 удаа, ШУТИС, ХШУС-ийн эрдмийн зөвлөлөөр 3 удаа хэлэлцүүлсэн.

Нэг сэдэвт бүтээл, зохиогчийн эрхийн гэрчилгээ:

1. Г.Мөнхсайхан. Хоёр хэмжээст материал: Шилжилтийн металлын дихалкогенидын нимгэн үеийн судалгаа. 2019 он (22хх). Нэг сэдэвт бүтээл. ISBN: 978-9919-21-904-8.
2. Г.Мөнхсайхан. Хоёр хэмжээст материал: Шилжилтийн металлын дихалкогенидын нимгэн үеийн судалгаа. Зохиогчийн эрхийн гэрчилгээ. №10915. 2019 он

Товчилсон үгийн жагсаалт

- БШУЯ – Боловсрол, шинжлэх ухааны яам
ШУТС – Шинжлэх ухаан технологийн сан
ШУТИС – Шинжлэх ухаан, технологийн их сургууль
ХШУС – Хэрэглээний шинжлэх ухааны сургууль
ШУА – Шинжлэх ухааны академи
ФТХ – Физик, технологийн хүрээлэн
ШМДХ – Шилжилтийн металлын дихалкогенид
СТМ – Сканин электрон микроскоп
НФО – Нягтын функционалын онол
НФХО – Нягтын функционалын хөндөлтийн онол
СКА – Соронзон кристаллын анизотроп
СОХ – Спин-орбитын хос
ТФН – Төлөвийн фононы нягт
ТН – Төлөвийн нягт
ПТН – Проектордсон электроны төлөвийн нягт

Төслийн календарчилсан төлөвлөгөө

	Хийх ажил	2019 он (улирал)				2020 он (улирал)				2021 он (улирал)			
		I	II	III	IV	I	II	III	IV	I	II	III	IV
1	Si/SiO ₂ суурин дээр молибдений селенид цөөн үеийг гарган авах	■	■										
2	Молибдений селенидийн оптик судалгаа			■	■								
3	Хоёр хэмжээст вольфрамын селенид гаргана авах	■	■										
4	Вольфрамын селенидийн оптик судалгаа			■	■								
5	Хоёр хэмжээст материалын онолын тооцоолол				■	■	■	■	■				
6	Молибден, вольфрамын селенидийн АХМ-ийн судалгаа					■	■	■	■				
7	Молибден, вольфрамын селенидийн РС-ийн судалгаа							■	■	■	■	■	
8	Үр дүнгээр өгүүлэл хэвлүүлэх, улс болон олон улсын хуралд хэлэлцүүлэх				■				■				■
9	Үр дүнгээр тайлан бичиж хүлээлгэн өгөх											■	■

Төслийн үр дүнгийн даалгавар

д/д	Төслөөр бий болох үр дүн	Тоо хэмжээ	Үр дүнгийн үзүүлэлт	Үр дүнг хүлээлгэн өгөх хугацаа (он, сар)
1	Si/SiO ₂ суурин дээр молибдений селенид цөөн үеийг гарган авах	10 дээж	Механик хуулалтын аргаар гаргасан 10 дээж/MoSe ₂ /	2019-7 сар
2	Молибдений селенидийн оптик судалгаа	10 дээж	Оптик судалгааны аргачлал, үр дүн	2019-12 сар
3	Хоёр хэмжээст вольфрамын селенид гарган авах	10 дээж	Механик хуулалтын аргаар гаргасан 10 дээж/WSe ₂ /	2019-7 сар
4	Вольфрамын селенидийн оптик судалгаа	10 дээж	Оптик судалгааны аргачлал, үр дүн	2019-12 сар
5	Хоёр хэмжээст материалын онолын тооцоолол	1 материал	Тооцооллын үр дүн	2020-12 сар
6	Молибден, вольфрамын селенидийн AFM-ийн судалгаа	10 дээж	AFM судалгааны үр дүн, аргачлал	2020-12 сар
7	Молибден, вольфрамын селенидийн STM-ийн судалгаа	10 дээж	STM судалгааны үр дүн, аргачлал	2021-9 сар
8	Үр дүнгээр өгүүлэл хэвлүүлэх	6	Олон улсын сэтгүүл, хурлын эмхтгэлд -2, дотоодын мэргэжлийн сэтгүүлд -4	Тайланг хугацаанд
9	Үр дүнгээр өгүүлэл хэвлүүлэх, улс болон олон улсын хуралд хэлэлцүүлэх	6	Олон улсын эрдэм шинжилгээний хуралд-3, дотоодын эрдэм шинжилгээний хуралд- 3	Тайланг хугацаанд
10	Нэг сэдэвт бүтээл	1	Нэг сэдэвт бүтээл	2021-06
11	Зохногчийн эрх	1	Нэг сэдэвт бүтээлээр зохиогчийн эрх авах	2021-12
12	Үр дүнгээр тайлан бичиж хүлээлгэн өгөх	1	Төслийн тайлан	2021-12 сар

“Нанохэмжээст вольфрам болон молибдений диселенид гарган авах судалгаа”
 нэртэй суурь судалгааны төсөл хэрэгжүүлэх, санхүүжүүлэх 2019 оны 3 сарын
 25-ны өдрийн ШУСС-2019/08 дугаар гэрээний 5 дугаар хавсралт

Эрдэм шинжилгээний зардлын задаргааны маягт

д/д	Эрдэм шинжилгээний зардлын задаргаа	Төлөвлөлт /мян.төг/	Гүйцэтгэл	Тайлбар
2	Гаднын байгууллагаар хийж гүйцэтгүүлсэн ажил, үйлчилгээний төлбөр	1500	1400	Хавсаргасан баримт 1
7	Ном, бүтээлийн хэвлэлийн эх бэлтгэл	600	600	Хавсаргасан баримт 2
8	Судалгааны ажлын тайлан бичихтэй холбогдсон зардал /бичиг хэрэг, хэвлүүлэх г.м/	2400	2377.1	Хавсаргасан баримт 3
10	Дээж авчрах, шинжлүүлэх зардал	3000	2777.9	Хавсаргасан баримт 4
11	Урвалж бодис худалдан авах зардал	3000	2902.6	Хавсаргасан баримт 5
14	Сэлбэг хэрэгсэл, лабораторийн хэрэгсэл худалдан авах зардал	7800	7701.8	Хавсаргасан баримт 6
17	Гадаад, дотоодын томилолтын зардал	3000	3000	Хавсаргасан баримт 7
18	Судалгааны тоног төхөөрөмжийн хэмжилт, суурилуулалт, засвар үйлчилгээний зардал	3000	2500	Хавсаргасан баримт 8
19	Компьютерийн программ хангамж зохиох, худалдан авах, засвар үйлчилгээ хийлгэх зардал	2100	2049	Хавсаргасан баримт 9
20	Олон улсын хурлын төлбөр /тухайн судалгааны ажилтай холбогдох/	3000	1104.9	Хавсаргасан баримт 10
22	Гишүүнчлэлийн төлбөр	300	350	Хавсаргасан баримт 11
23	Төслийн явц, үр дүнд хяналт шинжилгээ хийх зардал	300	168.2	
24	ШУТИС, ХШУС		2993.5	
25	НДШ		75	
	Дүн	30000	30000	

Бүлэг 1

Хоёр хэмжээст шилжилтийн металлын дихалкогенид

Аль нэг хэмжээсийг тооцохгүй байж болох материалыг **хоёр хэмжээст материал** гэнэ. Хоёр хэмжээст материалын нэг жишээ бол шилжилтийн металлын дихалкогенидууд (ШМДХ) юм. Энэ төрлийн материалууд нь шилжилтийн металл (Mo, W гэх мэт) болон халкогенийн (S, Se) үеүдээс тогтдог. Дээрх үелсэн бүтэц бүхий материалуудын электрон бүтэц нь үеийн тооноос хамаарч өөрчлөгддөг. ШМДХ –ын жишээ болох балк буюу гурван хэмжээст MoS_2 –ын хувьд хориотой бүсийн шууд бус шилжилттэй бөгөөд үеийн тоо буурсаар нэг үед хүрэхэд хориотой бүсийн шилжилт нь шууд болдог онцлогтой.

2004 онд Манчестрын Их Сургуулийн судлаачид болох Новоселов, Гейм нар механик хуулалтын гэж нэрлэгдэх аргаар балк графеныг хуулж энэ материалын дан үе гаргаж авсан явдал нь хатуу биеийн физик, материал судлалын салбарт цоо шинэ хувьсгалыг авчирсан [1]. Новоселовын аргачлалыг ашиглан хоёр хэмжээст буюу цөөн үеэс тогтох шинэ материал гарган авсан судалгааны ажлын үр дүнгүүд жилд хэдэн мянгаар хэвлэгддэг. Графен буюу хоёр хэмжээст материал нь дахин давтагдашгүй электрон, оптик болон соронзон шинж чанартай тул өнөөгийн интеграл схемийн технологид нэн чухал үүрэг гүйцэтгэж байна [2].

Сүүлийн жилүүдэд олон тооны судалгааны багууд хоёр хэмжээст материалын судалгааг эрчимтэй явуулж, наноэлектроникийн дараачийн үеийн технологид тохирсон, уламжлалт материалыг орлуулах цоо шинэ материалыг эрэлхийлж байна.

Графен нь “пристин” буюу анхдагч хэлбэртээ хориотой бүсийн өргөнгүй тул оронт транзистор, эммистер, детекторын хэрэглээнд ашиглагдах төдийгээр хязгаарлагддаг бол шилжилтийн металлын дихалкогенидүүдын хувьд хориотой бүсийн өргөн нь 0-2 эВ орчим байдгаараа графенээс давуу байдаг [3]-[5]. Зарим шилжилтийн металлын дихалкогенидууд нь хэт дамжуулал зэрэг өвөрмөц шинж чанартай байдаг [6]. Хагас дамжуулагч ШМДХ –ын хувьд электрон бүтэц нь үеийн тооноос хамаарч нэг үетэй болох тохиолдолд хориотой бүс нь шууд бусаас шууд чиглэлд шилждэг тул дээрх материалын үеүдэд перпендикуляр чиглэлд гадны цахилгаан орноор үйлчилж хориотой бүсийн өргөнийг тохируулна [7]. Дээрх шинж чанарын улмаас ШМДХ нь оптоэлектрон транзистор, оптоэлектроникийн хэрэглээнд ашиглагдах хамгийн чухал материалууд хэмээн тооцогдож байна.

1.1 ШМДХ –ын кристалл бүтэц ба электрон бүтэц

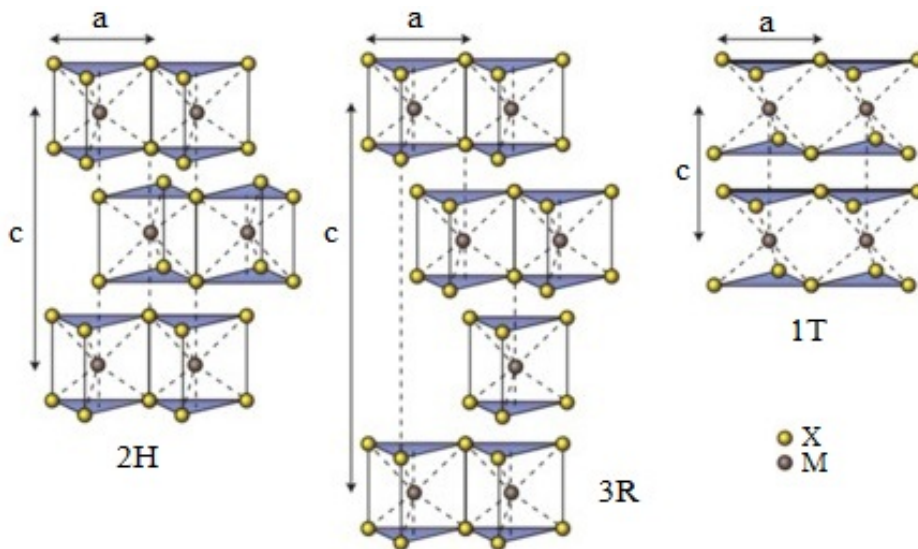
ШМДХ –ууд нь MX_2 гэсэн химийн ерөнхий томъёотой ба энд М – шилжилтийн металлын элемент, Х – халкоген болно. Үелэх системийн IV бүлгээс (Ti, Zr гэх мэт) VI бүлгийн (V, Nb, Mo, W гэх мэт) шилжилтийн металлын элементүүд нь халкогены атомуудын хоёр хавтгайн хооронд сэндвич үүсгэн байрладаг (Зураг 1.1). MX_2 материалын хувьд хавтгай дээрх атомууд нь ионы ба ковалентын холбоогоор, харин үеүд нь хоорондоо Ван – дер – Ваальсын хүчээр холбогдож балк кристаллыг үүсгэнэ. ШМДХ –ын бүлийн гол төлөөлөгч нь MoS_2 бөгөөд энэ нь гексагонал (H) эсвэл ромбоэдр тэгш хэмтэй. Балк MoS_2 –ын хувьд дээр дурдсан тэгш хэмүүдийг 2H ба 3R- MoS_2 гэж тэмдэглэдэг (Зураг 1.2). MoS_2 –ын дан үе нь S-Mo-S гэсэн гурван хавтгайгаас бүрдэнэ.

Байгаль дээр ШМДХ-ууд нь 2H- MX_2 тэгш хэмтэй байх бөгөөд энэ нь нэгж торондоо хоёр ширхэг X-M-X үетэй байдаг. Харин 3R- MX_2 тэгш хэм нь нэгж торондоо гурван X-M-X үетэй. MoSe_2 , WS_2 , WSe_2 зэрэг нь 3R- MX_2 тэгш хэмтэй байна. Үүний зэрэгцээ MoS_2 –ын дан үеийн Mo атомуудын октаэдр координат бүхий политип байдаг тул түүнийг 1T- MoS_2 гэж тэмдэглэнэ [8, 9]. Энэ нь тетрагонал тэгш хэмтэй, нэгж тор нь S-Mo-S –ийн нэг үетэй, металл шинж чанартай [10].

ШМДХ –ыг электрон бүтцээр нь хоёр бүлэгт ангилдаг. Эхнийх буюу MoX_2 , WX_2 –



Зураг 1.1: MX_2 үелсэн бүтцийн схемчилсэн диаграмм.



Зураг 1.2: 2H- MoS_2 ба 3R- MoS_2 –ын бүтэц.

тэй төсөөтэй шилжилтийн металлууд болох Hf, Zr, Re, Pd, Pt –д суурилсан дихалкогенидууд нь хагас дамжуулагч, үлдсэн хэсэг болох NbX_2 , TaX_2 , VX_2 нь металл шинж чанартай байдаг. Хүснэгт 1.1 –д ШМДХ –ын хориотой бүсийн өргөн ба соронзон шинж чанарыг онолын тооцооллын утгуудыг үзүүлэв.

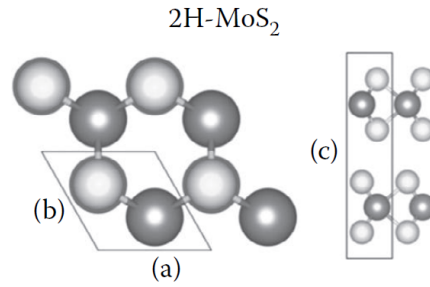
ШМДХ –ын үеийн тоог өөрчлөх байдлаар 2H политипын электрон бүтцийг өөрчилж болдог. Үүнийг олон тооны онол болон туршилтын судалгааны ажлын үр дүнгээр баталгаажуулсан байдаг [11]-[14]. Дээр дурдсан хагас дамжуулагчид нь балк фазтай үедээ шууд бус хориотой бүсийн өргөнтэй байдаг ч дан үеийн хувьд хориотой бүсийн шууд шилжилттэй болдог талаар өмнө нь дурдсан билээ.

Хүснэгт 1.1: ШМДХ –ын хориотой бүсийн өргөн ба соронзон шинж чанарыг "Ab initio" аргаар тооцоолсон үр дүн (Ферросоронзон-ФС, антиферросоронзон -АФС)

Химийн томъёо	Өргөн (эВ)	Соронзон	Химийн томъёо	Өргөн (эВ)	Соронзон
YS ₂	Металл		CrS ₂	Металл	АФС
TiS ₂	0.02		CrSe ₂	Металл	ФС
TiSe ₂	Металл		CrTe ₂	Металл	ФС
TiTe ₂	Металл		MoS ₂	1.6	
ZrS ₂	1.1		MoSe ₂	1.4	
ZrSe ₂	0.4		MoTe ₂	1.15	
ZrTe ₂	Металл		WS ₂	1.8	
HfS ₂	1.3		WSe ₂	1.5	
HfSe ₂	0.6		WTe ₂	Металл	
HfTe ₂	Металл		TcS ₂	1.2	
VS ₂	Металл	ФС	ReS ₂	1.4	
VSe ₂	Металл	ФС	ReSe ₂	1.3	
VTe ₂	Металл	ФС	CoTe ₂	Металл	
NbS ₂	Металл		RhTe ₂	Металл	
NbSe ₂	Металл		IrTe ₂	Металл	
NbTe ₂	Металл		NiTe ₂	Металл	
TaS ₂ -AB	Металл		PdS ₂	1.1	
TaS ₂ -AA	Металл		PdSe ₂	1.3	
TaSe ₂ -AB	Металл		PdTe ₂	0.2	
TaSe ₂ -AA	Металл		PtS ₂	1.8	
TaTe ₂	Металл		PtSe ₂	1.4	
			PtTe ₂	0.8	

1.2 ШМДХ –ын бүтэц, электрон ба хэлбэлзлийн шинж чанар

ШМДХ –уудын дотроос MoS₂ нь хамгийн түгээмэл судлагдсан материал байх тул эдгээр материалуудын талаар авч үзэхийн тулд гол төлөв MoS₂ –ын шинж чанарыг төлөөлүүлэн үздэг талтай. Судлаачид 2H-MoS₂ –ын торын параметрыг туршилтаар $a = b = 3.16\text{Å}$ ба $c = 12.29\text{Å}$ гэж тодорхойлсон байдаг (1.3 –р зураг) [15]. MoS₂ –ын a ба b параметрын утгыг НФО –ын локал нягтын ойролцооллоор (ЛНО) [16] тооцоолход 3.13Å , ерөнхийлсэн градиентын ойролцооллоор (ЕГО) [17] тооцоолоход 3.23Å хэмээн тодорхойлогдсон нь туршилтын үр дүнгээс багахан хувиар зөрүүтэй байсан. Харин c параметрийн хувьд онолын ба туршлагын утгууд нилээд ялгаатай гарсан нь [18] MoS₂ үеүдийн холбоосд ковалент – бус электронуудын харилцан үйлчлэл чухал үүрэгтэй ба үүнийг ЛНО ба ЕГО –ын тооцооллод тооцоогүйтэй холбоотой.



Зураг 1.3: 2H-MoS₂ кристалл бүтцийн дээрээс болон хажуугаас харуулсан байдал. Энд: a, b, c нь торын параметрууд. S ба Mo атомуудыг харгалзан цайвар, бараан өнгөөр харуулсан байна.

Иймд Скалис нарын судлаачид онолын тооцооллын ковалент – бус электронуудын сул харилцан үйлчлэлд засвар оруулж бодолтыг гүйцэтгэснээр c параметрийн утгыг дөхүүлсэн байна [16].

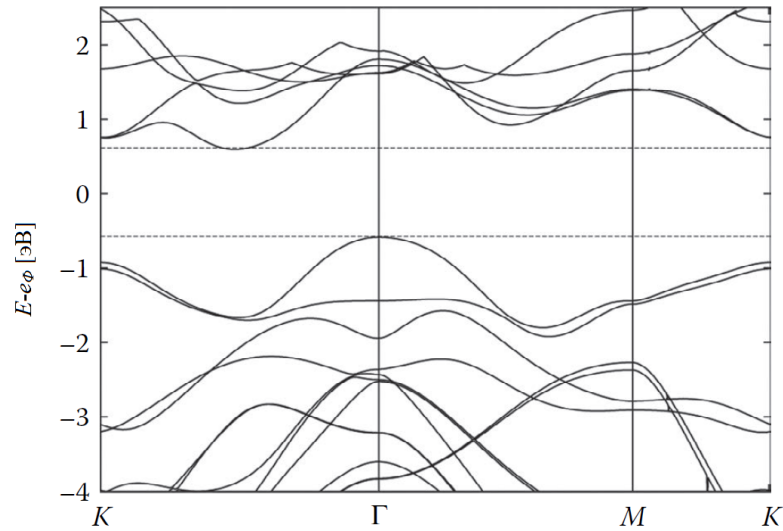
MoS₂ –ын a, b, c параметруудийн хувьд дан үе болон үеийн хооронд онцын зөрүү гардаггүйн зэрэгцээ Mo-S ба S-S зайн хувьд дээрхийн адил байдаг.

MoS₂ –ын хориотой бүсийн энергийг Скалис нар 1.18 эВ гэж тооцоолсон нь [17] Кам ба Паркинсон нарын туршилтаар тооцоолсон утга болох 1.23 эВ –тэй маш сайн тохирсон байна [14].

1.2.1 Электрон бүтэц

ШМДХ –уудын электрон бүтцийг авч үзэхийн тулд жишээ болгон балк MoS₂ –ыг авч үзсэн. 1.4 –р зурагт MoS₂ –ын хориотой бүсийн өргөний онолын тооцооллын үр дүнг үзүүлсэн байна. Энэ материалын хувьд хориотой бүсийн өргөний хамгийн бага утга нь 1.2 эВ бөгөөд энд Г цэгт байрлах валентын бүсийн (V_B) орой болон Бриллюэний бүсийн тэгш хэмийн цэгүүд болох Г ба К цэгийн голд байрлах дамжууллын бүсийн ёроолоос шууд бус шилжилт явагддаг. Шууд шилжилтийн хамгийн бага утгыг 1.65 эВ гэж урьдчилан таамагладаг бөгөөд энэ нь К цэг дээр байрлана.

MoS₂ –ын хувьд S-Mo-S сэндвич үеийн тоо буурахын хирээр шууд бус хориотой бүсийн энергийн утга алгуур өсөж 2 эВ –д хүрдэг (1.5a –р зураг). Харин шууд шилжилтийн хувьд балк болон дан үеийн хувьд бараг зөрүү үүсдэггүй бөгөөд энэ зөрүү 0.1 эВ байдаг. Үүний дүнд дан үеийн хязгаар дээр MoS₂ –ын шууд ба шууд бус хориотой бүсүүд огтлолцоно (1.5b –р зураг). 1.5b –р зургаас үзвэл MoS₂ –ын хоёр үеийн



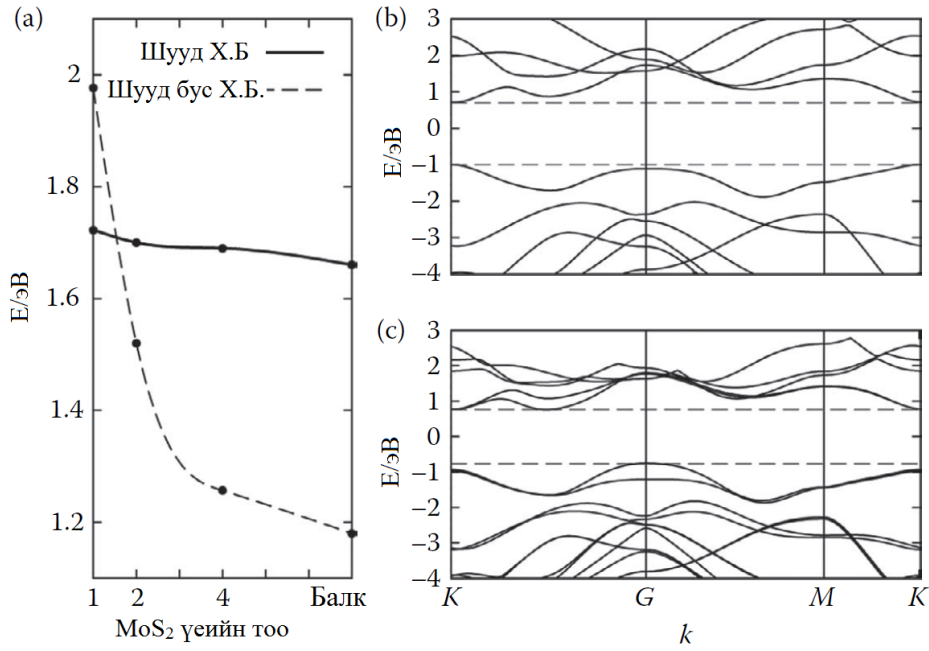
Зураг 1.4: Гурван хэмжээст (балк) MoS_2 –ын электрон хориотой бүсийн бүтэц.

хувьд шууд ба шууд бус хориотой бүсийн энергийн зөрүү маш бага байна. Энд үеийн тооноос хамаарч хориотой бүсийн өргөн өөрчлөгдөж буй нь атомын p_z орбитал ба Mo атомын d орбиталуудын эрлийзжилтийн дүнд бий болдог бөгөөд үүнийг квант хязгаарлалтаар тайлбарладаг [19].

MoS_2 –ын дан ба хоёр үеийн шууд (шууд бус) хориотой бүсийн өргөний тооцооллын үр дүн нь 1.72 эВ ба 1.7 эВ (1.98 эВ ба 1.52 эВ) хэмээн гарсан нь туршилтын үр дүнтэй маш сайн тохирч байна [19]-[21]. НФО нь хатуу биеийн хориотой бүсийн өргөнийг тооцоолдог бөгөөд MoS_2 –ын дан үеийн хориотой бүсийн өргөнийг маш сайн тооцоолдог байна [22].

1.2.2 Цэнэг зөөгчийн эффе́ктив масс

ШМДХ –уудын дан болон цөөн үеийн цахилгаан дамжууллыг судалсан ажил нилээд хийгдсэн байдаг [23]-[26]. Новоселов нар нимгэн MoS_2 дээр суурилсан төхөөрөмж ашиглан цэнэг зөөгчийн хөдлөцийг $0.5\text{-}3 \text{ см}^2/\text{В} \cdot \text{с}$ утгагай болохыг тодорхойлсон байна. Аяри нарын судлаачид 2007 онд дээрхтэй төстэй аргачлал ашиглан хэт нимгэн MoSe_2 –ын хөдлөцийн утгыг хэдэн арван $\text{см}^2/\text{В} \cdot \text{с}$ болохыг тодорхойлсон бол Кис нарын судлаачид MoSe_2 –ын дан үеэр хийгдсэн транзисторын цэнэг зөөгчийн хөдлөц үүнээс илүү болохыг тогтоожээ. Дээрх судлаачид К гарц бүхий диэлектрик үе нь 200



Зураг 1.5: (а) MoS₂ –ын цөөн үеийн хувьд S-Mo-S сэндвичийн тоо ба хориотой бүсийн энергийн хамаарал. Фермийн түвшинг 0 эВ гэж тохируулсан. (b) дан үе, (c) хоёр үеийн хориотой бүсийн энергийн диаграмм.

см²/В · с –ээс илүү хөдлөцийг бий болгодог болохыг харуулсан. Үүнээс гадна зарим судлаачид Al₂O₃ гарц бүхий диэлектрик үе ашигласан туршилт явуулсан бөгөөд балк MoSe₂ –ын хөдлөц 500 см²/В · с болохыг харуулсан байдаг [27].

1.4 ба 1.5 –р зурагт үзүүлсэн хориотой бүсийн диаграммаас үзвэл балк, дан ба хоёр үеийн хувьд Бриллюэний бүсийн өндрийн тэгш хэмтэй цэг дээр валентын ба дамжууллын бүсийн ирмэг дэх муруй нь илэрхий ялгаатай байна. Энерги (ε) ба импульсийн (k) муруй нь өндөр тэгш хэмтэй k цэг орчимд бараг парабол байх тул энэ муруйг ашиглан нүх ба электроны эффектив массыг (m^*)

$$m^* = \frac{\hbar^2}{\delta^2\varepsilon/\delta k^2} \quad (1.1)$$

гэж олж болно. Энд: $\delta^2\varepsilon/\delta k^2$ нь өндөр тэгш хэмийн K цэг орчим дахь дундаж муруйлт юм.

1.2 –р хүснэгтэд MoS₂ –ын хэд хэдэн үеийн хувьд цэнэг зөөгчийн эффектив массыг ЕГО –оор тодорхойлсон үр дүнг үзүүлжээ [28]. Гурван хэмжээст буюу балк MoS₂ –ын хувьд электроны эффектив масс нь $0.52m_0$, нүхнийх $0.56m_0$ хэмээн тодорхойлогдсон

Хүснэгт 1.2: MoS₂-ын олон үеийн хориотой бүсийн өргөн. Нүх ба электроны эффектив массыг электроны массаар m_0 илэрхийлнэ (ВБМ-валентын бүсийн максимум, ДБМ-дамжууллын бүсийн минимум).

	Хориотой бүсийн өргөн (эВ)		Нүхний эффектив масс (m_n^*/m_0)		Электроны эффектив масс (m_e^*/m_0)	
	Шууд бус	Шууд	Г	К	К	К-Г
Бүтэц						
Балк	0.62	1.75	0.56 (ВБМ)	0.55	0.76	0.52 (ДБМ)
Гурван үе	0.94	1.79	0.75 (ВБМ)	0.56	0.68	0.56 (ДБМ)
Хоёр үе	1.23	1.8	0.9 (ВБМ)	0.62	0.56	0.58 (ДБМ)
Дан үе	1.98	1.86	3.55	0.62 (ВБМ)	0.48 (ДБМ)	0.58

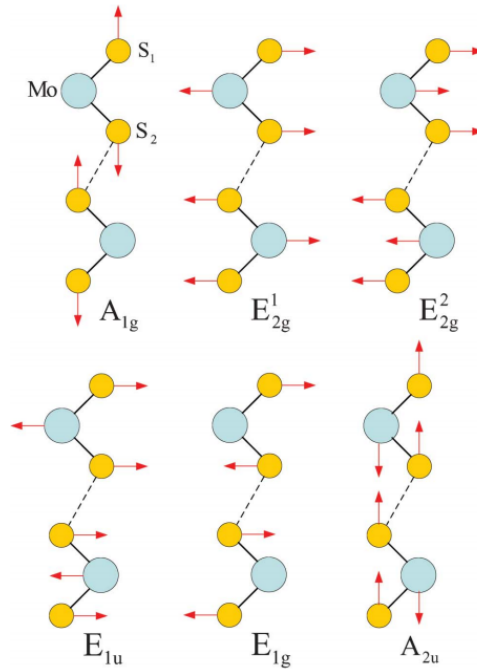
нь цахиурын дээрх утгуудаас онцын ялгаагүй байна.

MoS₂ –ын үеийн тоо буурахад электрон ба нүхний эффектив масс өсч, MoS₂ –ын дан үеийн хувьд Г цэгт нүхний эффектив масс $3.55m_0$ утгатай болно. Гэвч хориотой бүсийн шууд бусаас шууд шилжилт хийх үед MoS₂ –ын дан үеийн шинж чанар өөрчлөгддөг ба бүсийн минимум ба валентын бүсийн максимум дээр электрон ба нүхний эффектив масс нь тус бүр $0.48m_0$ ба $0.62m_0$ болж өөрчлөгдөнө.

1.2.3 MX₂ –ын хэлбэлзлийн шинж чанар

Хатуу бие болон молекулын бүтцийг тодорхойлохын тулд Раман болон инфра улаан туяаны спектроскопын аргуудыг өргөн ашиглана. Раманы сарнил ба инфра улаан шингээлт нь материалын хэлбэлзлийн шинж чанартай шууд холбоотой бөгөөд дээрх шинж чанарыг НФО-оор урьдчилан таамаглах боломжтой. 2H-MoS₂-ын цэгийн бүлийн тэгш хэм D_{6h} нь 18 ширхэг хэлбэлзлийн моодтой бөгөөд энэ нь шилжилтийн акустик хоёр моод, инфра улаан хоёр моод, Раманы идэвхтэй дөрвөн моодоос тогтоно (1.2-р хүснэгт). MoS₂-ын дан үеийг 1H-MoS₂ гэж нэрлэх бөгөөд энэ нь D_{3h} цэгийн бүлийн тэгш хэмтэй, 9 хэлбэлзлийн моод ба 2 шилжилтийн акустик моод, нэг инфра улаан, гурван Раманы моодтой.

MoS₂-ын нэг үе болон олон үеийн хэлбэлзлийн моодууд нь тодорхой хамааралтай (1.2-р хүснэгт). 1.6-р зурагт Раманы дөрвөн идэвхтэй моод болон 2H-MoS₂-ын хоёр инфра улаан моодуудын атомын хоорондын зайг харуулжээ. Тэдгээрийн давтамжийг



Зураг 1.6: [1000] кристаллографийн чиглэлийн дагуу харагдах балк MoS_2 -ын Раманы 4 идэвхит моод, 2 инфра улаан идэвхит моодын атомын шилжилт [29].

MoS_2 -ын дан ба олон үеийн хувьд локал нягтын ойролцооллоор тооцоолж гарсан үр дүнг 1.3-р хүснэгтэд үзүүлсэн байна. Эдгээр үр дүн нь Молина нарын [30] онолын, Виетин [31] нарын гүйцэтгэсэн туршилтын ажлын үр дүнтэй маш сайн тохирсон байна.

1.7-р зурагт MoS_2 -ын балк болон дан үеийн фононы моодуудыг тэдгээрийн фононы дисперсээр нь илэрхийлж харьцуулсан байна. Зураг дээрх график бүр нь хэвтээ акустик (LA), хөндлөн акустик (TA) ба хавтгайн гадагш (ZA-out of plane) акустикийн гэсэн гурван акустик моодуудыг үзүүлнэ. Балк MoS_2 -ын хувьд E_{2g}^2 ба B_{2g} гэсэн нам давтамжийн оптик моод илэрнэ. Энэ нь MoS_2 -ын үеүдийн шилжилт болон бооо чиглэлийн хөдөлгөөнд харгалздаг боловч MoS_2 -ын дан үеийн фононы дисперсид илэрдэггүй байна. Нам давтамжийн моод болон өндөр давтамжийн оптик моодуудын хооронд 50 cm^{-1} хэмжээтэй дисперсийн завсар оршдог. Өндөр давтамжийн E_{2g}^1 ба E_{1u} балк моод нь MoS_2 -ын дан үеийн E' моод руу давхцаж ордог. Энэ нь 1.6-р зурагт үзүүлсэн атомын шилжилтийн баталгаа болдог. Балк MoS_2 -ын Раманы E_{2g}^1 моодын давтамж нь MoS_2 -ын дан үеийн E' Раманы моодтой харьцангуйгаар нэмэгддэг.

Үүний эсрэгээр MoS_2 -ын балк бүтцэд MoS_2 -ын дан үеийн хувьд нам давтамжийн

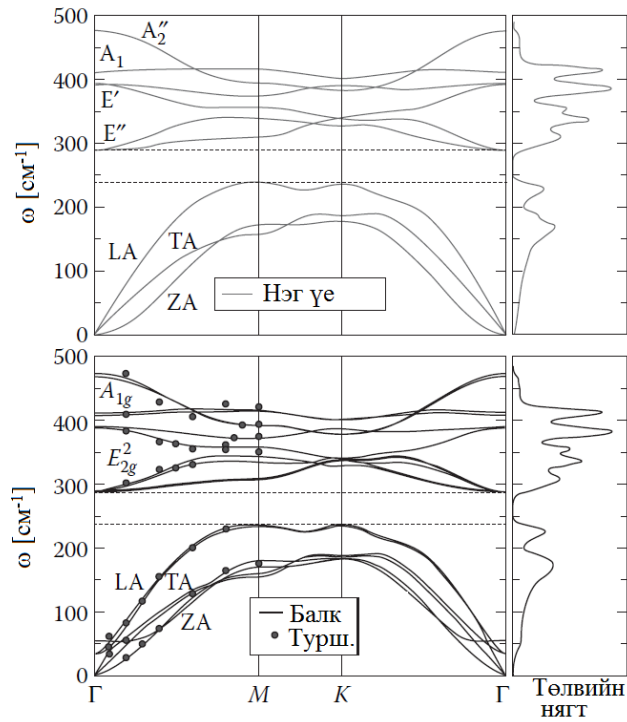
Хүснэгт 1.3: Локал нягтын ойролцооллоор тооцоолсон фононы давтамж [16].

Илэрхийлэл	MoS ₂ (D_{6h})-ын давтамж [см ⁻¹]	Илэрхийлэл	MoS ₂ (D_{3h})-ын давтамж [см ⁻¹]	Үзүүлэлт
A_{2u}	0	A''	0	Акустик
E_{1u}	0	E'	0	Акустик
E_{2g}^2	39.7			Раман
B_{2g}	66.4			
E_{1g}	289.4	E''	289.3	Раман
E_{2u}	286.8			
E_{2g}^1	387.2	E'	391.8	Раман
E_{1u}	387.9			Инфра улаан
B_{1u}	407.6			
A_{1g}	413.5	A'	410.6	Раман
B_{2g}	468.4			
A_{2u}	472.7	A_2''	476.5	Инфра улаан

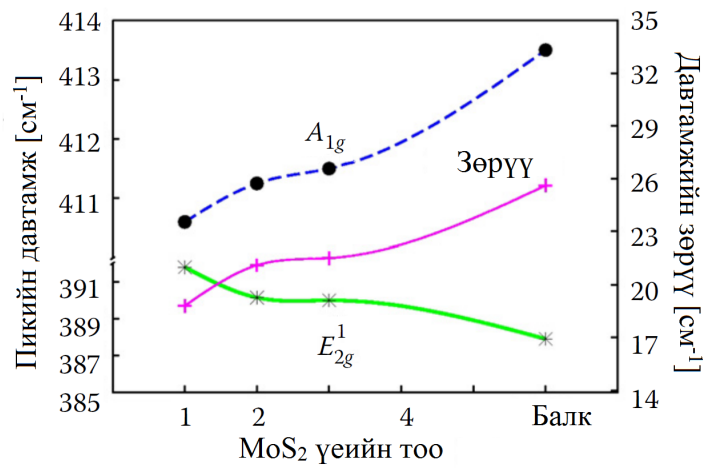
мужид A_{1g} хавтгайн гадагш чиглэх моод, Раманы өөр пикүүд илэрсэн. Раманы пикийн байрлалын дээрх шилжилтийг туршлагаар хэмжсэн [32, 33] бөгөөд эдгээрийг ашиглаж үеийн зузааныг тодорхойлсон байна. E_{2g}^1 -ийн давтамж ба A_{1g} Раман пикийн үеийн тооноос хамаарсан график нь (1.8-р зураг) Раманы хоёр пикийн аномал үзэгдлийг баталгаажуулна. Үеийн тоо нэмэгдэхийн хирээр A_{1g} моодын давтамж нэмэгддэг бол E_{2g}^1 -ийн давтамж буурдаг. A_{1g} моодын давтамжийн өсөлт нь зэргэлдээ хоёр үеийн атомуудын харилцан үйлчлэлийн нөлөөгөөр үүсдэг бөгөөд хоёр үеийн хувь үе хоорондын нэмэлт харилцан үйлчлэлийн нөлөө ихэссэнээр тайлбарлагддаг. Энд: үеийн тоо нэмэгдэхийн хирээр E_{2g}^1 моодын давтамж буурдаг. Энэ нь урт завсрын Кулоны харилцан үйлчлэлийн диэлектрик экранчлалаар тайлбарлагддаг бөгөөд энэ үед атомуудад үйлчлэх нийлбэр сэргээх хүч буурдаг [30].

1.3 MoS₂-ын дан үеийн электроны шинж чанарт деформацийн нөлөө

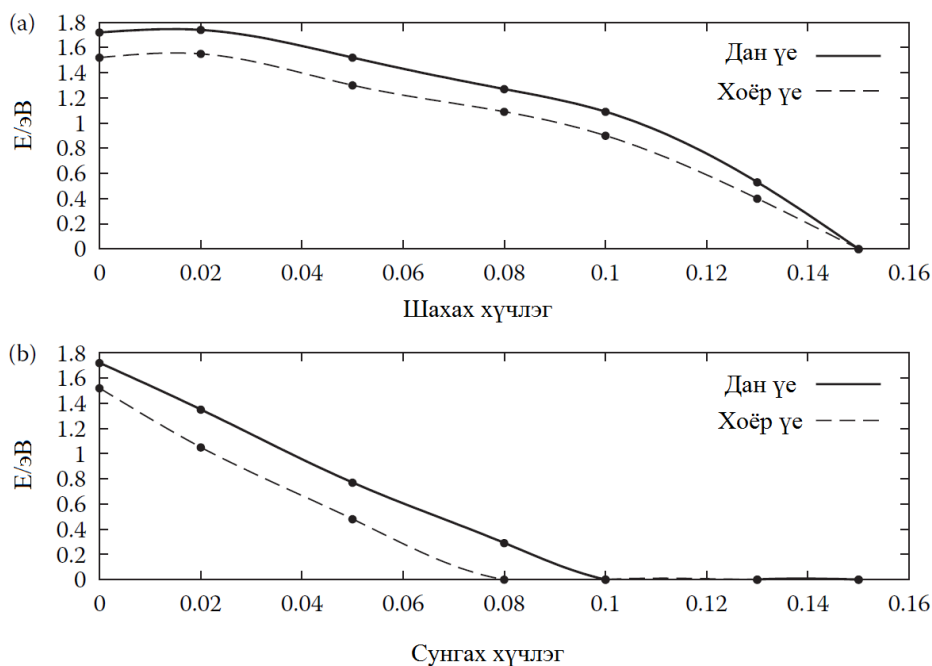
Материалын электроны шинж чанарт деформацийн нөлөөг тооцох нь нэн чухал байдаг. Шилжилтийн металлын дихалкогенидын дан болон хоёр үе нь балк материалтай харьцуулбал их хэмжээний деформацийг даах чадвартай тул уян электроник болон оптоэлектроникийн төхөөрөмжид зориулсан хагас дамжуулагч материал гэж тооц-



Зураг 1.7: MoS₂-ын дан ба балк төлвийн нягт ба фононы дисперсийн муруй. График дээрх цэгүүдийг туршлагын үр дүнгээс гаргаж авсан [30].

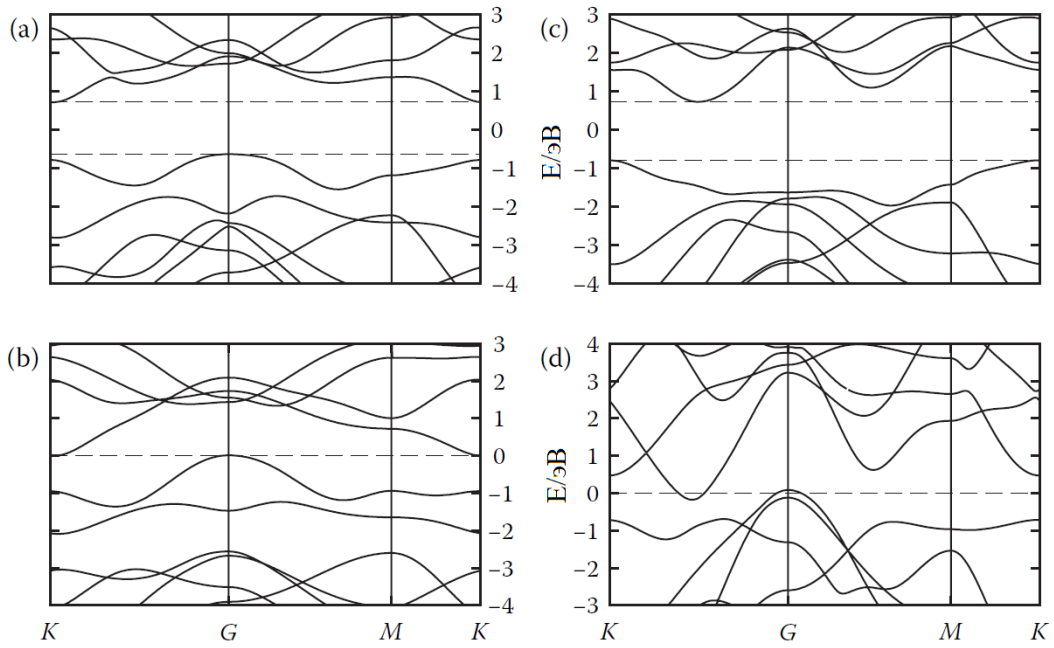


Зураг 1.8: Раманы E_{2g}^1 ба A_{1g} моодуудын давтамж ба деформацийн хамаарал (онолын тооцоо) [16].

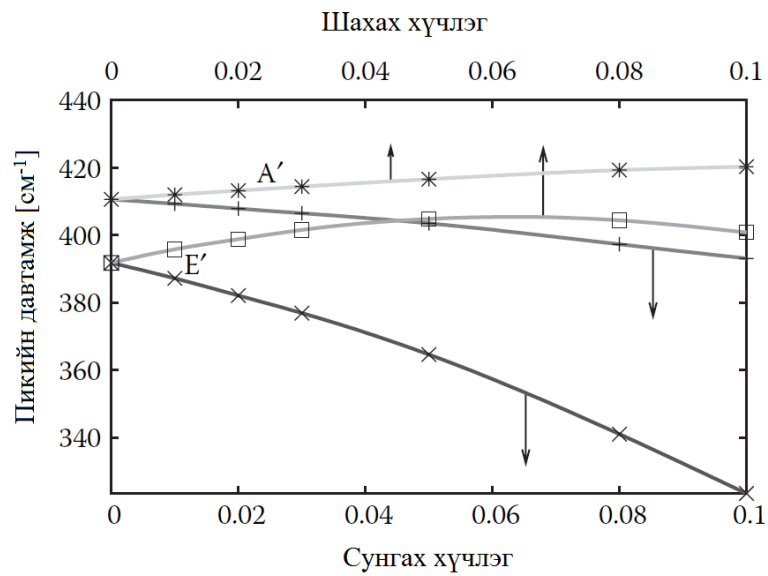


Зураг 1.9: MoS₂-ын дан ба давхар үеийн энергийн хориотой бүсийн өргөн деформацийн хамаарал [17].

дог. Хоёр хэмжээст шилжилтийн металлын дихалкогенидын хувьд деформацийн нөлөөгөөр цэнэг зөөгчдийн хөдлөц нэмэгддэг болохыг 2003 онд тогтоосон [34] бөгөөд энэ шинж чанар нь n ба p төрлийн металлын ислийн цахиурт суурилсан транзисторын үйлдвэрлэлд чухал түлхэц үзүүлжээ. MoS₂ нь графенээс илүү зөөлөн [35] бөгөөд түүний харимхай шинж чанарыг туршилтаар баталгаажуулсан ажлууд нэлээд хийгдсэн байна [36]. 1.9-р зурагт MoS₂-ын дан болон хоёр үеийн энергийн хориотой бүсийн өргөн нь хоёр тэнхлэгийн дагуу деформацаас хамаарах хамаарлыг үзүүлжээ. Графикаас үзвэл хоёр хэмжээст материалд хөндлөн хэмжээсийн дагуу сунгалтын деформаци учруулахад хориотой бүсийн өргөн 10 орчим хувиар буурдаг болох нь харагдаж байна. Энэ нь хавтгайн дагуу ба хавтгайгаас гадагш чиглэх деформацийн улмаас үе хоорондын атомын зай өөрчлөгдсөнтэй холбоотойгоор хориотой бүсийн өргөн буурдагийг харуулна. MoS₂-ын дан ба давхар үеийн хувьд хоёр тэнхлэгийн дагуу деформаци үүсэхэд молибдены атомын $4d$ орбитал, хүхрийн атом $3p$ орбиталын энергийн төлөвийн шилжилт үүсдэг. Сунгах деформацийн нөлөөллөөр Γ цэг орчмын валентын бүсийн орой дахь энерги ба K -аас Γ цэг дээрх дамжууллын бүсийн ёроол дахь энерги өсдөг (1.10-р зураг). Энэ нь S атомуудын хоорондох зай буурч Mo ба



Зураг 1.10: MoS₂-ын дан үеийн энергийн хориотой бүсийн өргөн. (а) 2%-аар сунгах. (б) 10%-аар сунгах. (с) 5%-аар шахах тохиолдол. (д) 15%-аар шахах. Фермийн түвшинг 0 эВ гэж тохируулсан [17].



Зураг 1.11: Раманы E' ба A' моодуудын давтамж ба хүчлэгийн хамаарал [16].

S атомуудын босоо зай нэмэгдсэнтэй холбоотой. К цэгийн орчимд валентын бүсийн орой ба дамжууллын бүсийн ёроол орчмын энерги багахан хэмжээгээр өөрчлөгддөг. Энергийн түвшний шилжилтийн улмаас MoS₂-ын дан үеийн энергийн хориотой бүс нь шууд шилжилтээс шууд бус шилжилт рүү шилждэг (гадны сунгалтын хүчлэг 2%-аас бага байх үед). Шууд шилжилтээс шууд бус шилжилтэд шилжихэд деформацийн нөлөөгөөр оптик хориотой бүс нь үүсдэг болохыг туршлагаар тодорхойлсон байдаг [37]. MoS₂-ын дан болон цөөн үеүдийг шахалтын деформацид оруулахад энергийн хориотой бүсийн өргөн шилжилт нь эсрэгээр явагдсан. Энэ тохиолдолд деформацийн хэмжээ өсөхөд Г цэгийн орчимд валентын бүсийн орой ба К-Г цэг дэх дамжууллын бүсийн ёроол дахь энергийн утга огцом буурна. Деформацийн хэмжээ маш бага буюу 5%-аас бага үед шахах болон сунгах деформаци нь хориотой бүсийн өргөнд эсрэг нөлөө үзүүлдэг. Гэвч деформацийн хэмжээ нэмэгдэхийн хирээр шахалтын деформацийн үед хориотой бүсийн өргөн буурдаг бөгөөд үүнийг хавтгайн дагуух шилжилтийн x , y атомын орбиталын давхцлаар тайлбарлагддаг.

Деформацийн нөлөөгөөр MoS₂-ын хориотой бүсийн өргөн өөрчлөгдсөнөөр цэнэг зөөгчдийн эффектив масс өөрчлөгддөг. 1.4-р хүснэгтэд электрон ба түүний эффект массыг үзүүлжээ. MoS₂-ын дан үед сунгалтын деформаци учруулахад цэнэг зөөгчдийн эффект масс буурдаг бөгөөд Г цэг орчимд электроны эффектив масс 25% орчмоор буурдаг. Үүний эсрэгээр шахалтын деформацийн үед цэнэг болон нүхний масс нэмэгддэг бөгөөд деформаци 5%-аас их тохиолдолд энэ шинж чанар зөрчигддөг.

1.5-р хүснэгтэд MoS₂-ын дан үед сунгалт болон шахалтын деформацийн нөлөөгөөр хэлбэлзлийн давтамж хэрхэн өөрчлөгдөж байгааг харуулсан. 1.11-р зурагт Раманы E_{2g}^1 ба A_{1g} идэвхтэй моодуудын давтамж, сунгалтын деформацийн хамаарлыг харуулжээ. Энд Раманы идэвхтэй моодод хавтгайн дагуух шилжилтэд харгалзах шахалтын деформацийн үед шахагдаж, сунгалтын деформацийн үед сунгагдана. A' моод нь деформациас шууд хамаарч деформацийн хэмжээ 3%-аас буурдаг бол E' моодод шугаман хамаарал илэрдэг.

Хүснэгт 1.4: Деформацад орсон MoS₂-ын дан үеийн электрон ба нүхний эффектив массыг тооцоолсон утга

	Нүхний эффект масс		Электроны эффект масс	
	Г	К	К	К-Г
Сунгалтын деформац				
0	3.5	0.62	0.48	0.58
0.01	2.7	0.61	0.44	0.58
0.02	2.17	0.6	0.41	0.57
0.03	1.81	0.59	0.39	0.54
0.05	1.37	0.58	0.36	0.51
0.08	0.99	0.61	0.36	
0.1	0.85	0.65	0.37	
Шахалтын деформац				
0	3.5	0.62	0.48	0.58
0.01	5.15	0.64	0.55	0.57
0.02	9	0.66	0.65	0.56
0.03	4.28	0.69	0.85	0.53
0.05	2	0.74	3.98	0.48
0.08	3.53/0.6	0.83	0.74	0.39
0.1	1.6/0.56	0.88	0.65	0.34

Хүснэгт 1.5: Шахах болон сунгах деформацад орсон MoS₂-ын дан үеийн хэлбэлзлийн давтамжийн тооцоолсон утгууд

Сунгах деформац	0.01	0.02	0.03	0.05	0.08	0.1
A'-Раман (см ⁻¹)	409.3	407.8	406.5	403.5	397.3	393.1
E'-Раман (см ⁻¹)	387.2	382.1	376.9	364.6	341	323.4
E''-Раман (см ⁻¹)	286.9	284	280.9	273.6	258	246.4
A ₂ '-Раман (см ⁻¹)	472	467.2	461.9	450.4	429.4	414
Шахах деформац	0.01	0.02	0.03	0.05	0.08	0.1
A'-Раман (см ⁻¹)	412	413.2	414.4	416.6	419.3	420.3
E'-Раман (см ⁻¹)	395.8	398.8	401.5	404.8	404.4	400.8
E''-Раман (см ⁻¹)	291.5	293.2	294.5	295.8	295	292.2
A ₂ '-Раман (см ⁻¹)	480.5	484.2	487.2	491.7	495.3	494.8

Бүлэг 2

Хоёр хэмжээст вольфрам болон молибдены диселенид гарган авах

Орчин үеийн шинэ материалыг гарган авах хэд хэдэн арга байдаг. Эдгээр аргыг ашиглан наноматериалын нэг төрөл болох хоёр хэмжээст материалыг гарган авдаг. Зураг 2.1 –д хоёр хэмжээст материал гарган авах аргуудыг тоймлон харуулсан байна. Нанохэмжээст материалыг **дээрээс доош** (top down) ба **доороос дээш** (bottom up) гэсэн үндсэн хоёр аргаар гаргаж авдаг. Дээрээс доош аргад балк хатуу материалд гадны хүчээр үйлчилж, жижиг хэсгүүдэд хуваадаг бол, доороос дээш аргад наноматериалыг хий болон шингэний атомыг конденсацлах байдлаар гаргана. Нөгөө талаас дээрээс доош аргад хатуу бодисыг механикаар нунтаглах, эсвэл хуулалт хийх аргаар наноматериалыг гаргах боломжтой.

Механик хуулалтын арга нь ердийн нөхцөлд, тусгай вакуум шаардахгүйгээр хоёр хэмжээст материал гарган авах энгийн арга юм. Энэ аргыг ашиглан графитээс графеныг хуулах ажлыг анх Манчестрын Их Сургуулийн К.Новоселов, А. Гейм гүйцэтгэж Нобелийн шагнал хүртсэн байдаг. Механик хуулалтын арга аргачлал, энэ аргын давуу болон дутагдалтай талын тухайн Мин нарын судлаачид тоймлон бичсэн байдаг [38]. Үүний зэрэгцээ дээрх аргаар шилжилтийн металлын дихалкогенидыг гарган авах талаар Тан нарын судлаачдын ажилд дэлгэрэнгүй дурдагдсан болно [39]. Гэвч дээрх ажлуудад хоёр хэмжээст материал гарган авах туршилтын аргууд болон үе болон механик шинж чанарын уялдааг харуулснаар хязгаарлагддаг. Механик хуулалтын процесс нь стохастик шинж чанартай тул эх материалаас гадаргуу



Зураг 2.1: Наноматериал гарган авах аргууд.

дээрээ цууралтгүй, хэвтээ чиглэлийн дагуу хэдэн микрометр хэмжээтэй байх дан үе гарган авах процесс нь нарийн нямбай ажиллагаа, туршлага шаардана. Иймд дээрх үзүүлэлт бүхий дан үеийг олон тоогоор гарган авсан ажлууд хараахан хийгдээгүй байна.

Механик аргаар хуулсан вольфрам болон молибдены дисленидийн цөөн үеийг тодорхойлох эхний үе шат бол оптик микроскопын судалгаа юм. Оптик микроскопоор дан үеийг илрүүлэх нь нилээд түвэгтэй ажил байдаг. Хоёр хэмжээст материалын дан үеийг оптик микроскопоор илрүүлэхэд түүнийг суулгасан суурины төрөл чухал үүрэгтэй байх бөгөөд цахиур дээр суулгасан SiO_2 үе бүхий суурин дээр молибдены дисульфидыг суулгахад цөөн үеүд маш тод харагддаг. Үүнийг Блейкийн ажилд тодорхой харуулсан бөгөөд тэрээр тодорхой зузаантай диэлектрик үе дээр суулгасан

цөөн бөгөөд дан үеүд нь оптик шинжилгээгээр маш сайн ялгарч харагддаг болохыг харуулжээ [40]. 2D/диэлектрик/Si гэсэн сэндвичийн хувьд агаар-2D, 2D-диэлектрик, диэлектрик-Si заагууд дээр гэрлийн ойлт явагдах тул оптик микроскопоор харахад дүрсийн ялгарал нь нэмэгддэг. Энэхүү ялгарал нь суурийн зузаан болон хоёр хэмжээст материал, диэлектрик суурь гэсэн системийн хугарлын илтгэгчээс хамаарна. Үүнээс гадна ялгарал нь гэрэл туссан өнцөг болон гэрлийн долгионы уртаас хамаардаг. Бенамур нар SiO_2/Si (100) суурин дээр суулгасан шилжилтийн металлын дихалкогенидуудын дан үеийг оптик микроскопоор илрүүлэхэд диэлектрикийн зузаан 90 нм, 140 нм, 270 нм байх нь тохиромжтой болохыг тогтоожээ [41]. Дээрх судлаачид MoS_2 -ыг 270 нм SiO_2/Si (100) суурин дээр суулгахад 1-3 үеийн оптик ялгарал маш сайн болохыг онолын судалгаагаар тооцоолсон ба тэдний үр дүнг Мюллер нар туршилтаар шалгаж 263 нм SiO_2/Si (100) суурь тохиромжтой болохыг баталсан [42]. Симсек (Молибдены дисульфидын төрөл бүрийн хугарлын илтгэгч) 70–100 нм ба 230–300 нм долгионы урттай гэрлийн хувьд оптик ялгарал болон суурины SiO_2 үеийн зузааны хамаарлыг судалсан бөгөөд тэрээр судалгаандаа монохроматик гэрэл ашиглажээ [43].

Хоёр хэмжээст материалын цөөн үеийн судалгааны дараачийн алхам бол атомын хүчний микроскоп (АХМ) юм. АХМ –ын судалгаа нь хоёр хэмжээст системийн үеүдийн тоог шууд тодорхойлох үндсэн аргуудын нэг бөгөөд анхлан графены судалгаанд ашиглагдаж байжээ [1]. Хоёр хэмжээст материалын үе хоорондын зай нь судалж буй тухайн системээс хамаардаг. Жишээлбэл, гексагональ бүтэцтэй борын нитрид, графены хувьд үе хоорондын зай нь 3.3 – 3.5 Å, фосфоренд 5.4 Å, шилжилтийн металлын дихалкогенидуудад 6–7 Å байдаг. Ямар ч тохиолдолд механик хуулалтын аргаар гарган авсан хоёр хэмжээст ширхэгийн хувьд суурь болон нимгэн үеийн хооронд ус шингээгдсэн байх тул тодорхой хэмжээний аномаль зай үүсдэг. Үүний улмаас дан үеийн хувьд хэмжилт алдаатай гарах тохиолдол байдан. ШМДХ –ын хувьд энэ зай нь 2 –3 Å –ийн хооронд хувьсдаг [41]. Атомын хүчний микроскоп нь атомуудын хоорондын харилцан үйлчлэлийн хүчийг бүртгэгч төхөөрөмж тул өндрийн аномалийн улмаас суурь болон хоёр хэмжээст нимгэн үеийн хоорондох харимхай чанаруудын ялгаа илэрдэг. Атомын хүчний микроскопын контактын бус горимд (tapping mode) дээрх аномаль үүсэх бөгөөд үүнийг зүүний үзүүр – дээж, зүүний үзүүр – суурины

адгезив нөлөөгөөр тайлбарлаж болдог [44]. Иймд нэг талаас атомын хүчний микроскоп нь хоёр хэмжээст системийн нэгэн төрлийн үеүдийн хоорондын зайг тодорхойлох найдвартай арга байдаг бол нөгөө талаас сууринаас эхний үе хүртэлх зай ямар хэмжээтэй болохыг таамаглахад бэрхшээлтэй байдаг.

Хоёр хэмжээст материалын гадаргуугийн судалгааг явуулах өөр нэг төхөөрөмж бол тэмтрэх туннелийн микроскоп (ТТМ) байна. ТТМ нь гадаргууг координатын зайд атомын нягтралтайгаар дүрсэлсэн анхны багаж хэрэгсэл юм. ТТМ-ын үндсэн зарчим нь дээж ба тэмтрүүл хооронд үүссэн вакуум буюу потенциал саадыг нэвтрэн өнгөрөх квант туннелийн зарчимд үндэслэгддэг. Судалж буй дээж тэмтрүүл хоорондох зай хэдхэн ангестрем болж ойртоход дээж ба тэмтрүүлийн хоорондох вакуум буюу потенциал саадыг туннелийн электронууд нэвтрэн өнгөрч эхлэх буюу цахилгаан гүйдэл ажиглагдаж эхэлнэ. Дээжний гадаргуугийн зургийг авахын тулд ТТМ-ын зүү ба дээжний гадаргууд туннелийн гүйдэл үүсэх хүртэл ойртуулж улмаар зүүг байрлуулсан пьезохоолойн гулзайлтыг ашиглан атомын хэмжээний зураг авдаг. Дээж тэмтрүүл хоёрын дунд вакуум гэсэн потенциал саад тул туннелийн электронууд энэхүү потенциал саадыг нэвтрэн өнгөрнө. Дээжний электронууд нь вакуум дахь саадыг нэвтрэн, зүүнээс дээж рүү туннелийн гүйдлийг үүсгэнэ.

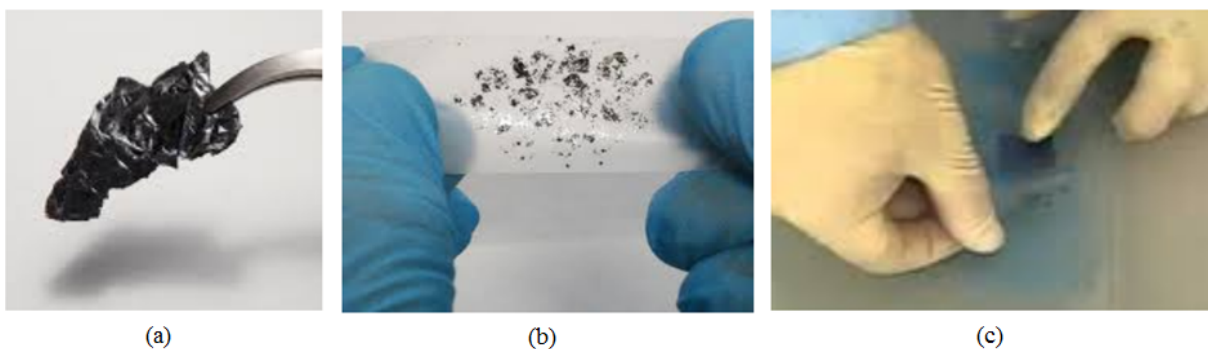
2.1 Туршилтын арга зүй

2.1.1 WSe_2 , $MoSe_2$ –ийн цөөн үе гарган авах

Механик хуулалтын процессыг тасалгааны температурт, агаарт явуулсан. Дээжний дан болон хэд хэдэн үе гарган авахын тулд хоёр хэмжээст материал бэлтгэдэг дээр дурдсан хуулалтын аргыг ашиглана. Үндсэн материалаар $0.8 \times 0.8 \times 0.2$ см хөндлөн хэмжээс болон зузаан бүхий “байгалийн төгс” балк $2H-MoSe_2$, $2H-WSe_2$ –ыг сонгон авч ашигласан болно. Балк $2H-MoSe_2$, $2H-WSe_2$ –ын жижиг хэсгийг (2.2a –р зураг) “каптон тууз” гэж нэрлэгддэг "Nitto-Denko Elep Holder BT-150E-CM" маркийн адгезив туузан дээр байрлуулна. Туузан дээрх кристалл наалдсан хэсгийг кристалл наалдаагүй хэсэгтэй хэд хэдэн удаа алгуур нийлүүлж, салгах үйлдлийг хийдэг (2.2b –р зураг). Ингэж адгезив туузан дээр молибдены диселенидын (эсвэл вольфрамын диселенид) үеүд буюу ширхгүүд (flake) наалдаж үлдэнэ. Молибдены диселенид бүхий

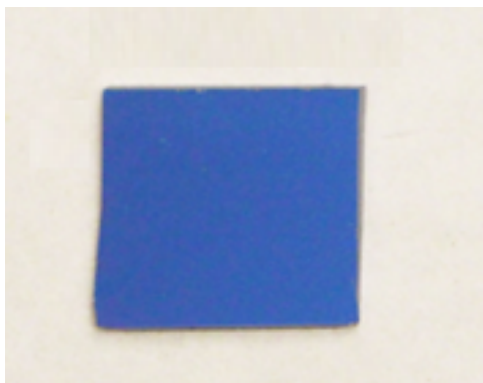
туузыг 270 нм зузаантай SiO_2 бүрхүүл бүхий Si (1 0 0) сууринд нааж ар талаас нь зөөлөн үрж өгснөөр суурин дээр атомын хэмжээс (2.2с –р зураг) бүхий зузаантай MoSe_2 (WSe_2) ширхгүүд сууж өгдөг. Ийм байдлаар механик аргаар гарган авсан дээж бэлэн болно (2.3 –р зураг).

Балк кристаллаас дан буюу цөөн үеийг хуулж суурин дээр суулгах нь суурины бохирдол, судлаачийн туршлага (скочыг хэт хүчтэй эсвэл сул хуулах), хуулалтын үед үүсэх алдаа (суурин дээр нимгэн үе бүхий цөөн үеийг наахад хэт хүчтэй эсвэл сул дарах) зэргийг үл тооцвол санамсаргүй процесс байдаг. Судалгааны дээжийг механик хуулалтын аргаар гарган авах зорилгоор босоо болон цуваа хуулалтын гэсэн 2 аргыг ашиглана. Босоо хуулалтын процесс нь стохастик шинж чанартай бөгөөд дээжний гадаргууд хөндлөн чиглэлийн цууралт үүсдэг тул дээжний чанарт шууд нөлөөлдөг болохыг бидний 2017 онд хийсэн ажлын үр дүн харуулсан [45]. Энэ ажлаар бид хуулалт хийх балк материалын үеийн тоог $N = 1000$ хэмээн сонгон загварчилж Хуулалтын алхам S үед $S - 1$ удаагийн хуулалтын дараа материалын зузаан $n(S - 1)$ байх бөгөөд нэгэн төрлийн түгэлтийн магадлал $1 \leq n(S) \leq n(S - 1)$ байгааг харуулсан. Хуулах алхам бүрд үеүд нимгэрч хуулагдахын зэрэгцээ хөндлөн чиглэлд хагарч байсан тул дээжний хөндлөн чиглэлд үүсэх цууралтыг багасгах зорилгоор "цуваа-хуулалтын" аргыг ашигласан. Энэ аргаар дээжийг гарган авахад дээжний гадаргууд үүсэх эвдрэл харьцангуй бага болохыг Бор нарын ажлын үр дүнгээс харж болно [46].



Зураг 2.2: Вольфрам ба молибдены диселенид гарган авах аргачлал. (a) Цэвэр балк материал. (b) Адгезив туузан дээр вольфрам ба молибдены диселенидийн үе үүссэн байдал. (c) Шилэн суурин дээр вольфрам ба молибдены диселенидийн үеийг суулгах процесс.

Каптон туузыг суурин дээр наахын өмнө суурийг дараах гурван төрлийн уусмалд



Зураг 2.3: Механик хуулалтын аргаар гарган авсан ШМДХ –ын дээж.

соникацад оруулах бөгөөд улмаар азотын урсгал дор хатаадаг:

- **SiO₂/Si суурийг бэлтгэх**

- Суурийг ацетон, изопропанол болон миллекю нэрмэл усанд тус бүрд 10 минутын хугацаанд соникацид оруулна.
- Соникацийг 40кГц давтамжийн утганд явуулна.

Механик хуулалтын аргаар гаргасан WSe₂, MoSe₂ бүхий адгезив туузыг суурин дээр нааж салган авсаны дараа дээжинд скочоос наалдаж үлдсэн цавууны үлдэгдлийг цэвэрлэх зорилгоор дараах процедурыг явуулна:

- 70-100°C температурт ацетоны ууранд 10 минут
- 70-100°C температурт изопропанолын ууранд 10 минут барина.
- 40°C температурт миллекю нэрмэл усан ууранд 10 минут барина.

Адгезив туузанд наалдсан ШМДХ –ын үеийн зузааныг бууруулахын тулд хуулалтыг дараалсан байдлаар хэд хэдэн удаа явуулна. Дараалсан хуулалт явуулах тоо нь санамсаргүй процесс гэдгийг өмнө нь дурдсан билээ. Бид энэ хуулалтын процессыг олон удаа туршиж адгезив туузны хоосон гадаргад 3 –6 удаа нааж, салгаж авахад WSe₂, MoSe₂ –ын 20 хүртлэх цөөн үеийг гаргах боломжтой нь харагдсан. Бэлэн болсон дээжний гадаргууд наалдсан адгезив туузны цавууны үлдэгдлийг химийн аргаар цэвэрлэж оптик шинжилгээнд оруулна.

2.1.2 WSe₂, MoSe₂ нимгэн үеийн оптик судалгаа

WSe₂, MoSe₂ дан үеийн оптик шинж чанарыг тооцоолох

WSe₂, MoSe₂ нь дан үетэй тохиолдолд хориотой бүсийн шууд, балк тохиолдолд хориотой бүсийн шууд бус шилжилттэй байдаг. Энэ материалын хориотой бүс нь үзэгдэх гэрлийн спектрийн мужид оршдог (400 нм –700 нм). Сүүлийн жилүүдэд шилжилтийн металлын дихалкогенидуудын оптик шинж чанарын чиглэлээр нилээд олон судалгааны ажлууд хийгдэж байгаа. Үүнд спектрал ойлт, дифференциал ойлт, дифференциал нэвтрэлт, спектрал шингээлтийн судалгаанууд багтдаг. Эдгээр судалгаанууд нь гол төлөв туршилтын үр дүнд суурилсан бөгөөд онолын загварчлалын ажлууд цөөн хийгдсэн байна. ШМДХ –ын оптик судалгаа эрчимтэй явагдаж байгаа ч эдгээр материалын хугарлын илтгэгч болон сулруулах коэффициентыг тодорхойлсон ажлууд бараг хийгдээгүй байна. Үүнээс гадна ойлт, шингээлт, нэвтрүүлэлтийн коэффициентыг судалсан үр дүнгүүд нь өөр хоорондоо уялддаггүй.

Материалын хугарлын илтгэгч n ба сулруулах коэффициент k нь $\varepsilon_r = \varepsilon_1 + i\varepsilon_2$ гэсэн комплекс диэлектрик тогтмолоос хамаардаг. Комплекс диэлектрик функц нь тухайн материалд шингээгдсэн гэрлийн энергээс хамаардаг. Эдгээр тогтмолуудыг ашиглан материалын хугарлын илтгэгч болон сулруулах коэффициентыг тодорхойлно. Комплекс диэлектрик тогтмол нь n ба k –аас дараах байдлаар хамаарна:

$$\varepsilon_1 = n^2 - k^2 \quad (2.1)$$

$$\varepsilon_2 = 2nk. \quad (2.2)$$

(2.1) ба (2.2) тэгшитгэлээс k коэффициентыг олбол

$$4n^4 - 4n^2\varepsilon_1 = \varepsilon_2^2 \quad (2.3)$$

$$k = \varepsilon_2 / 2n \quad (2.4)$$

(2.3) тэгшитгэлээс n –ийн утгууд олддог ба n –ийн бодит, эерэг утгуудыг ашиглан сулруулах коэффициентыг олно. Орчны диэлектрик нэвтрэх чадвар нь ω давтамжаас $\varepsilon(\omega) = 1 - (4\pi Ne^2)/(m\omega^2)$ гэж хамаарна. Энд: m –электроны масс, e –электроны

цэнэг, ρ - ШМДХ –ын нягт, N_e -нэг атомд агуулагдах электроны тоо, N - нийт атомд агуулагдах электроны тоо бөгөөд $N = \rho\mu N_e/N_a$ болно. Материалыг өндөр давтамжтай гэрлээр үйлчлэхэд материалын диэлектрик нэвтрэх чадвар нь нэг рүү дөхнө [47]. Энэ хамаарал нь нано хэмжээст материалын хувьд биелдэггүй тул зарим судлаачид туршилтын оновчтой утгыг онолын томъёонд орлуулах байдлаар n ба k -г тодорхойлдог.

MoSe₂ ба WSe₂-ын дан үеийн оптик шинж чанар болох ойлт (R), нэвтрүүлэлт (T) ба шингээлтийг (A) дараах систем тэгшитгэлүүдээр тодорхойлдог:

$$R = \frac{(n - 1)^2 + k^2}{(n + 1)^2 + k^2}. \quad (2.5)$$

$$T = (1 - R) \exp^{-\alpha t} \quad (2.6)$$

(2.6)-р тэгшитгэл дэх α нь шингээлтийн коэффициент, t нь үеийн зузаан болно. Шингээлтийн коэффициент нь туссан долгионы урт ба ШМДХ –ийн сулруулах коэффициентээс хамаарна:

$$\alpha = 4\pi k/\lambda. \quad (2.7)$$

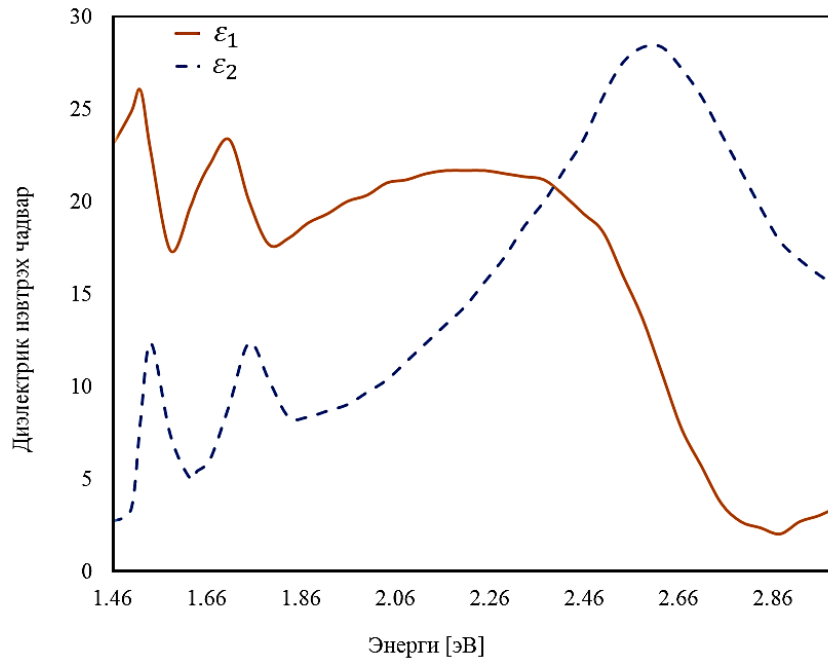
Шингээлт нь

$$A = 1 - (R + T). \quad (2.8)$$

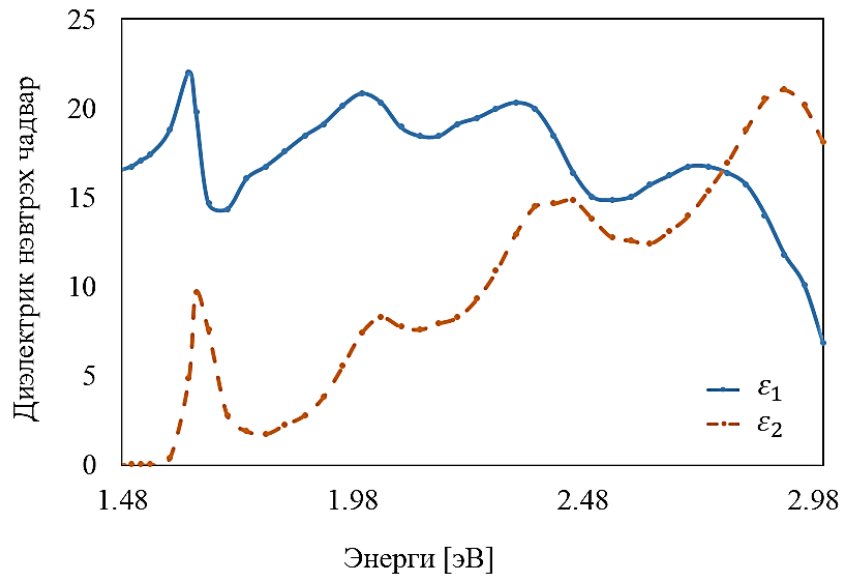
тэгшитгэлээр илэрхийлэгдэнэ.

Оптик тогтмолууд. MoSe₂ ба WSe₂-ын дан үеийн оптик тогтмолууд болох n ба k -г туршилтын үр дүнгээр тодорхойлогдсон ε_1 ба ε_2 -ын утгыг ашиглан тооцоолсон (1 ба 2-р зураг). MoSe₂ ба WSe₂-ийн дан үеийн зузааныг 0.7 нм [49] байхаар тооцов.

Зураг 2.6,2.7 –д MoSe₂ ба WSe₂ –ын дан үеийн n ба k утгуудыг үзүүлэв. MoSe₂-ийн хувьд дан үед 1.52 эВ энергид n хугарлын илтгэгч нь 5.2, балкийн хувьд 1.51 эВ энергид 5.49 хэмээн тооцоологдов. Харин энэ материалын хувьд сулруулах коэффициентын хамгийн их утга нь дан үед 3.29 (2.7 эВ), балкийн хувьд 2.43 (3.00 эВ) хэмээн тодорхойлогдсон. WSe₂ материалын хувьд энерги ба хугарлын илтгэгчийн хамаарлыг дан ба балкийн хувьд тодорхойлсон болно. Энд дан үеийн хувьд 1.63 эВ энергид хугарлын илтгэгчийн хамгийн их утга 4.72, балкийн хувьд 1.62 эВ утгад 4.69 болох нь тогтоогдсон. Энэ материалын хувьд сулруулах коэффициентын хамгийн их



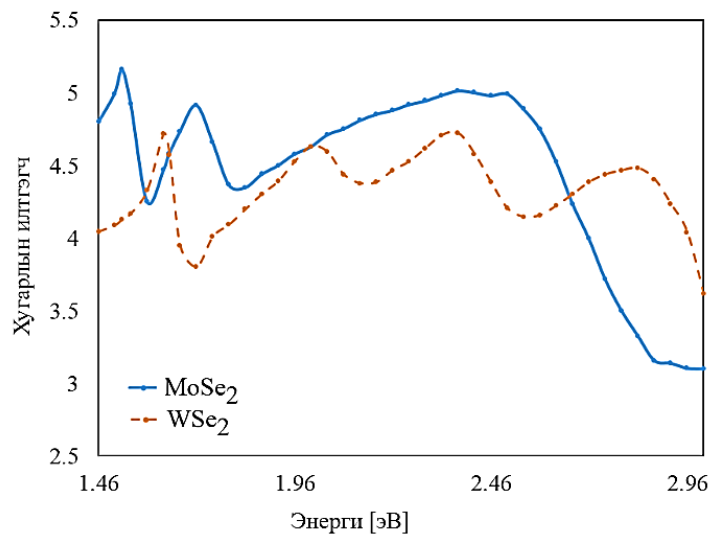
Зураг 2.4: MoSe₂-ын диэлектрик нэвтрэх чадвар болон материалд тусах гэрлийн энергийн хамаарал [48].



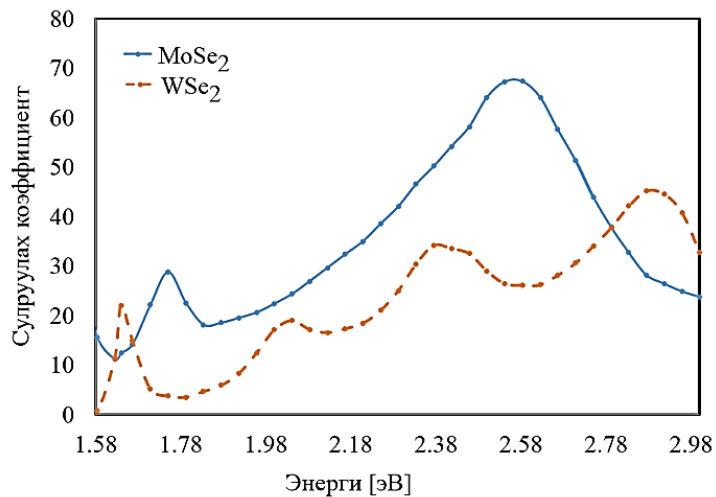
Зураг 2.5: WSe₂-ын диэлектрик нэвтрэх чадвар болон материалд тусах гэрлийн энергийн хамаарал [48].

утгууд нь дан үед 2.6 (2.94 эВ), балкад 1.56 (3 эВ) болох нь тодорхойлогдсон.

Бид тооцоондоо харьцуулах зорилгоор MoSe₂ ба WSe₂ -ын дан ба балк материалын хугарлын илтгэгчийг тооцоолсон бөгөөд энэ ажилд зөвхөн дан үеийн хувьд гарсан үр дүнг харуулсан болно.

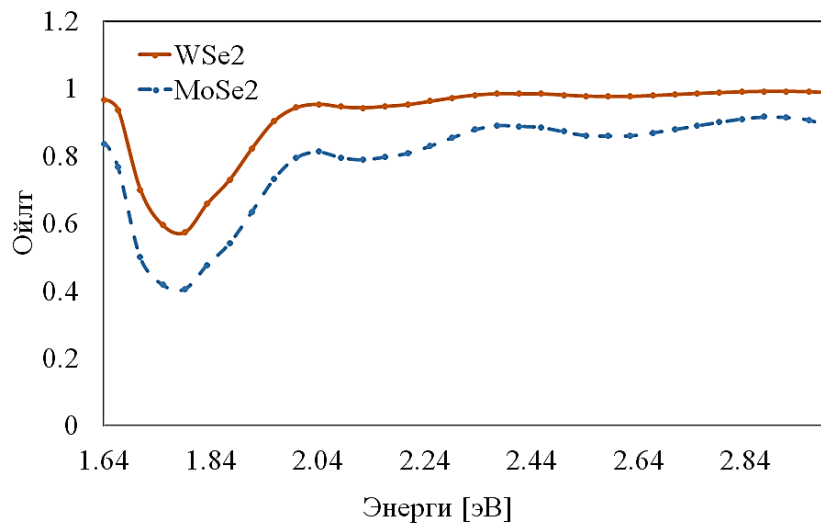


Зураг 2.6: MoSe₂ ба WSe₂ –ын дан үеийн хугарлын илтгэгч, энергийн хамаарал.

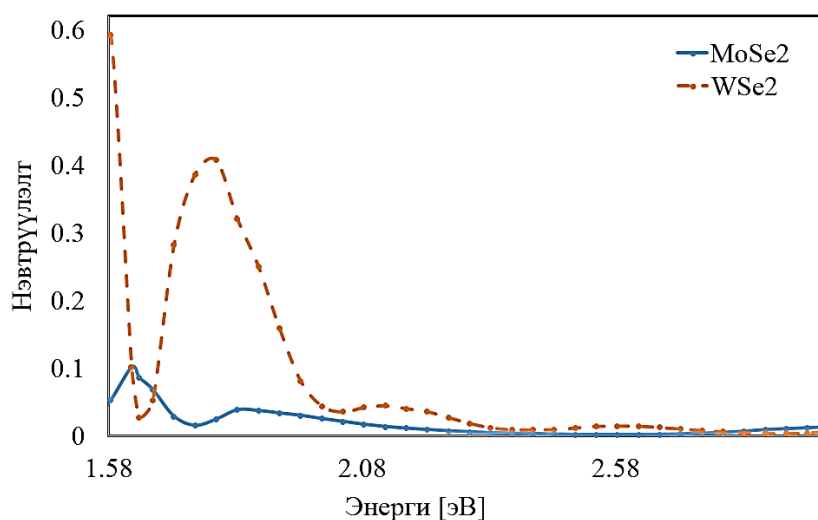


Зураг 2.7: MoSe₂ ба WSe₂ –ын дан үеийн дан үеийн сулруулах коэффициент ба энергийн хамаарал.

Оптик шинж чанар. MoSe₂ ба WSe₂ –ын дан үе ба балкийн оптик шинж чанарууд болох ойлт, нэвтрэлт, шингээлтийг онолын хэсэгт дурдсан тэгшитгэлүүд ашиглан тооцоолсон. Зураг 2.8-2.10 –д дээрх материалуудын дан үеийн оптик шинж чанар болох гадаргаас ойх гэрлийн ойлт, гадаргын гэрлийн нэвтрүүлэлт, шингээлт нь гэрлийн энергээс хамаарах хамаарлыг үзүүлсэн. Дан үеийн хувьд материалын гэрлийн шингээлт нь балк үеийнхээс харьцангуй бага байсан. MoSe₂ -ын дан үеийн ойлтын хамгийн утга нь 55.7% (2.64 эВ), нэвтрүүлэлтийн хамгийн их утга 59.2% (1.6 эВ) байсан бөгөөд шингээлтийн хамгийн их утга 2.78% нь гэж тооцоологдсон.



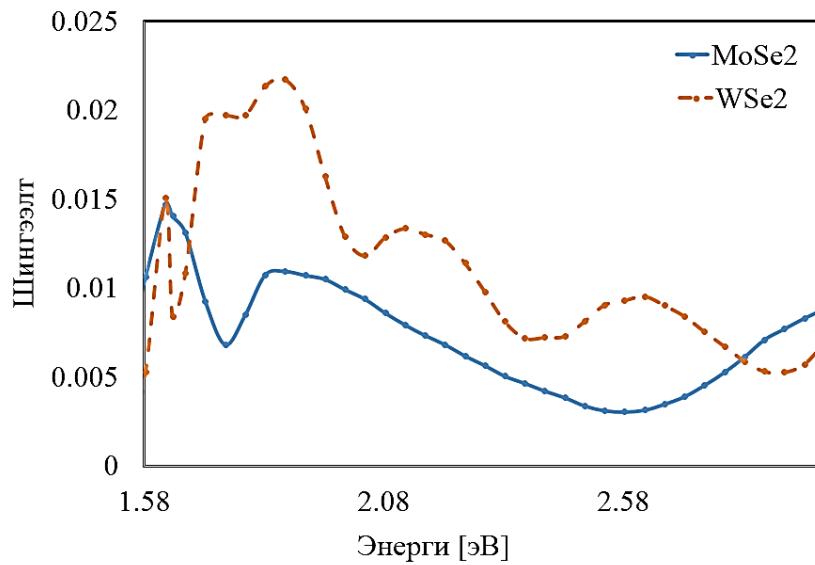
Зураг 2.8: MoSe₂ ба WSe₂ –ын дан үеийн гадаргаас ойх гэрлийн ойлт ба энергийн хамаарал.



Зураг 2.9: MoSe₂ ба WSe₂ –ын дан үеийн гэрэл нэвтрүүлэлт ба энергийн хамаарал.

WSe₂ –ын дан үеийн ойлт, нэвтрүүлэлт болон шингээлтийн хамгийн утгууд харгалзан 49.7% (2.9 эВ), 65.4% (1.71 эВ) ба 1.62% (2.47 эВ) байсан болно. Энэ нь материалын зузаан маш бага тул кристаллд шингээгдэх эрчим бага байгаатай холбоотой.

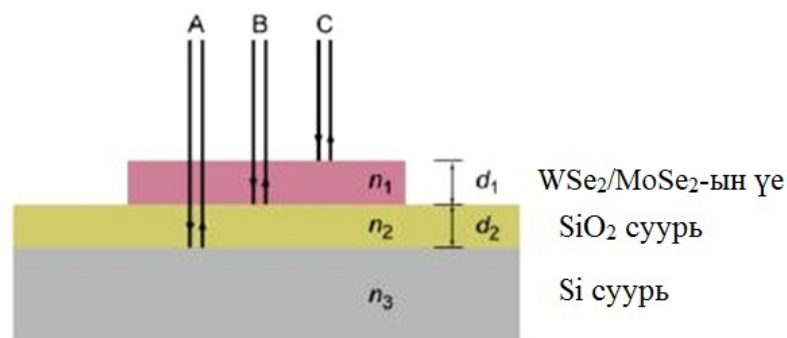
MoSe₂ ба WSe₂ –ын дан ба балк материалын хугарлын илтгэгчийг харьцуулахад илэрхий зөрүүтэй байгаа нь үеийн тоо хугарлын илтгэгчид нөлөөлдөг болохыг харуулж байна. Үүнтэй ижил шинж чанар сулруулах коэффициентэд ажиглагдсан. Эдгээр утгууд нь Жан нарын тодорхойлсон оптик тогтмолуудын утгуудтай ойролцоо байна [50].



Зураг 2.10: MoSe₂ ба WSe₂ –ын дан үеийн гадаргын гэрэл гадаргын шингээлт ба энергийн хамаарал.

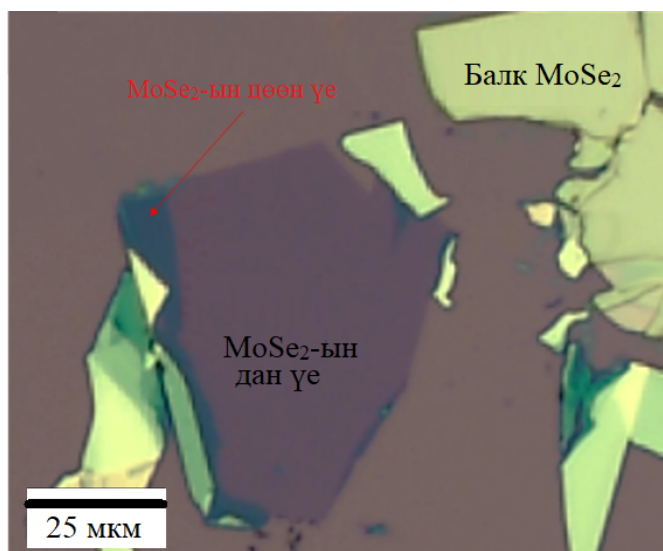
WSe₂, MoSe₂ цөөн үеийг оптик шинжилгээгээр тодорхойлох

Механик хуулалтын аргаар хоёр хэмжээст WSe₂, MoSe₂ –ыг гарган авсаны дараа дээжний гадаргууг шинжлэхийн тулд 3200K шүүлтүүргүй галоген чийдэнтэй 5×, 20×, 50×, 100× дахин өсгөх объектив бүхий өнгөт камераар тоноглогдсон Olympus BH2-UMA оптик микроскоп ашигласан. Дээжний гадаргуугийн зургийг TK-C 1380 загварын JVC дижитал камераар авсан. Оптик микроскопын ялгарлын тоон анализыг "Image J software" программын тусламжтай гүйцэтгэсэн болно.



Зураг 2.11: WSe₂, MoSe₂ –ын цөөн үеүдийн оптик ялгарлыг илрүүлэх бүтэц.

Нанохэмжээст ШМДХ болон түүний доор байрлах цахиурын ислийн хоорондын ялгарал нь гэрлийн интерференцийн өнгөний шилжилт болон материалын тунгалаг



Зураг 2.12: Балк молибдены дисульфид болон цөөн үеийн оптик микроскопоор харагдах байдал.

бус чанараас хамаардаг. Энэ ялгарлыг тооцоолхын тулд нимгэн үе болон цахиурын ислийн үеийг n -төрлийн хольцон дамжуулал бүхий цахиурын суурин дээр суулгах бөгөөд 2.11 –р зурагт тухайн материал бүрийн зузаан болон хугарлын илтгэгчийн хамаарлыг тодорхойлох схемчлэлийг харуулсан байна. Хоёр хэмжээст ШМДХ –ын хугарлын илтгэгч болон зузаанаас хамааруулсан ялгарлын загварчлалаас үзвэл цахиурын ислийн зузаан 50-100 нм болон 200-300 нм тохиолдолд цөөн үеүд сайн ялгарч харагддаг байна [41].

Судалгаанд цахиур дээр суулгасан цахиурын ислийн 100 нм, 270 нм болон 300 нм зузаантай стандарт сууриуд ашиглагддаг бөгөөд 450 нм түүнээс дээш долгионы урттай гэрлийг ашигладаг. Туршилтын үр дүнгээс үзвэл 270 нм зузаантай SiO_2/Si суурин дээр суусан бүтцийн ялгарал илүү тод байгаа нь тогтоогдсон тул цаашид 270 нм SiO_2/Si суурин дээр суулгасан дээжийг цагаан гэрлээр үйлчилж судалсан болно.

Судалгааны ажлын хүрээнд материал тус бүрийн 10, 10 дээж гарган авсан бөгөөд дээжний морфологийг оптик микроскопоор судалсан болно. Дээрх дээжнүүдийн хувьд суурин дээр суух MoSe_2 , WSe_2 -ын нимгэн үеийн зузаан ямар хэмжээтэй байх, ямар тооны нимгэн үеүд суух нь санамсаргүй процесс бөгөөд оптик болон атомын хүчний микроскопын судалгаагаар дээрх үр дүнг тодорхойлох боломжтой. Иймд эдгээр дээжнүүд дээр суусан үеийн тоо, хөндлөн хэмжээс бүгд өөр хоорондоо ялгаатай болно.

ШМДХ –ын дан болон цөөн үеийн хувьд оптик микроскопын зураглал дээр тунгалаг нил ягаан (дан үе) өнгөнөөс тод нил ягаан өнгөөр харагдаж сууринаас ялгардаг [51]. Бид энэхүү судалгаагаар 10×10 мкм хөндлөн хэмжээс бүхий дан үеийг гарган авсан болохыг тодорхойлов.

SiO_2/Si суурин дээр суулгасан нанобүтцийн оптик ялгарлыг Майкельсоны [52] томъёогоор тодорхойлдог:

$$CO = \frac{I_{\text{суурь}} - I_{\text{мат}}}{I_{\text{суурь}} + I_{\text{мат}}}. \quad (2.9)$$

Энд: $I_{\text{суурь}}$ нь хоёр хэмжээст материал суулгасан сууринаас ойсон гэрлийн эрчим, $I_{\text{мат}}$ нь хоёр хэмжээст материалаас ойсон гэрлийн эрчим болно.

Оптик микроскопын зураглалын хувьд оптик ялгарал нь улаан, ногоон, хөх өнгөний нийлэмжүүдээр тодорхойлогддог тул дүрслэлийн ялгарлыг өнгө бүрийн ялгарлын хувьд тодорхойлно:

$$CO_{\text{улаан}} = \frac{R_{\text{суурь}} - R_{\text{мат}}}{R_{\text{суурь}} + R_{\text{мат}}} \quad (2.10)$$

$$CO_{\text{ногоон}} = \frac{G_{\text{суурь}} - G_{\text{мат}}}{G_{\text{суурь}} + G_{\text{мат}}} \quad (2.11)$$

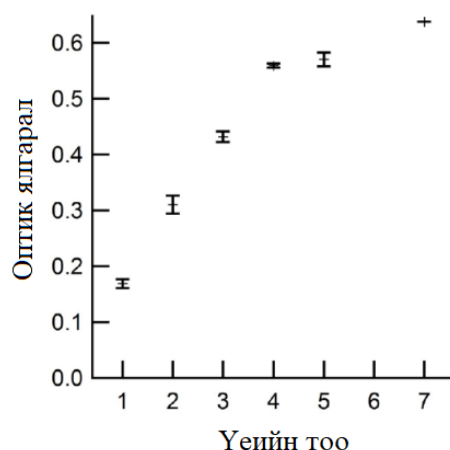
$$CO_{\text{хөх}} = \frac{B_{\text{суурь}} - B_{\text{мат}}}{B_{\text{суурь}} + B_{\text{мат}}}. \quad (2.12)$$

Эцэст нь дээрх бүгдийг нэгтгэн дундаж оптик ялгарлыг тодорхойлно:

$$\overline{CO} = \frac{(CO_{\text{улаан}} + CO_{\text{ногоон}} + CO_{\text{хөх}})}{3}. \quad (2.13)$$

Хоёр хэмжээст молибден болон вольфрамдын дисульфид болон диселенидын оптик ялгарал нь үеийн тооноос хамаарах хамаарлыг бид 2017 онд хийсэн судалгааны ажлаараа тодорхойлсон болно (Зураг 2.13). Бид судалгааны үр дүнгээ зарим сүүлийн үед хэвлэгдсэн ажлуудад дурдсан үр дүнтэй харьцуулсан. Бидний ажлаас өмнө $\text{Si}(100)$ суурин дээр суулгасан SiO_2 үеийн зузаанаас MoSe_2 , WSe_2 –ын оптик ялгарал хэрхэн хамаардаг талаар гурван ажил хэвлэгдсэн бөгөөд эдгээр ажилд гэрлийн долгионы урт болон ШМДХ –ын үеийн тоо нь оптик ялгаралд хэрхэн нөлөөлдөг болохыг судалжээ [53, 41, 42].

Гэрэл суурь болон материалын гадаргаас ойх үед ойсон гэрлийн интерференц ажиглагдах бөгөөд сууринаас ойсон ижил фаз бүхий гэрлийн долгионууд бие бие-

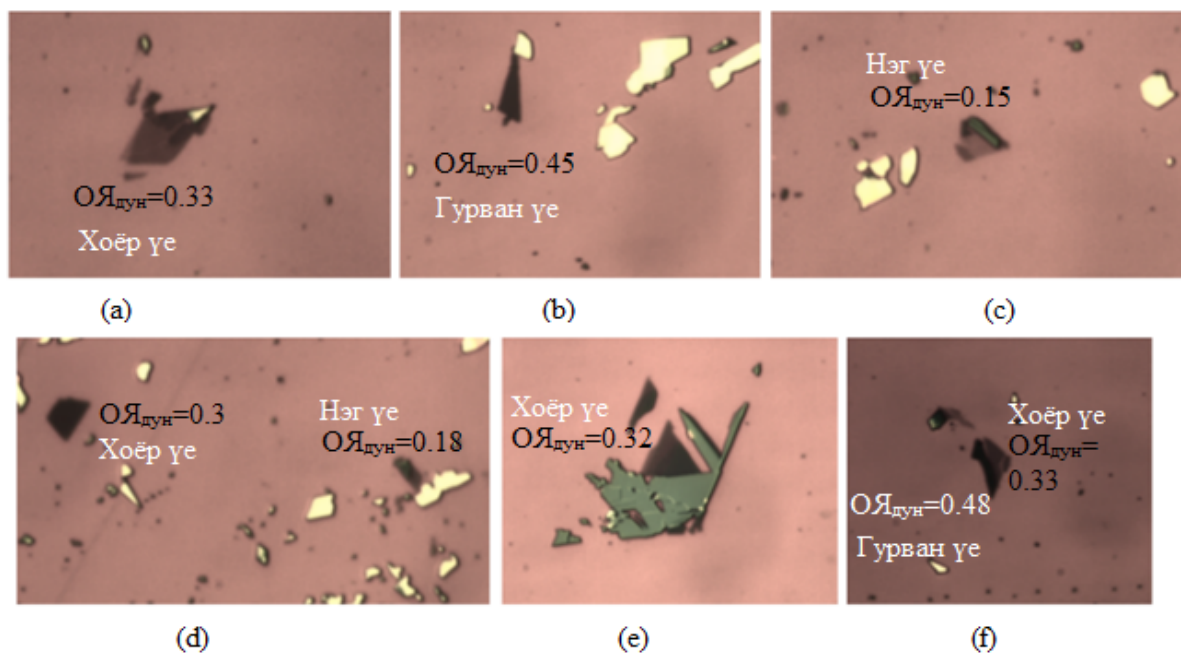


Зураг 2.13: SiO₂/Si (270 нм) суурин дээр суулгасан ШМДХ-ын цөөн үеийн оптик ялгарал ба үеийн тооны хамаарал [45].

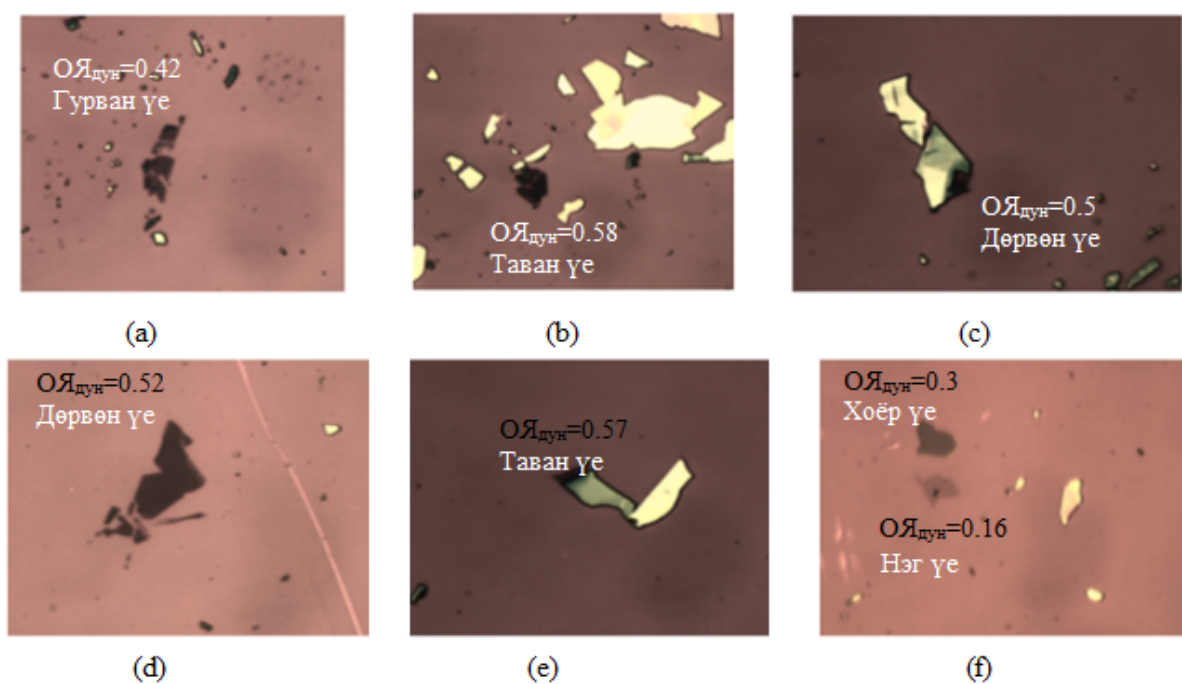
нээ дэмжиж долгионы далайц буюу эрчим нэмэгддэг. Энэ үед оптик ялгарал эерэг байх бөгөөд эсрэг тохиолдолд оптик ялгарал нь сөрөг байна. Симсек нар [43] 270 нм SiO₂/Si суурины хувьд судалгаа хийж өргөн завсрын гэрэлтүүлэлтийн хувьд Веберийн ялгарал ≈ 0.15 болохыг тогтоосон бол бидний ажилд энэ утга нь ≈ 0.17 болох нь тогтоогдов. Үүний зэрэгцээ бидний ажилд Симсек нарын ажилд дурдагдсан улаан-ногоон-хөх (сөрөг ялгарал) сувгуудын хоорондох урвуу ялгарал ажиглагдаагүй болно. Дээрх ажлын үр дүнг сайжруулсан ажлыг Бенамеур нар гүйцэтгэсэн байна [41]. Тэдний ажилд ялгарлыг SiO₂ –ын зузаан, гэрлийн долгионы уртаар тооцоолсон ба SiO₂ –ын зузаан 270 нм үед ШМДХ –ын дан үе харагддаг болохыг тогтоожээ. Бидний ажиглалтаар SiO₂ диэлектрикийн зузаан 270 нм байхад улаан, ногоон, хөх ялгарлын сувгууд ямагт эерэг байсан нь Бенамеурын ажлын үр дүнтэй тохирч байв.

Судалгааны ажлын хүрээнд гарган авсан MoSe₂, WSe₂ дээжний морфологийг оптик микроскопоор судалсан болно. 2.14–2.17 –р зурагт дээжүүдэд хийсэн оптик микроскопын шинжилгээний онцлог үр дүнгүүдийг үзүүлэв. Микроскопын шинжилгээний үр дүнг үзвэл молибден ба вольфрамын диселенидын балк, цөөн үед үүссэн байгаа нь тод харагдаж байна. Оптик ялгарлын утгууд нь 3 удаагийн хэмжилтийн дундаж утга бөгөөд хэмжилтийн харьцангуй алдаа нь $\sim 3\%$ байна.

Дээжний оптик ялгарал болон үеийн зузааныг ашиглан гарган авсан материалын зузааныг тодорхойлох боломжтой. ШМДХ-ын хувьд нэг үеийн зузаан 0.75 нм байдаг тул энэ хамаарлын ашиглан материалын зузааныг тодорхойлж 2.1-р хүснэгтэд

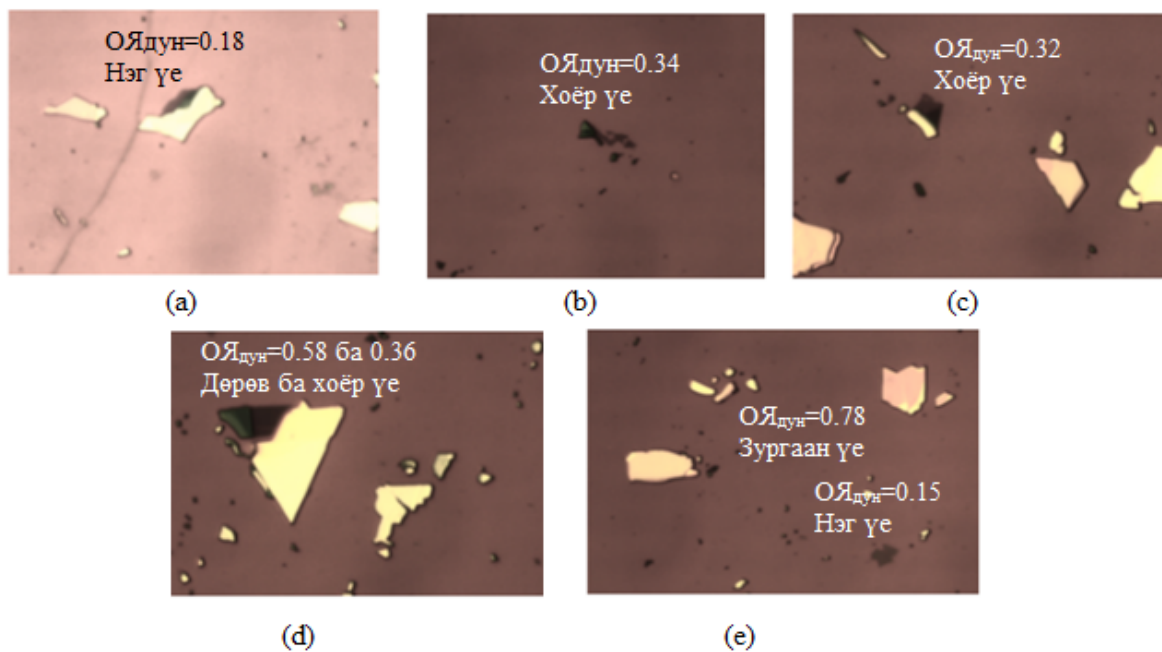


Зураг 2.14: MoSe₂ –ын балк болон цөөн үеийн харагдах байдал.

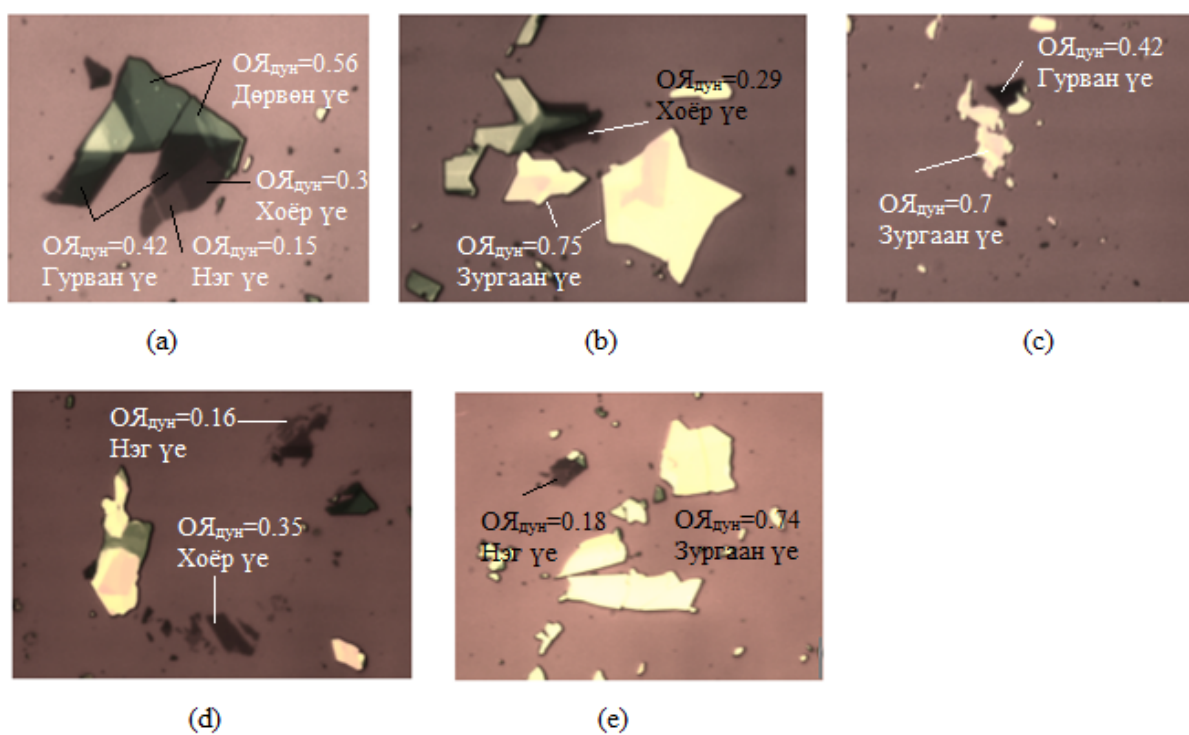


Зураг 2.15: MoSe₂ –ын балк болон цөөн үеийн харагдах байдал.

үзүүлэв. Оптик шинжилгээний үр дүнгээс дээр дурдсан материалуудын дан болон цөөн үеийг гарган авсан болохыг харж болно.



Зураг 2.16: WSe_2 –ын балк болон цөөн үеийн харагдах байдал.



Зураг 2.17: WSe_2 –ын балк болон цөөн үеийн харагдах байдал.

2.1.3 Атомын хүчний микроскопын судалгаа

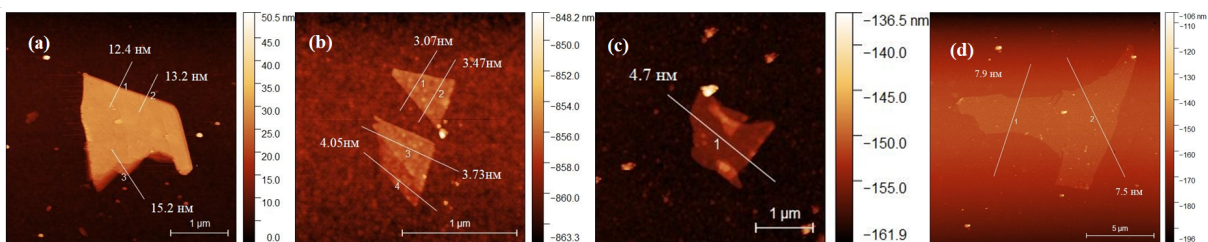
Атомын хүчний микроскоп нь хоёр хэмжээст материалын гадаргуугийн топографийн мэдээлэл, үеийн зузааныг нарийвчлалтай тодорхойлдог төхөөрөмж юм. АХМ –ын

Хүснэгт 2.1: ШМДХ –ын оптик микроскопийн шинжилгээний дүн. Дээжний үеийн тоо ба зузааны хамаарал.

№	Оптик ялгарал	Үеийн тоо	Үеийн зузаан
1	0.13-0.18	1	0.75 нм
2	0.3-0.38	2	1.5 нм
3	0.4-0.48	3	2.25 нм
4	0.5-0.54	4	3.0 нм
5	0.55-0.58	5	3.75 нм
6	0.6-аас их	олон үе	-

хэмжилт агаар болон шингэн орчинд хийгддэг онцлогтой. Нөгөө талаас тэмтрэх туннелийн микроскоп зэрэг өндөр вакуум орчинд ажиллах микроскопоос ялгаатай нь ердийн нөхцөлд хэмжилт гүйцэтгэх боломжтойгоороо давуу байна. АХМ –ын хэмжилтээр дээжний гадаргууг тэмтрэхэд хурц үзүүртэй зүү буюу кантилевр ашиглагдана. АХМ –ын кантилеврын үзүүр дэх тэмтрэгч зүүг лазерын гэрлээр үйлчлэх (хөдөлгөж) байдлаар зүүг дээш, доош хөдөлгөж гадаргуугийн дээгүүр шилжүүлнэ. Энэ үед системийн фотодиод ойсон лазерын гэрлийг бүртгэдэг. Микроскопын зүү гадаргуугаас дээш тодорхой өндөрт байрлан шилжих бөгөөд дунджаар энэ өндөр нь 90 нм орчим байдаг. Төслийн хүрээнд атомын хүчний микроскопын судалгаанд ШУТИС-ийн «Материал судлал, нанотехнологийн лаборатор» –т ашиглагдаж буй «AFM- CMM 2000» микроскопыг ашиглав. Энэ микроскоп нь АХМ-ын үндсэн 4 горимоос гадна ТТМ-ын горимд ажиллах боломжтой төхөөрөмж болно.

АХМ –ын хэмжилтийг хүчний хэмжилт, топографын зураглал, зургийн боловсруулалт гэсэн үндсэн гурван үе шаттай явуулдаг. Хүчний хэмжилтийн хувьд зүү болон дээжний атомуудын хоорондын харилцан үйлчлэлийн хүчийг зайнаас хамааруулж хэмждэг. Улмаар зүү дээжний харилцан үйлчлэлийн энергийн гадаргуугийн гурван хэмжээст дүрслэлийг өндөр нарийвчлалтай гаргаж топографийн зураглалыг бий болгоно. Топографийн зураглал нь харилцан адилгүй өнгөөр зурагдах боломж-



Зураг 2.18: MoSe₂ –ын цөөн үеийн атомын хүчний микроскопын зураг. (a) ~2×2 мкм хөндлөн хэмжээтэй 16-20 үе бүхий мөхлөг, (b), (c) 3-4.7 нм зузаантай жижиг мөхлөгүүд, (d) MoSe₂ –ын 10 үеэс тогтох том хэмжээтэй мөхлөг.

той ч судалгааны ажлын үр дүнд оруулах зургийг шар-бор өнгөөр дүрсэлдэг [54].

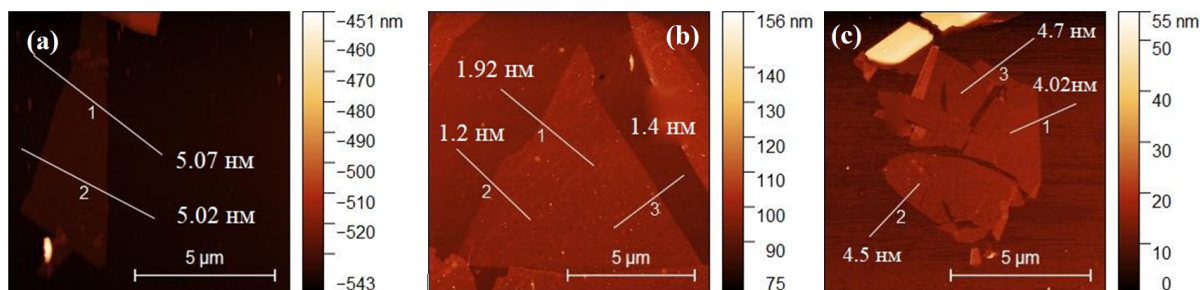
АХМ нь хэмжилтийн онцлогоос хамаарч статик буюу хүрэлцэх горим (contact mode), динамик буюу товших (tapping) гэсэн горимд ажиллах боломжтой. Товших горимд зүү шинжилж буй гадаргуугаас тодорхой зайд байрлан гадаргуугийн профилийг дагаж тухайн зайгаа хадгалах байдлаар гадаргууг шинжилнэ. Харин өндөр нарийвчлалтай зураглал гаргахад хүрэлцэх горимын хэмжилт хийх бөгөөд энэ үед зүү гадаргуугийн атомд хамгийн боломжит зайд ойртдог.

Хэмжилт хийж дууссаны дараа **Gwyddion** (Open source program) программаар өгөгдөлд боловсруулалт хийж зураглал гарган, ШМДХ –ын үеийн тоог тодорхойлох ажлыг гүйцэтгэсэн. Үүний зэрэгцээ дээжний гадаргууд үлдсэн химийн боловсруулалт, суурины гадаргууд бий болсон эвдрэл, ан цавын ул мөрийг шүүлт (filtering), мөхлөгийн марклалт хийж чанартай зураг гаргана.

MoSe₂

Атомын хүчний микроскопын судалгааг товших болон хүрэлцэх горимд явуулав. Эхний тохиолдолд дээжний гадаргуу ба микроскопын зүүний типын хоорондох зайг тогтмол 80-90 нм байхаар тохируулсан. Дараачийн тохиолдолд зүүний тип болон дээжний гадаргуугийн хоорондох зайг маш бага буюу 20 нм орчим байхаар тохируулж хэмжилтийг гүйцэтгэсэн. Дээрх хоёр хэмжилтийг нэг ижил дээжин дээр явуулж үр дүнг харьцуулахад хүрэлцэх горимд явуулсан хэмжилтийн үр дүн илүү нарийвчлал сайтай байсан. Иймд бид цаашдын хэмжилтийг хүрэлцэх горимд явуулсан болно.

Зураг 2.18 –д MoSe₂ –ын цөөн үеийн атомын хүчний микроскопын хэмжилтийн

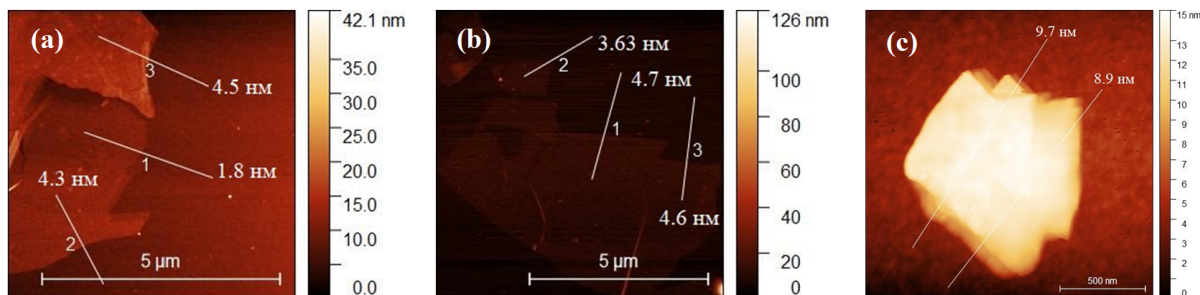


Зураг 2.19: MoSe_2 –ын цөөн үеийн атомын хүчний микроскопын зураг. (a) MoSe_2 –ын 5 нм зузаантай мөхлөг, (b) том хэмжээтэй 2-3 үе, (c) 7 мкм орчим хөндлөн хэмжээтэй 5-6 үе бүхий мөхлөг.

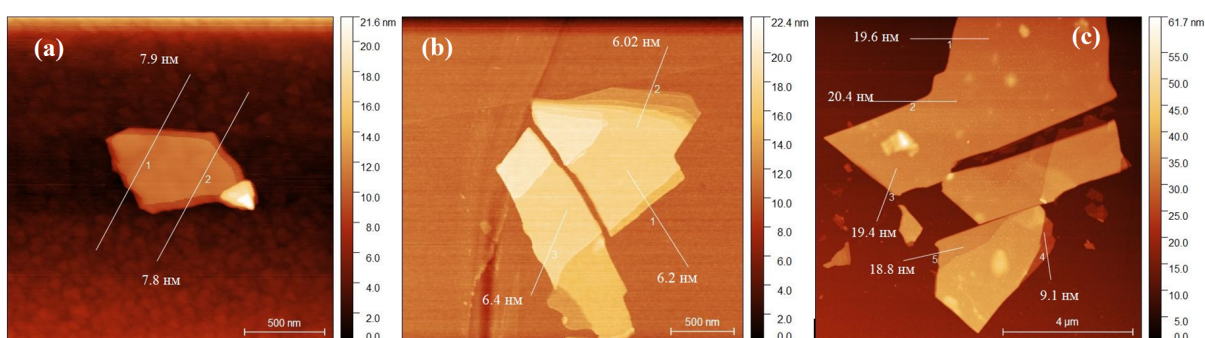
үр дүнг харуулав. Зураг 2.18a –д үзүүлсэн мөхлөгийн зузаан 12.4-15.2 нм, хөндлөн хэмжээ $\sim 2 \times 2$ мкм байсан ба энэ мөхлөг нь MoSe_2 –ын 16-20 үеэс бүрдэж байгааг харуулж байна. Хоёр хэмжээст материалын хөндлөн хэмжээ нь $\sim 1 \times 1$ мкм байх чухал байдаг. Зураг 2.18b, c –д үзүүлсэн мөхлөгүүдийн хувьд хөндлөн хэмжээ нь 1 мкм^2 –аас бага төдийгүй 3-4.7 нм зузаантай байна. Зураг 2.18d –д үзүүлсэн мөхлөгийн хувьд хөндлөн хэмжээст $\sim 12 \times 10$ мкм хэмжээтэй, 7.5 нм зузаантай буюу 10 орчим үеэс тогтох материал болох нь тодорхойлогдсон.

Зураг 2.19 –д MoSe_2 –ын 5-7-р дээжний цөөн үеийн атомын хүчний микроскопын хэмжилтийн үр дүнг харуулав. Зураг 2.19a –д үзүүлсэн мөхлөгийн зузаан 5 нм, хөндлөн хэмжээ $\sim 3 \times 5$ мкм байсан ба энэ мөхлөг нь MoSe_2 –ын 6-7 үеэс бүрдэж байгааг харуулж байна. Зураг 2.19b –д үзүүлсэн мөхлөгийн хувьд 10 мкм хөндлөн хэмжээтэй 1.2-1.9 нм зузаантай байна. Энэ мөхлөг нь бидний илрүүлсэн хамгийн бага зузаантай, хамгийн том мөхлөг байв. Зураг 2.19c –д 4-4.7 нм зузаантай 7 мкм хөндлөн хэмжээстэй мөхлөгийн топографын зургийг үзүүлсэн байна.

Зураг 2.20 –д MoSe_2 –ын 8-10-р дээжний цөөн үеийн топографын зургийг үзүүлэв. Зураг 2.20a –д үзүүлсэн мөхлөгийн зузаан 1.8 нм ба 4.5 нм байсан бөгөөд 1.8 нм зузаантай мөхлөг нь механик хуулалтын процесст 4.5 нм зузаантай мөхлөг хөндлөн чиглэлд дутуу хуулагдсаны ул мөр болох нь тодорхой байна. Зураг 2.20b –д үзүүлсэн мөхлөгийн хувьд 8 орчим мкм хөндлөн хэмжээтэй, 3.6-4.7 нм зузаантай буюу MoSe_2 –ын 5-6 үетэй байна. Зураг 2.20c –д 8.9-9.7 нм зузаантай 1 мкм орчим хөндлөн хэмжээстэй мөхлөгийн гадаргуугийн зургийг үзүүлсэн байна.



Зураг 2.20: MoSe₂ –ын цөөн үеийн атомын хүчний микроскопын зураг. (a) MoSe₂ –ын дутуу хуулагдсан 4.5 нм зузаантай мөхлөг, (b) MoSe₂ –ын том хэмжээтэй 5-6 үе, (c) MoSe₂ –ын 5-6 үе.

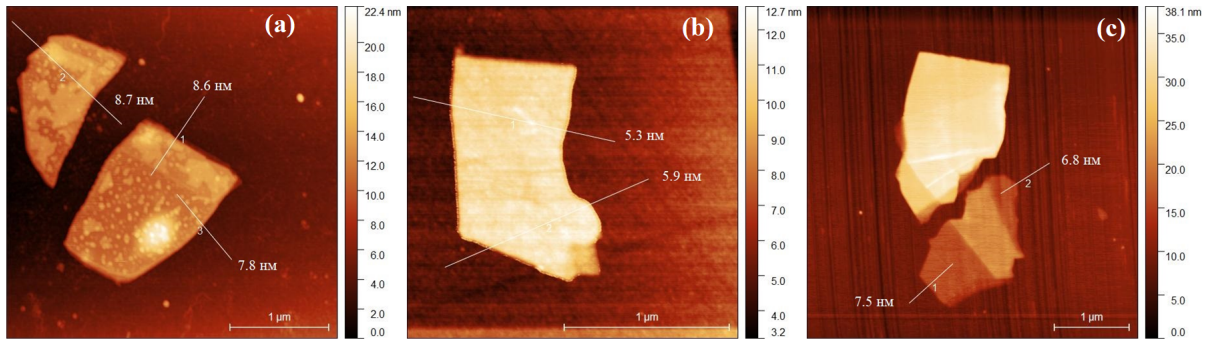


Зураг 2.21: WSe₂ –ын цөөн үеийн атомын хүчний микроскопын зураг. (a) WSe₂ –ын 7.9 нм зузаантай мөхлөг, (b) 1.5 мкм² орчим хөндлөн хэмжээтэй 6.02-6.4 нм зузаантай мөхлөг, (c) ~8×8 мкм хөндлөн хэмжээтэй 27 үе бүхий мөхлөг.

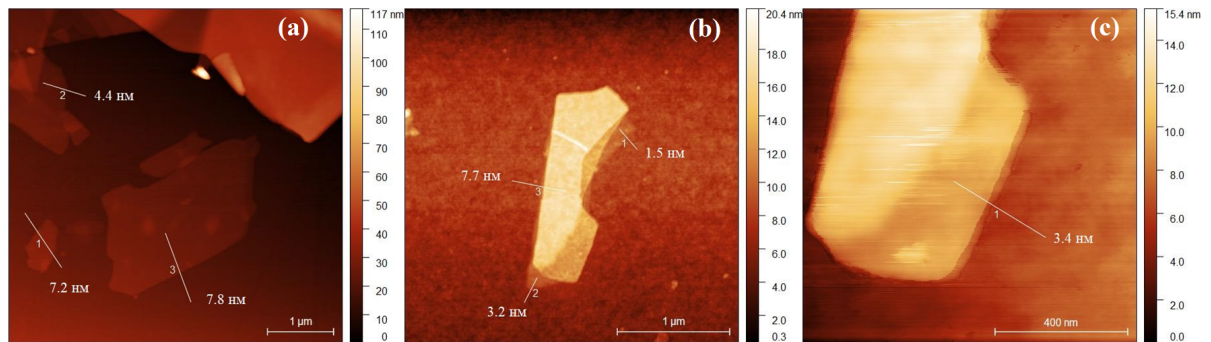
WSe₂

WSe₂ –ын цөөн үеийг MoSe₂ –д хийсэнтэй ижил аргачлалаар хэмжсэн. Зураг 2.21a –д үзүүлсэн мөхлөгийн зузаан 7.9 нм, хөндлөн хэмжээ ~1×1 мкм байсан ба энэ мөхлөг нь WSe₂ –ын 10 үеэс бүрдэж байгааг харуулж байна. Зураг 2.21b –д үзүүлсэн мөхлөгүүдийн хувьд хөндлөн хэмжээ нь 1.5 мкм² орчим байсан бөгөөд 6.02-6.4 нм зузаантай байна. Энэ мөхлөг нь 9 үеэс тогтсон материал болно. Зураг 2.21c –д үзүүлсэн мөхлөгийн хөндлөн хэмжээс нь ~8×8 мкм хэмжээтэй, 20.4 нм хүртлэх зузаантай буюу 27 орчим үеэс тогтох материал болох нь тодорхойлогдсон.

Зураг 2.22 –д WSe₂ –ын 4-7-р дээжний цөөн үеийн топографын зургийг үзүүлэв. Зураг 2.22a –д 7.8-8.7 нм зузаантай ~1×1 мкм ~1×0.8 мкм хөндлөн хэмжээтэй 10-11 үе бүхий хос мөхлөг байна. Дээрх хоёр мөхлөг нь хуулалтын явцад дундуураа хуваагдсан болохыг зургаас харж болно. Зураг 2.22b –д ~1×0.8 мкм хөндлөн хэмжээтэй, мөхлөгийн зузаан 5.3-5.8 нм байх мөхлөгийг үзүүлсэн 7-8 үе бүхий мөхлөг байна.



Зураг 2.22: WSe_2 –ын цөөн үеийн атомын хүчний микроскопын зураг. (a) WSe_2 –ын 10-11 үеэс тогтох мөхлөг, (b) $\sim 1 \times 0.8$ мкм хөндлөн хэмжээтэй 7-8 үе, (c) WSe_2 –ын 9-10 үеэс тогтох мөхлөг.



Зураг 2.23: WSe_2 –ын 7-9-р дээжний цөөн үеийн атомын хүчний микроскопын зураг. (a) WSe_2 –ын 6-10 үеэс тогтох мөхлөгүүд, (b) захаараа хуулагдаж нимгэрсэн 10 үе бүхий мөхлөг, (c) захаараа нимгэрсэн мөхлөгийн гадаргуугийн зураг.

Зураг 2.22c –д үзүүлсэн мөхлөгийн хувьд $\sim 1 \times 2$ мкм хөндлөн хэмжээтэй, 6.8-7.5 нм зузаантай буюу WSe_2 –ын 9-10 үетэй байна.

Зураг 2.23 –д WSe_2 –ын 7-9-р дээжний цөөн үеийн мөхлөгийн зургийг үзүүлэв. Зураг 2.23a –д үзүүлсэн "2" гэсэн профиль татсан мөхлөг нь хамгийн бага зузаантай мөхлөг байсан бөгөөд энэ мөхлөг 4.4 нм зузаантай 6 үеэс тогтож байсан. Энэ зургаас бусад хоёр мөхлөг нь 9-10 тооны үеэс тогтож байгааг харж болно. Зураг 2.23b –д 7.7 нм зузаантай WSe_2 –ын мөхлөгийг харуулсан ба энэ мөхлөг нь захаараа хуулагдаж 2-4 үетэй болж хуулагдсан байна. Зураг 2.23c –д 3.4 нм зузаантай $\sim 1 \times 0.5$ мкм орчим хөндлөн хэмжээтэй мөхлөгийн гадаргуугийн зургийг үзүүлсэн байна. Энэ зургаас дээрх мөхлөг зүүн талаасаа хуулагдаж нимгэрсэн байгаа нь харагдаж байна.

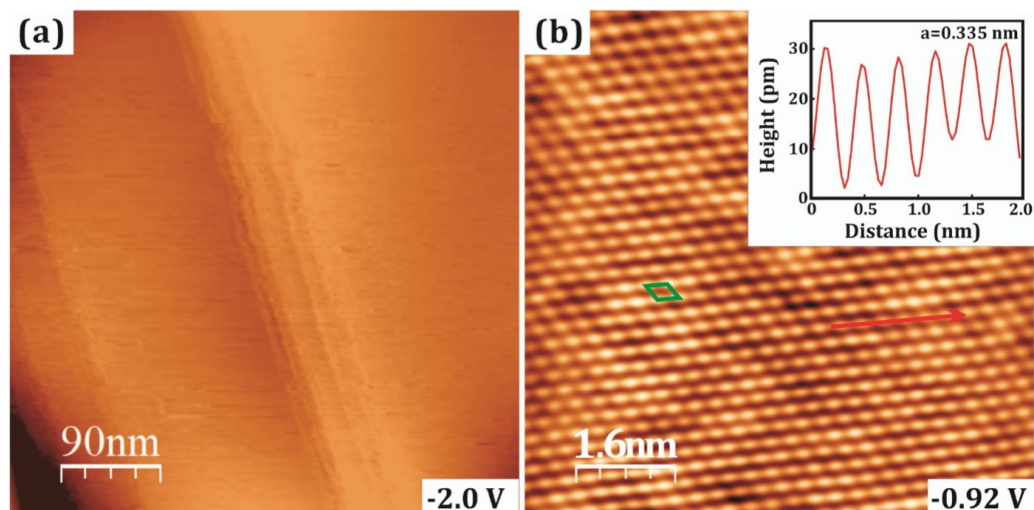
2.1.4 Тэмтрэх туннелийн микроскопын судалгаа

Тэмтрэх туннелийн микроскоп (ТТМ) нь гадаргууг координатын зайд атомын нягтралтайгаар дүрсэлдэг өндөр технологийн төхөөрөмж юм. Энэ микроскоп нь дээж ба тэмтрүүл хооронд үүссэн вакуум буюу потенциал саадыг нэвтрэн өнгөрөх квант туннелийн зарчимд үндэслэгддэг. Судалж буй дээж тэмтрүүл хоорондох зай хэдхэн ангестрем болж ойртоход дээж ба тэмтрүүлийн хоорондох вакуум буюу потенциал саадыг туннелийн электронууд нэвтрэн өнгөрч эхлэх буюу цахилгаан гүйдэл ажиглагдаж эхэлнэ. Дээжний гадаргуугийн зургийг авахын тулд ТТМ-ын тип ба дээжийн гадаргууд туннелийн гүйдэл үүсэх хүртэл ойртуулдаг ба үүний дараагаар зүүг байрлуулсан пьезохоолойн гулзайлтыг ашиглан атомын хэмжээний зураг авдаг. Бид WSe_2 болон $MoSe_2$ -ын цэвэр гадаргууг гарган авч ШУТИС-ийн «Гадаргуугийн судалгааны төв»-д байрлах 3×10^{10} Торр даралтад ажиллах «A home-built RT-STM» микроскоп ашиглав.

WSe_2 -ын цэвэр гадаргуу

Зураг 2.24a –д хэт өндөр вакуумын орчинд хуулалт хийж цэвэрлэсэн дээжний ТТМ –ын зургийг үзүүлэв. Зургаас дээжний гадаргуу дээр зуугаас хэдэн зуун нанометрийн өргөнтэй атомын хэмжээний гөлгөр террасууд (terraces) болон хэдэн атомын алхам (steps) бүхий цэвэр гадаргуу үүссэн харагдаж байна. Дээжний гадаргуу атомын түвшинд бохирдолтой байх боломжтой тул бид илүү өндөр нарийвчлалтай зураг сонгон авч гадаргууг атомын түвшинд бохирдолтой эсэхийг тодорхойлох боломжтой. Тиймээс энэхүү том террасуудаас өндөр нарийвчлалтай хэмжилт хийж гарган авсан атомын түвшний нарийвчлалтай, 8 нм –ийн хэмжээтэй, -0.92 В хүчдэлд авсан ТТМ-ийн зургийг 2.24b –р зурагт үзүүлэв. Зураг 2.24b –ээс үзвэл гадаргуу дээр маш сайн эрэмбэлэгдсэн селенийн атомуудын гексагональ бүтэц маш тод харагдаж байна. Мөн тус зураг дээрх тод толбо бүр нь гадаргуугийн хамгийн дээд үе дэх селенийн атомууд юм. Харин гадаргуу дээрх селенийн атомуудын хоорондох бүдэг толбо нь хамгийн дээд талын селенийн давхаргын доор орших вольфрамын атомууд юм. Зурагаас үзвэл дээжний гадарга дээр өөр төрлийн атомууд харагдахгүй байгаа нь дээжний гадаргуу атомын түвшинд маш сайн цэвэрлэгдсэн болох нь харагдаж байна. Одоо гадаргуу бохирдолгүй байгаа тул гадаргуугийн торын параметрыг тодорхойлъё. Үүний тулд

ногоон сумаар илэрхийлсэн таван атомын зайд татсан шугамын дагуу дүн шинжилгээ хийж үзэхэд нийт урт нь 1.665 нм байв. Үүнийг 2.24b –р зургийн дээд буланд тодруулан дүрслэв. Энэ урт нь таван атом хоорондын зай тул гадаргуу дээрх зэргэлдээ орших селенийн атомуудын хооронд зай буюу эгэл торын параметрыг нь олбол 0.333 нм-тэй тэнцүү байна. WSe_2 нь гексагональ бүтэцтэй бөгөөд онолын хувьд зэргэлдээ орших селенийн атомуудын хоорондох нь 0.3282 нм байдаг [55, 56]. Бидний хэмжилтийн үр дүн онолын утганаас 1.5%-иар их байна. Бидний судалгаанд торын параметр бага зэрэг зөрүүтэй гарсан нь хэмжилт хийсэн ТТМ –ынн пьезо хоолойн тохируулга болон ТТМ –ынн зураг авах үед зүүний шилжилтээс хамаарч өөрчлөгдсөнтэй холбоотой байж болзошгүй гэж таамаглаж байна. Зурагт селенийн атомуудын эгэл торыг нил ягаан өнгийн параллелограммаар тэмдэглэв.

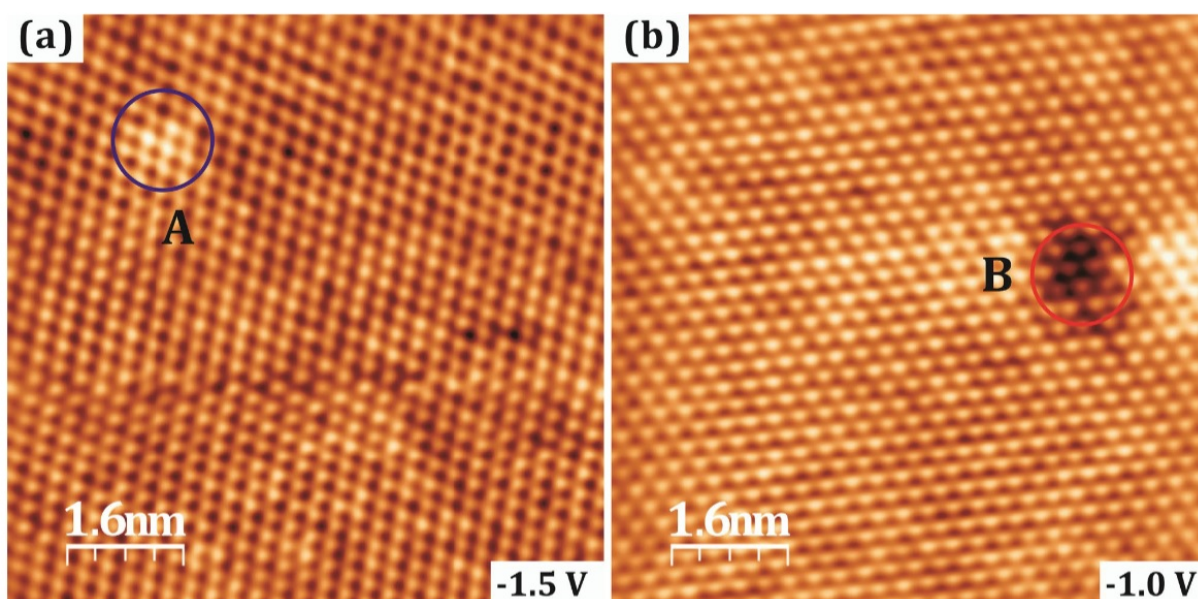


Зураг 2.24: WSe_2 -ын цэвэр гадаргуугийн ТТМ –ынн зураг. (a) WSe_2 -ын цэвэр гадаргуу дээрх стeп террасыг харуулсан том хэмжээтэй буюу 450 нм-ийн ТТМ –ынн зураг. (b) WSe_2 -ын цэвэр гадаргуугийн атомын түвшний нарийвчлал бүхий зураг. Зураг дээрх тод толбо нь гадаргуугийн селенийн атомууд болно. Мөн гадаргуугийн шугаман анализ хийсэн хэсгийг зураг дээр ногоон сумаар тэмдэглэв. Гадаргуугийн (1×1) эгэл торыг нил ягаан өнгийн параллелограммаар дүрслэв.

WSe_2 -ын гадаргуугийн цэгэн гажиг

Хоёр хэмжээст материалын гадаргууд хийсэн олон давталттай хэмжилтийн явцад WSe_2 -ын цэвэр гадаргуу дээр цагаан болон бараан өнгөтэй хоёр төрлийн цэгэн гажиг ажиглагдсан. Эдгээр нь шилжилтийн металлын дихалкогенуудын дан үед хамгийн

түгээмэл тохиолддог гажгууд юм. Гажиг орчимд авсан 8 нм хэмжээтэй ТТМ-ын зургуудыг Зураг 2.25 –д харуулав. Зураг 2.25а-д (-1.0В хүчдэлд авсан зураг) гадаргуугийн зарим селенийн атомууд нь бусдаасаа илүү бараантаж харагдаж байна. Харин -1.5В хүчдэлд авсан зургаас (Зураг 2.25b) харвал эсрэгээрээ гадаргуу дээрх селенийн атомууд нь илүү гэрэлтэй буюу цайр харагдаж байна. Дээрх зургуудад эдгээр гажиг орчмыг ногоон болон цэнхэр өнгийн тойргоор хүрээлж тодотгон тэмдэглэж “А” болон “В” гэж тэмдэглэв.

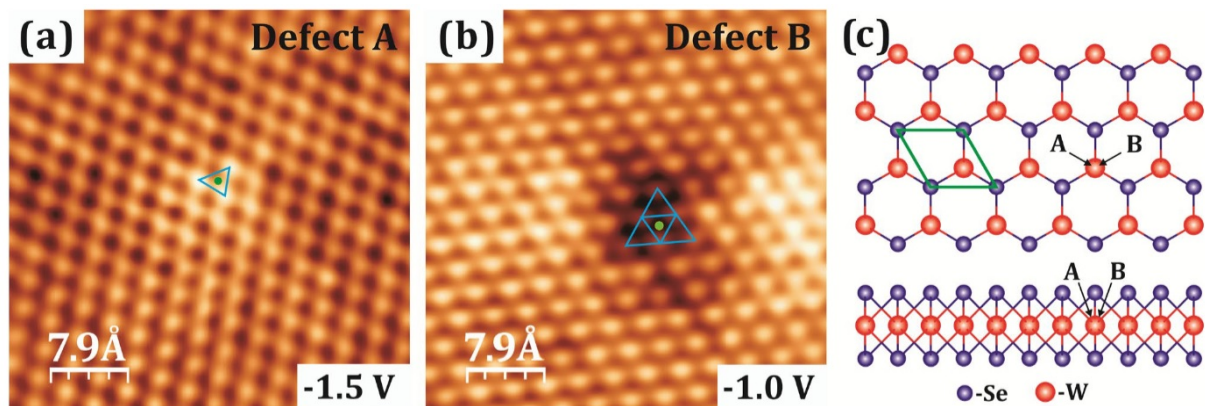


Зураг 2.25: WSe_2 -ын гадаргуугийн атомын түвшинд гарган авсан ТТМ-ын зураг. (а) ба (b) зурагт А болон В гэсэн гадаргуугийн хоёр цэгэн гажиг харагдаж байна. (а) Дээжний гадаргуугийн селенийн атомын доод үе дэх вольфрамын атомын байрлал дахь донор хольц атомын (W ваканс) үүсгэсэн гажиг. Зураг дээр гажиг байгаа хэсгийг ногоон өнгийн тойргоор тэмдэглэв. (b) Дээжний гадаргуугийн селенийн доод үе дэх вольфрамын атомын байрлал дахь аккцептор хольц атомын үүсгэсэн гажиг. Зураг дээр гажиг байгаа хэсгийг цэнхэр өнгийн тойргоор тэмдэглэв.

Зураг 2.26 –д туршилтаар ажиглагдсан цагаан болон бараан өнгөтэй хоёр гажгийн шинж чанар болон байршлыг нь тодорхойлохын тулд маш өндөр нарийвчлалттай буюу 4 нм-ийн хэмжээтэй авсан атомын түвшний ТТМ зургуудыг харуулав. Мөн гажгуудын талаар илүү тодорхой ойлголт авахын тулд WSe_2 –ын кристалл торыг дээрээс болон хажуугаас харуулсан атомын геометр загварчлалыг байгуулав (Зураг 2.26с). Өндөр нарийвчлалтай ТТМ –ын зургаас харвал “А” гажиг нь гадаргуугийн селенийн зургаан атомын хүрээг хамарсан гурвалжин хэлбэртэй бараан өнгийн хонхор байдалтай харагдах бөгөөд гажгийн байрлалыг нарийвчлан тодорхойлохын тулд

эдгээр зургаан атомуудыг холбосон том ба жижиг гурвалжингууд зуруулав. Эндээс гажгийн төвийг тооцоолход гадаргуугийн гурван селенийн атомуудын хооронд байна. Зураг дээр энэ төвийг ногоон өнгийн жижиг тойргоор тэмдэглэв. Зураг дээр илэрсэн гажгийн төвийг Зураг 2.26с –д харуулсан хажуугийн болон дээрээс харуулсан загвартай харьцуулбал “А” гажиг нь хамгийн дээд давхаргын селенийн атомуудын доор орших үед дэх вольфрамын атомын гажиг болох нь харагдаж байна. “А” гажгийн цэнэгийн түгэлт болон гажгийн байрлалаас харвал тус гажиг нь вольфрамын атомын ваканс эсвэл бусад донор атомын хольцтой холбоотой гажиг байх боломжтой. Бидний судалж буй материалтай төстэй хоёр хэмжээст шилжилтийн металлын дихалькогенид материалуудыг ТТМ болон бусад гадаргуугийн судалгааны багажуудаар судалсан ажлуудад үүнтэй төсөөтэй гажгууд ажиглагддаг бөгөөд эдгээрийг нарийвчлан судалсан ажлууд нилээд хийгдсэн байдаг [57]-[62].

Ч. Жан болон С.Ванг нарын судалгаанд бидний гаргасан үр дүнтэй төстэй гажиг ажиглагдсан ба бидний судалгаар ажиглагдсан “А” гажиг нь вольфрамын атом сугаран гарч зангилаа хоосон үлдсэн буюу вольфрамын ваканс эсвэл донор хольцын атомтай холбоотой гажиг болохыг баталсан байдаг [58].



Зураг 2.26: WSe_2 -ын гадаргуу дээрх гажгуудын нарийвчилсан зураг. (a) А гажгийн өндөр нарийвчлалтай авсан ТТМ –ын зураг. (b) В гажгийн өндөр нарийвчлалтай авсан ТТМ –ын зураг. Ногоон гурвалжингаар А ба В гажгийн ерөнхий хэлбэрийг дүрслэв. Гурвалжингуудын төв дэх цэгээр гажгийн байршлыг нарийвчлан харуулав. (c) WSe_2 –ын кристалл торыг дээрээс болон хажуугаас харуулсан атомын геометр загварчлал. Гажгуудын байрлалыг хар өнгийн сумаар тэмдэглэв. Мөн (1×1) эгэл торыг ногоон өнгөтэй параллелограммаар дүрслэн харуулав.

Харин өндөр нарийвчлалтай авсан ТТМ-ийн зургаас (Зураг 2.26b) харвал “В” гажиг нь гадаргуугийн селенийн гурван атомын хүрээг хамарсан гурвалжин хэлбэртэй

тод өнгийн цухуйж харагдаж байна. Энд гажгийн байрлалыг нарийвчлан тодорхойлохын тулд эдгээр селенийн гурван атомуудыг холбосон жижиг гурвалжин зуруулж гажгийн төвийг тодорхойлоход энэ гажиг нь гадаргуугийн гурван селенийн атомуудын хооронд байрласан байна. Энэ төвийг зураг дээр ногоон өнгийн жижиг тойргоор тэмдэглэв. Энэ ТТМ зургийг болон зураг дээр олдсон гажгийн төвийг Зураг 2.26с-д харуулсан хажуугаас болон дээрээс харуулсан загвартай харьцуулан судлавал “В” гажиг нь хамгийн дээд давхаргын селенийн атомуудын доор орших үед дэх вольфрамын атомын гажиг болох нь харагдаж байна. Дээрх хоёр гажгийг сөрөг хүчдэлд авсан зургаас илрүүлсэн байна. Сөрөг хүчдэлд электроны шилжилт дээжнээс зүүрүү чиглэдэг. Иймд гажгууд нь бараан болон цайвар харагдаж байгаа нь гажгуудийн цэнэгийн түгэлт өөр болохыг илтгэнэ. Иймд “В” гажгийн хувьд “А” гажигтай харьцуулбал цэнэгийн түгэлт нь эсрэгээрээ тодорч харагдаж байна. “В” гажгийн цэнэгийн түгэлт болон гажгийн байрлалыг авч үзвэл энэ гажиг нь бусад акцентор атомын хольцтой холбоотой гажиг хэмээн таамаглаж байна. Бидний судалж байгаа дээжтэй төстэй хоёр хэмжээст материалуудын ТТМ болон бусад судалгааны багажуудаар судалсан ажлуудад үүнтэй төсөөтэй гажгууд ажиглагдаж, нарийвчлан судлагдсан байдаг. Р.Аддоу болон Уоллес нарын судалгаанд бидний илрүүлсэнтэй ижил гажиг ажиглагдсан ба “В” гажгийн хувьд энэ нь гадаргуугийн селенийн атомуудын доор байрлах вольфрамын атомуудын үед орших вольфрамын атом хүчилтөрөгчийн атомаар солигдох үед эсвэл өөр акцентор атомуудаар солигдох үед гадаргуу дээр үүсдэг гажиг болохыг харж болно

Бүлэг 3

Хоёр хэмжээст материалын онолын ТООЦООЛОЛ

3.1 Онолын судалгааны аргууд

ШМДХ –ын электрон бүтцийг судлахын тулд олон – электронт системийн үндсэн төлөвийн энергийг тодорхойлох нягтын функционалын онолыг (НФО) ашиглана. Энэ онолд тухайн системийн үндсэн төлөвийн энергийг нарийвчлал сайтай тодорхойлохын тулд солилцоо – корреляцын энергийг ойролцоолон тооцоолдог. Дээрх зорилгоор локаль нягтын ойролцоолол (LDA-local density approximation) болон ерөнхийлсөн градиентын ойролцооллыг (GGA- generalized gradient approximation) ашигладаг [63]. НФО –оор Ван – дер – Ваальсын харилцан үйлчлэлийг тооцоохын тулд хагас – онолын дисперсийн термийг тооцдог [64]. ШМДХ-ийн гол төлөөлөгч болох MoS_2 –ын хувьд хүхрийн валентын электрон, молибдены валентын ба хагас гүний төлөвийн ($4s$ ба $4p$) электроныг тодорхой тооцоолохын тулд ультрасофт псевдопотенциалыг ашигладаг [65]. Электроны долгион функцийг хавтгай – долгионы базисаар тодорхойлсон ажлууд нилээд хийгддэг. Хориотой бүсийн энергийг тооцоолоход 300K цэгийг сонгодог ба ионы релаксацийн хүчийг 10^{-4}Рд/Бор , даралтыг 0.05 ГПа байхаар сонгож бодолтыг явуулдаг. Фононы давтамжийг нягтын функционалын хөндөлтийн онолоор тооцоолсон динамик матрицын диагоналаас олдог бөгөөд гол төлөв VASP, Quantum Espresso багц программыг ашигладаг [66].

“Нанохэмжээст вольфрам болон молибдений диселенид гарган авах судалгаа”

суурь судалгааны төслийн хоёр дахь чухал ажил бол эдгээр материалын талаарх онолын судалгаа явуулах явдал байв. Бид анх төсөл бичихдээ дээрх материалын үндсэн төлөвийн энергийг тооцоолж, кристалл бүтцийг загварчилна гэсэн төлөвлөгөөтэй байсан. Гэвч төсөл хэрэгжүүлэх явцад дээрх судалгааг дэлхийн олон судлаачид гүйцэтгэж нийтэд танилцуулсан тул энэ ажлыг дахин давтаж гүйцэтгэх нь төдийлэн үр өгөөжгүй байсан. Мөн бидний туршилтын ажлын хэсэг болох хоёр хэмжээст материалын гадаргуугийн АХМ болон СТМ-ын судалгаа хийгдэж дууссаны дараа тухайн материал дахь хольцын нөлөөгөөр гажиг үүсдэг тул хольцын нөлөө ямар байх талаар тооцоолол явуулах нь сонирхолтой байв.

MoSe_2 , WSe_2 нь MoS_2 -ын адил соронзон шинж чанаргүй материал юм. Молибдены дисульфидыг Mn, Fe, Co, Cr, Zn, Cd, Hg, V зэрэг шилжилтийн металлуудаар хольцолход ферросоронзон шинж чанартай болдог тухай онолын тооцооллын ажлууд нилээдгүй хийгдсэн байдаг [67]. Мирабелл нар химийн тунадасжуулалт, гидротермийн болон ионы имплантацийн аргаар MoS_2 -ыг Nb, Co, Mn болон зэсийн атомуудаар хольцолход атомын төрлөөс хамаарч материалын соронзон чанар нь эрс өөрчлөгддөг болохыг харуулжээ [68]. Гэвч хольцын концентрацаас хамаарч материалын соронзон шинж чанарт бий болох өөрчлөлтүүд нь харилцан адилгүй байна. Жишээлбэл, MoS_2 -ыг зэсээр хольцолход хольцын концентрац нэмэгдэхийн хирээр соронзон ханалт нэмэгдэж байсан ч энэ материалыг хромоор хольцолход дээрхийн эсрэг шинж чанар илэрсэн болно [69].

ШМДХ-ийг осмийн атомаар хольцолсон судалгааны ажил хараахан хийгдээгүй байна. Иймд бид түгээмэл судлагдсан материал болох MoS_2 -ийг осмийгоор хольцолж тооцооллыг гүйцэтгэн улмаар MoSe_2 , WSe_2 -ийн дан үеүдэд дээрх тооцооллыг давтаж явуулсан болно. Тооцооллын ажлыг хатуу биеийн физик болон материал судлалын салбарт түгээмэл ашиглагддаг VASP программаар гүйцэтгэсэн бөгөөд судалгааг БНСУ-ын Инчоны Үндэсний их сургуулийн тооцооллын төвд явуулсан болно.

3.2 Нягтын функционалын онол

Нягтын функционалын онол нь харилцан үйлчилж буй бөөмсүүдийн системийн чухал шинж чанаруудыг $\rho(\vec{r})$ электроны нягтаар илэрхийлэх боломжтой болохыг ха-

руулдаг. Энэхүү гурван хэмжээст скаляр функц нь үндсэн төлөв болон өдөөлтийн спектрийн талаарх бүх мэдээллийг агуулна. Температур тэг байх үед олон электронт системд ийм функционал байдаг гэдэг санааг анх Хоэнбэрг, Кон [70] нар өөрсдийн ажилдаа тусгасан бол Мермины [71] ажилд дурын температур бүхий системд Хоэнбэрг – Коны теоремыг баталж болохыг үзүүлсэн байна. Энэ ажилд дээрх функционалыг хэрхэн байгуулах аргыг тусгаагүй боловч Кон – Шэмийн [72] ажилд энэ талаар тодорхой тусгасан байна. Үүний дараагаас эхлэн нягтын функционалыг байгуулах улмаар олон электронтой системүүдэд тооцоо хийх ажлууд эрчимтэй хийгдэж эхэлсэн байна.

3.2.1 Хоэнбэрг – Коны теоремууд

Томас – Фермийн онол нь харилцан үйлчлэлцэж буй электроны хийн хувьд энергийн дундажийг зөвхөн нягтаар илэрхийлнэ гэсэн маш чухал шинж чанарыг үзүүлдэг ч олон электронт системийн энергийн функционал $E[\rho]$ -г илэрхийлэх (3.1) илэрхийлэл нь ерөнхий тохиолдолд ч хүчинтэй байх боломжтой:

$$E[\rho] = T[\rho] - \int \frac{Z}{r} \rho(\vec{r}) d\vec{r} + \frac{1}{2} \int \int \frac{\rho(\vec{r})\rho(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{r} d\vec{r}'. \quad (3.1)$$

Үүнд: $T[\rho]$ нь кинетик энергийн функционал болно. Хоёр дахь ба гурав дахь гишүүн нь цөм – электроны болон электрон – электроны харилцан үйлчлэлийн энергийн функционал болно:

$$E_{\text{э-э}} = \frac{1}{2} \int \int \frac{\rho(\vec{r})\rho(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{r} d\vec{r}'. \quad (3.2)$$

Хоэнбэрг – Коны теорем нь электроны нягт болон гадны орны потенциал, долгион функцийг харилцан хамаарлыг тодорхойлж чаддаг. Борн-Опшенгеймерын ойролцооллоор цөмийн орны потенциалыг статик гадны орны потенциал хэмээн тооцдог [73]. Гадны оронд оршихгүй атомуудын электроны хувьд $v_{\text{гад}}$ нь атомын цөмийн орон болно.

Теорем 1. Гадны потенциал оронд байгаа харилцан үйлчлэлцэж буй электронууд бүхий аливаа системд $v_{\text{гад}}(\vec{r})$ потенциал нь үндсэн төлөвийн электроны нягтаар нэгэн утгатайгаар тодорхойлогдоно.

Теорем 2. Гадны орны $v_{\text{гад}}(\vec{r})$ потенциалд тохирох электроны нягтын $E[\rho]$ универсал функционал олдоно. Гадны орны $v_{\text{гад}}(\vec{r})$ потенциалын тодорхой утганд $E[\rho]$ -ийн экстремум нь үндсэн төлөвийн электроны нягтад харгалзана.

Хоэнбэрг – Коны нэгдүгээр теорем ёсоор гадны потенциал ба электроны нягтын хамаарал нь харилцан нэгэн утгатай байна. Энд Хоэнбэрг – Коны энергийн функционал

$$E_{\text{ХК}}[\rho] = T[\rho] + E_{\text{э-э}}[\rho] + \int d\vec{r} v_{\text{гад}}(\vec{r}) \rho(\vec{r}) \quad (3.3)$$

буюу

$$E_{\text{ХК}}[\rho] = F_{\text{ХК}}[\rho] + \int d\vec{r} v_{\text{гад}}(\vec{r}) \rho(\vec{r}) \quad (3.4)$$

байна. Үүнд: $F_{\text{ХК}}[\rho] = T[\rho] + E_{\text{э-э}}[\rho]$ болно. $F_{\text{ХК}}[\rho]$ функционал системийн дотоод шинж чанар болох кинетик энерги, электронуудын харилцан үйлчлэлийн энергээр тодорхойлогддог.

Хоэнбэрг – Коны теоремыг үндсэн төлөвийн хэд хэдэн долгион функцтэй буюу мөхсөн системд авч үзэж болно. Үүний баталгааг Коны ажилд тусгасан байдаг [74]. Спины туйлшрал бүхий ферросоронзон материалд электроныг энэ аргаар дүрслэх нь маш чухал байдаг. Спинээрээ туйлширсан системийн хувьд ρ_{\uparrow} ба ρ_{\downarrow} нь харгалзан спин нь дээш болон доош чиглэсэн электроны нягт бүхий электронуудыг авч үздэг. Энэ тохиолдолд Хоэнбэрг – Коны теоремыг гадны орны потенциалыг ρ_{\uparrow} ба ρ_{\downarrow} -ийн хувьд цор ганц функц хэмээн өөрчилж болно. Энэ теоремыг хэт дамжуулагчийн тооцоонд ашиглах боломжтой.

Хоэнбэрг – Коны теоремыг цахилгаан болон соронзон гэсэн гадны оронд орших системд өргөн ашигладаг. Энэ үед вектор потенциалыг оруулна. Иймээс скаляр потенциал ба электроны нягт, вектор потенциал ба гүйдлийн хоорондын нэг утгатай хамаарлыг тогтоодог.

Хоэнбэрг – Коны теорем нь онцгой ач холбогдолтой боловч аливаа ажиглагдаж буй хэмжигдэхүүнийг тооцоолох практик арга нь тодорхой бус байдаг. Бид Хоэнбэрг – Коны функционалын хэлбэрийг харилцан үйлчлэлцээгүй хий болон Томас – Фермийн дөхөлтөөр дүрслэгддэг бөөмүүдийн системийн хувьд тодорхойлж чаддаг.

Кон – Шэм нарын нягтын функционалыг тооцох арга зам нээгдсэнээс хойш дээрх аргын практик хэрэглээ нь тодорхой болсон байна [72]. Энэ ажлын үндсэн санаа нь

хатуу биеийн системийн электрон бүтцийг амжилттай тооцоолох үндэс болдог. Хоэнбэрг – Коны теоремд зөвхөн харилцан үйлчлэлцэж байгаа электронуудын системийг авч үздэг тул:

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \sum_i \nabla_i^2 + v_{\text{гад}}(\vec{r}_i) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} \quad (3.5)$$

байна. Энэ тэгшитгэлийн эхний нэмэгдэхүүн нь электроны кинетик энерги, хоёр дахь нь гадны орны потенциал, сүүлийн хэсэг нь электронуудын харилцан үйлчлэлийг илэрхийлдэг. Кон – Шэм нар (3.5) илэрхийлэгдэх төвөгтэй системийн Гамильтонианыг нягтын функционал нь тодорхой бодогддог системээр сольж болох санааг дэвшүүлсэн байна. Тэд үндсэн төлөвийг сонгон авч улмаар үндсэн төлөвт харгалзах өдөөлтийн спектрийг электроны нягтаар илэрхийлж болохыг үзүүлсэн. Кон – Шэмийн дөхөлтийн үндэс нь дараах хоёр таамаглалд тулгуурладаг. Үүнд:

1. Үндсэн төлөвийн тодорхой электроны нягтыг туслах системийн чөлөөт бөөмсийн нягтаар солих боломжтой.
2. Гамильтонианыг кинетик энерги болон локаль потенциалгаас бүрдсэн байхаар сонгох ба локаль потенциал нь Кулоны харилцан үйлчлэл, $v_{\text{гад}}$ – гадны орны, $v_{\text{сол-к}}$ нь солилцоо – корреляцийн потенциалыг агуулдаг.

Энд локаль потенциал нь:

$$v_{\text{локаль}}(\vec{r}) = \int d\vec{r}' \frac{\rho(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} + v_{\text{гад}}(\vec{r}) + v_{\text{сол-к}}(\vec{r}) \quad (3.6)$$

гэж тодорхойлогдоно.

3.2.2 Хоэнбэрг – Коны вариацийн зарчим

Хоэнбэрг – Коны функционал болох (3.3) тэгшитгэлд (3.2) тэгшитгэлийг орлуулан бичвэл:

$$E_{\text{ХК}}[\rho] = T[\rho] + \frac{1}{2} \int \int d\vec{r} d\vec{r}' \frac{\rho(\vec{r})\rho(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} + \int d\vec{r} v_{\text{гад}}(\vec{r})\rho(\vec{r}) \quad (3.7)$$

хэлбэртэй бичих ба энд нэгдүгээр нэмэгдэхүүн $T[\rho]$ нь $\rho(r)$ нягттай электроны кинетик энергийн функционал болно. (3.7) тэгшитгэлээс нормчлолын нөхцлийг тооцон

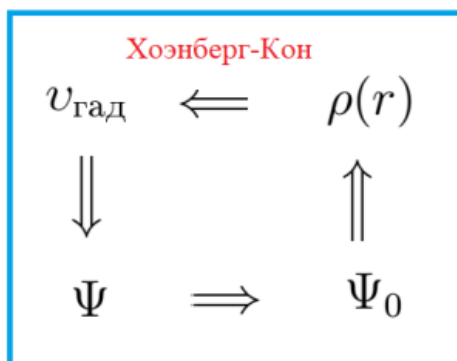
нягтаар вариаци авбал:

$$\frac{\delta T[\rho]}{\delta \rho} + \int d\vec{r}' \frac{\rho(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} + v_{\text{гад}}(\vec{r}) - \varepsilon = 0 \quad (3.8)$$

болох ба бөөмийн тоо хадгалагдахтай холбоотой $\varepsilon = \frac{\delta E_{\text{ХК}}}{\delta \rho}$ гэсэн Лагранжийн үржигдэхүүн оруулна. (3.8) тэгшитгэлийн хоёр ба гуравдугаар гишүүн нь (3.6) тэгшитгэлийн нэг болон хоёрдугаар гишүүнтэй ижил потенциал болох ба электрон хийн хувьд цөм – электроны харилцан үйлчлэлийг гадны орон гэж үзвэл $v_{\text{гад}}(\vec{r}) = -\frac{Z}{r}$ болно. Вариацилаж буй функц нь $\langle \Psi | \Psi \rangle = 1$ нөхцлөөр нормчлогдох үед вариацийн зарчмаар Шредингерийн тэгшитгэлийг дараах функционалаас гаргадаг:

$$E[\Psi] = \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle. \quad (3.9)$$

Зураг 3.1 –д Хоэнберг –Коны теоремын схемг харуулав. Хоэнберг – Коны теоре-



Зураг 3.1: Хоэнберг –Коны теоремын схем

моор үндсэн төлөвийн долгион функц нь электроны нягттай холбоотой учир зураг дахь сумнууд нь Шредингерийн тэгшитгэлийн шийдийг заана. Энд: $v_{\text{гад}}$ нь гадны орны потенциал, Ψ нь анхны сонгож авсан долгион функц, Ψ_0 – үндсэн төлөвийн долгион функц, $\rho(r)$ нь үндсэн төлөвийн нягт болно. Эдгээр нь системийн бүх төлөвийг тодорхойлно. Зураг дээрх үндсэн төлөвийн нягт $\rho(r)$ -оос $v_{\text{гад}}$ потенциал руу чиглэсэн сум нь Хоэнберг –Коны теоремыг тодорхойлно.

Иймээс вариацилах явцыг хоёр үе шатанд хуваах хэрэгтэй. Эхний шатанд Ψ функц

нь ρ нягттай холбоотой тул функционалаас долгион функцээр вариаци авбал

$$E[\rho] = \min_{\psi} \langle \Psi[\rho] | \hat{H} | \Psi[\rho] \rangle \quad (3.10)$$

болно. Хоёр дах шатанд $E[\rho]$ -ийг ρ -ээр вариацилан үндсэн төлөвт харгалзах нягтаар илэрхийлэгдсэн Кон – Шэмийн функционалыг гаргана.

3.2.3 Кон – Шэмийн тэгшитгэл

Одоо Кон – Шэмийн тэгшитгэлийг гаргая. Үүний тулд дээр дурдсан теоремыг тооцон дундаж энергийн функционалыг

$$\begin{aligned} E[\rho] &= T[\rho] + E_{\text{э-э}}[\rho] + \int d\vec{r} v_{\text{гад}}(\vec{r}) \rho(\vec{r}) = \\ &= T_s[\rho] + E_X[\rho] + \int d\vec{r} v_{\text{гад}}(\vec{r}) \rho(\vec{r}) + (T[\rho] - T_s[\rho] + E_{\text{э-э}}[\rho] - E_X[\rho]) \end{aligned} \quad (3.11)$$

хэлбэртэй бичнэ. Сүүлийн хаалтан дахь нэмэгдэхүүнийг солилцоо – корреляцийн энерги гэвэл энэ нь

$$E_{\text{сол-к}}[\rho] = (T[\rho] - T_s[\rho]) + (E_{\text{э-э}}[\rho] - E_X[\rho]) \quad (3.12)$$

болно. (3.12) илэрхийлэл нь хоёр ялгаврын нийлбэр бөгөөд харилцан үйлчлэлцэж буй $T[\rho]$ болон чөлөөт электронуудын кинетик энерги $T_s[\rho]$ – ийн ялгавар, хоёр дахь нь электрон – электроны харилцан үйлчлэл $E_{\text{э-э}}[\rho]$ болон Хартрийн энерги $E_X[\rho]$ – ийн ялгавар болно. Кон – Шэмийн эффектив функционалыг тодорхой тооцоог хийхийн тулд дараах хэлбэртэй бичиж болно:

$$E_{\text{КШ}}[\rho] = T_s[\rho] + E_X[\rho] + \int d\vec{r} v_{\text{гад}}(\vec{r}) \rho(\vec{r}) + E_{\text{сол-к}}[\rho]. \quad (3.13)$$

(3.13) тэгшитгэлээс долгион функцээр вариаци авбал

$$\frac{\delta E_{\text{КШ}}}{\delta \psi_{i\sigma}^*(r)} = \frac{\delta T_s}{\delta \psi_{i\sigma}^*(r)} + \left[\frac{\delta E_X}{\delta \rho(r)} + \frac{\delta E_{\text{гад}}}{\delta \rho(r)} + \frac{\delta E_{\text{сол-к}}}{\delta \rho(r)} \right] \frac{\delta \rho(r)}{\delta \psi_{i\sigma}^*(r)} = 0, \quad (3.14)$$

$$\frac{\delta T_S}{\delta \psi_{i\sigma}^*(r)} = -\frac{1}{2} \nabla^2 \psi_{i\sigma}(r), \quad \frac{\delta \rho(r)}{\delta \psi_{i\sigma}^*(r)} = \psi_{i\sigma}(r). \quad (3.15)$$

Нормчлолыг тооцсон Лагранжийн үржүүлэгч $\varepsilon_{i\sigma}$ -г нэмж тооцон Кон – Шэмийн тэгшитгэлийг дараах байдлаар бичих боломжтой:

$$\left(-\frac{1}{2} \nabla^2 + v_{\text{КШ}}(\vec{r}) \right) \psi_{i\sigma}(\vec{r}) = \varepsilon_{i\sigma} \psi_{i\sigma}(\vec{r}). \quad (3.16)$$

Энд: $v_{\text{КШ}}(\vec{r})$ нь Кон – Шэмийн эффектив потенциал ба

$$v_{\text{КШ}}(\vec{r}) = v_{\text{Х}}(\vec{r}) + v_{\text{сол-к}}(\vec{r}) + v_{\text{гад}}(\vec{r}), \quad (3.17)$$

$$v_{\text{Х}}(\vec{r}) = \int d\vec{r}' \frac{\rho(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|}, \quad (3.18)$$

$$v_{\text{сол-к}}(\vec{r}) = \frac{\delta E_{\text{сол-к}}}{\delta \rho(r)}, \quad (3.19)$$

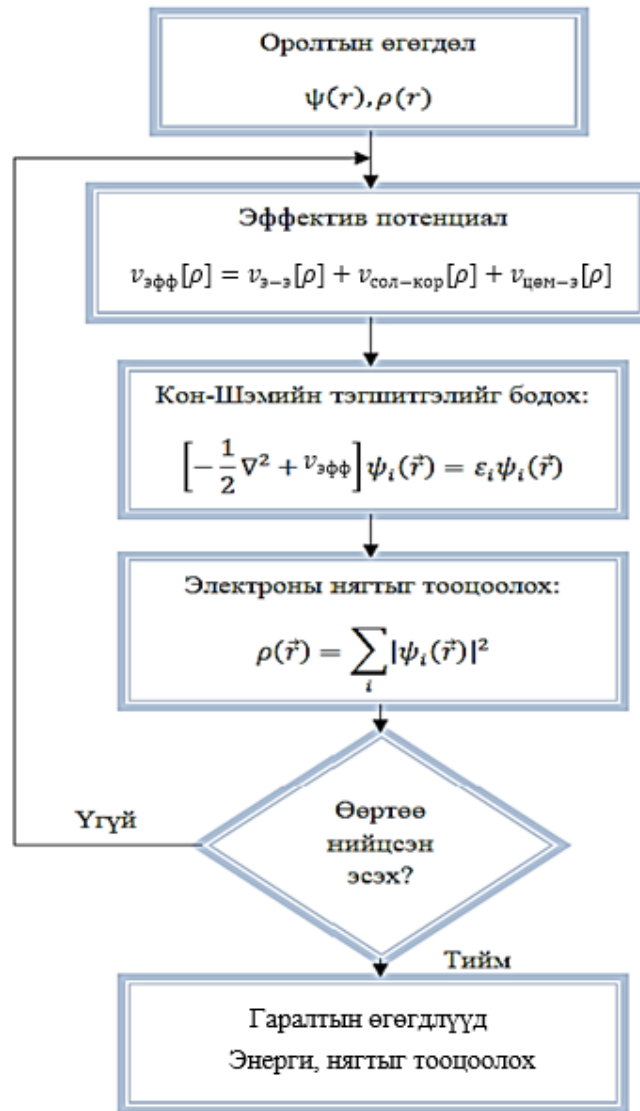
$$\rho(\vec{r}) = \sum_{i\sigma} |\psi_{i\sigma}(\vec{r})|^2 \quad (3.20)$$

болно.

Кон-Шэмийн тэгшитгэлийг 3.2 –р зурагт үзүүлсэн схемийн дагуу бодно. Үүний тулд электроны анхны нягтыг өгнө. Энэ нягтаар өөртөө нийцсэн потенциалыг тооцоолж, Кон-Шэмийн тэгшитгэлийг бодно. Энэ тэгшитгэлийн шийдээс электроны шинэ нягт олддоно. Бодолт нийлэх хүртэл энэ процедурыг давтан явуулах бөгөөд бодолт нийлэхэд олдсон нягтын утгыг ашиглан энергийг тооцоолно.

(3.16) тэгшитгэлийг нэг бөөмийн **Кон – Шэмийн тэгшитгэл** гэдэг[75]. $v_{\text{Х}}$ – Хартрийн потенциал, $v_{\text{сол-к}}$ – солилцоо – корреляцийн потенциалууд болно. (3.18) – Хартрийн интегралийн доторх $\frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|}$ илэрхийлэлийг бөмбөлөг долгион функцээр дараах байдлаар задалдаг[75].

$$\frac{1}{|\vec{r} - \vec{r}'|} = 4\pi \sum_{l'', m''} \frac{1}{2l'' + 1} Y_{l'' m''}^*(\Omega) Y_{l'' m''}(\Omega') \frac{r_{<}^{l''}}{r_{>}^{l''+1}}, \quad (3.21)$$



Зураг 3.2: Кон-Шэмийн тэгшитгэлийг бодох схем зураг

(3.21) илэрхийллийг (3.18) томъёонд орлуулбал:

$$v_X(\vec{r}) = 4\pi \int \rho(\vec{r}') r'^2 dr' \frac{r'^{l''}}{r'^{l''+1}} \sum_{l'' m''} \frac{1}{2l'' + 1} \int Y_{l'' m''}^* \Omega Y_{l'' m''}(\Omega') d\Omega' \quad (3.22)$$

болно. Бөмбөлөг долгион функцийг ортогоналийн нөхцөл:

$$\int Y_{lm}^* Y_{l'm'} d\Omega = \frac{\delta_{ll'} \delta_{mm'}}{4\pi} \quad (3.23)$$

Эндээс (3.22) тэгшитгэл нь дараах байдалтай бичигдэнэ.

$$v_X(\vec{r}) = 4\pi \int \rho(\vec{r}') \frac{r'^{l''}}{r'^{l''+1}} r'^2 dr' \quad (3.24)$$

$l'' = 0$ үед (3.24) томъёо:

$$v_X(\vec{r}) = 4\pi \left[\frac{1}{r} \int_0^r \rho(\vec{r}') r'^2 dr' + \int_r^\infty \rho(\vec{r}') r' dr' \right]. \quad (3.25)$$

(3.25) томъёоны эхний гишүүн r' электрон r электроны дотор талд, 2 дахь гишүүн нь r' электрон r электроны гадна байх тохиолдлууд болгон нийлбэрээр бичигдсэн. Энэ нь өөртөө нийцсэн потенциал оронд хөдөлж буй бөөмийн хувьд бичсэн нэг бөөмийн Шредингерийн тэгшитгэлийн хэлбэртэй ижил байна. Энэ нь Хартрий – Фокын тэгшитгэлээс ялгаатай нь солилцоо – корреляцийн потенциалыг нэгтгэж оруулж ирснээрээ онцлог юм. Хэрэв бид солилцоо – корреляцийн энергийн тодорхой илэрхийллийг мэдэж байсан бол олон электроны үйлчлэлийг тодорхойлох аргыг мэдэх байсан. Иймд солилцоо корреляц нь уг онолын маш чухал хэсэг болно.

3.2.4 Локаль нягтын ойролцоолол

Кинетик энергийн функционалыг Хак нар [76] градиентын илэрхийлэл ашиглан локаль нягтын ойролцооллоор тодорхойлсон байдаг. Үүнийг бөмбөлөг тэгш хэмтэй нягтаар дараах байдлаар бичнэ:

$$T[\rho] = C_k \int d\vec{r} \rho(\vec{r})^{5/3} + C \int d\vec{r} \rho(\vec{r})/r^2. \quad (3.26)$$

Энд: $C_k = \frac{3}{10}(3\pi^2)^{2/3}$, C нь хагас туршлагын тогтмол бөгөөд $C = 0.025$ байдаг. Энэ функционал нь Хартри – Фокын нягтаар тооцсон атомын бүрэн кинетик энергийг сайн тодорхойлдог бөгөөд тооллын эх дээр функционалын уламжлал нь сингуляр байдаг. Иймд энэхүү функционалын илэрхийллийг дараах байдлаар хувиргаж бичнэ:

$$T[\rho] = C_k \int d\vec{r} \rho(\vec{r})^{5/3} + \beta \int d\vec{r} \{\rho^{4/3}/r\} / \{1 + r\rho^{1/3}/\alpha_k\}. \quad (3.27)$$

(3.27) илэрхийллийг спин - туйлширсан байдлаар бичвэл

$$T[\rho_\alpha, \rho_\beta] = 2^{2/3} C_k \Sigma_\sigma \int d\vec{r} \rho_\sigma^{5/3} + 2^{2/3} \beta \Sigma_\sigma \int d\vec{r} \{ \rho_\sigma^{4/3} / r \} / \{ 1 + r(2\rho_\sigma)^{1/3} / \alpha_k \} \quad (3.28)$$

болох бөгөөд β нь кинетик энергийн функционал дахь C_k гэж үзээд α_k -г Хартри – Фокын үр дүнтэй харьцуулсан хагас туршлагаар 0.043 гэж гаргадаг [76].

Беке нар нь [77] хагас туршлагаар солилцооны энергийн функционалыг

$$E_{\text{сол}}[\rho] = -C_x \int d\vec{r} \rho(\vec{r})^{4/3} - \beta \int d\vec{r} \{ |\nabla \rho(\vec{r})|^2 / \rho(\vec{r})^{4/3} \} [1 + \gamma |\nabla \rho(\vec{r})|^2 / \rho(\vec{r})^{8/3}]^{-1} \quad (3.29)$$

гэж тодорхойлсон бөгөөд энэ нь харгалзах солилцооны потенциалд нийлдэг.

Мөн энэ илэрхийллээс гаргаж авсан β , γ параметруудыг сайн тохируулснаар солилцооны энерги нь Хартри – Фокын утгуудтай ойролцоо гардаг [77].

Градиентгүй солилцооны энергийн функционал нь

$$E_{\text{сол}}[\rho] = -C_x \int d\vec{r} \rho(\vec{r})^{4/3} - \beta \int d\vec{r} \{ \rho(\vec{r})^{4/3} \} / \{ 1 + r^2 \rho(\vec{r})^{2/3} / \alpha_x \} \quad (3.30)$$

байдаг. (3.30) илэрхийллийг спин - туйлширсан байдлаар бичвэл

$$E_{\text{сол}}[\rho_\alpha, \rho_\beta] = -2^{1/3} C_x \Sigma_\sigma \int d\vec{r} \rho_\sigma^{4/3} - 2^{1/3} C_x \Sigma_\sigma \int d\vec{r} \{ \rho_\sigma^{4/3} \} / \{ 1 + r^2 (2\rho_\sigma)^{2/3} / \alpha_x \} \quad (3.31)$$

болно. Энд $\beta = C_x$ ба $C_x = \frac{3}{4} (\frac{3}{\pi})^{1/3}$, $\alpha_x = 0.0244$ байна [77].

Кон – Шэмийн онол нь Кон – Шэмийн функционалыг нягтаар илэрхийлэх боломжийг харуулах төсөөлөл төдий математик ойлголт гэж үзэж байсан.

Солилцоо – корреляцийн энергийг ойролцооллыг зөв ойролцоолж олсноор Кон – Шэмийн онолыг практикт хэрэглэх нөхцөл бүрдэнэ. Эдгээр ойролцооллын хамгийн хялбар нь локаль нягтын ойролцоолол юм.

Локаль нягтын ойролцоололд (Local density approximation) солилцоо – корреляцийн энергийг

$$E_{\text{сол-к}}^{LDA} = \int d\vec{r} v_{\text{сол-к}}(\rho) \quad (3.32)$$

гэж тодорхойлох ба энд $v_{\text{сол-к}}(\rho)$ нь нэгэн төрлийн электрон хийн нэг бөөмд ноогдох солилцоо – корреляцийн энерги болно. Нэгэн төрлийн электрон хийн солилцооны

энергийг атомын нэгжээр

$$v_{\text{сол}}(\rho) = -0.458/r_s(\rho) \quad (3.33)$$

гэж тооцоолсон [78]. Энд r_s нь нэг электроны бөмбөлөг үүлний радиус, $v_{\text{сол}}$ солилцооны потенциал.

Дээрх илэрхийллийг Монте – Карлогийн аргаар шууд тооцоолсон байдаг. Энэ ажилд [79] N ширхэг электрон V эзэлхүүнтэй огторгуйд байна гэж үзвэл электроны нягт $\rho = \frac{N}{V}$ хэмээн тодорхойлогдох ба электрон бүр нь r_s радиустай бөмбөрцөг үүл үүсгэнэ хэмээн тооцжээ. Бөмбөрцөг үүлний радиусыг

$$r_s(\rho) = \left(\frac{3}{4\pi\rho} \right)^{1/3} \quad (3.34)$$

гэж тодорхойлох ба солилцооны энерги нь электроны нягтаас шууд хамаарна. Нэгэн төрлийн хийн корреляцийн энергийг анх Е.П.Вигнер

$$v_{\text{к}}(\rho) = -\frac{0.44}{r_s(\rho) + 7.8} \quad (3.35)$$

хэмээн тодорхойлсон байна [78]. Дээрхийг нэгтгэн ямар ч нягтад тохирох $v_{\text{сол-к}}$ солилцоо – корреляцийн потенциалыг

$$v_{\text{сол-к}}(\rho) = -\frac{1.222}{r_s(\rho)} - 0.066 \ln \left(1 + \frac{11.4}{r_s(\rho)} \right) \quad (3.36)$$

хэлбэртэй тодорхойлох интерполяцийн томъёог олсон байна [79, 80]. Энэ илэрхийллийг тоон аргаар тооцоолсон нь $\pm 1\%$ нарийвчлалтай таарч байсан. Локаль нягтын дөхөлтийн аргыг сайжруулж, өргөжүүлсэн олон ажлууд байдаг:

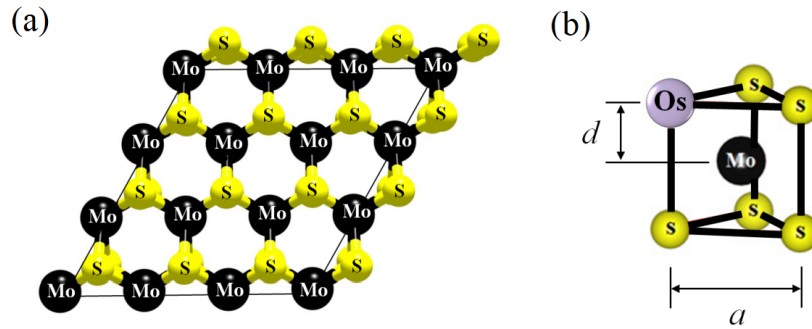
1. Солилцоо – корреляцийн нүхийг тооцож электроны нягтыг илүү нарийвчлалтай тооцсон солилцоо – корреляцийн энергийн илэрхийллийг гарган авсан.
2. Электроны нягтын жигд биш түгэлт буюу өргөтгөсөн градиентын ойролцооллыг (Generalized Gradient Approximation) цуваанд задлах аргыг боловсруулсан. Энэ аргад солилцоо – корреляцийн энергийг локаль нягтын градиентын (Local density approximation) зэргээр задалдаг.

$$E_{\text{сол-к}}^{GGA} = E_{\text{сол-к}}^{LDA} + \int d\vec{r} f\left(\rho(\vec{r}), |\nabla\rho(\vec{r})|\right) \rho(\vec{r}) \quad (3.37)$$

Энд: $f(\rho(\vec{r}), |\nabla\rho(\vec{r})|)$ -ойролцоолон гарган авсан функц болно.

3.3 Тооцооллын процедур

НФО болон НФХО-ын тооцооллыг параллель тооцооллын Vienna ab initio simulation package (VASP) 4.5.5 хувилбарыг ашиглан гүйцэтгэсэн [81]. Энд: Пердью, Бурке, Эрнзерхоф (PBE - Perdew, Burke, and Ernzerhof) -ын параметрчилсан ерөнхийлсэн градиентын ойролцооллыг ашиглан солилцоо-корреляцийн функционалыг тодорхойлсон [63].



Зураг 3.3: (а) MoS_2 дан үеийн 3×3 суперторын бүтэц. Том хар болон жижиг шар өнгийн бөмбөлгүүд нь Mo ба S атомуудыг илэрхийлнэ. (b) Хүхрийн нэг атомын ваканс дээр осмийн атом суусан болохыг харуулсан схем диаграмм.

Зураг 3.3 –д MoS_2 –ын 3×3 суперторын бүтцийг үзүүлэв. Бид тооцооллоо явуулахын өмнө загвараа байгуулсан. Энэ загварт MoS_2 –ын 3×3 супертор бүхий дан үеийн зангилааны нэг хүхрийн атомын ваканс дээр дан Os атомыг суулгасан. Үүнийг 3.3 –р зургаас харж болно. Ийм төрлийн гажиг MoS_2 -ын дан үеийн гадарга дээр үүсдэг төдийгүй гадны хольц атомууд нь хүхрийн атомын ваканс дээр суудаг болохыг харуулсан судалгааны ажлууд нилээдгүй хийгдсэн байдаг. Энд молибдены дисульфидын дан үеийг ургуулах явцад хүхрийн ваканс үүсдэг болохыг Жоу, Ли нар баталсан байна [82, 83]. Бид тооцооллын өртгийг хэмнэх зорилгоор тооцоолол хийх торын хэмжээгээ төрөл бүрээр сонгож туршсан. Үүнд: 5×5 , 4×4 ба 3×3 тооцооллыг явуулхад тооцооллын үр дүн ижил байсан тул 3×3 хэмжээтэй торыг сонгож цаашдын бодолтыг явуулсан. Энергийн тайралтыг 500 эВ, $11 \times 11 \times 11$ k -цэг бүхий зангилаа сонгож,

10^{-2} эВ/Å хүчээр үйлчилсэн. Соронзон кристаллын анизотропын (СКА) энергийг тооцохдоо соронзжилтын чиглэлийг xy хавтгайн дагуу (E^{\parallel}) ба z тэнхлэгийн дагуу (E^{\perp}) гэж сонгож дээрх чиглэлд ноогдох энергийн зөрүүгээр тодорхойлсон:

$$E_{\text{СКА}} = E^{\parallel} - E^{\perp}. \quad (3.38)$$

$E_{\text{СКА}}$ энергийн тооцоог сайн нийлүүлэх зорилгоор k -цэгийн зангилааны тоог нэмэгдүүлж $11 \times 11 \times 11$ байхаар сонгосон. Валентын төлөвийн скаляр релатив тооцооллыг гүйцэтгэхэд spin orbital coupling (SOC) буюу спин-орбитын хос (COX) гэсэн ойлголтыг оруулж ирсэн [84]. Фононы дисперс болон термодинамик шинж чанарыг тооцоолоход НФХО-д [85] PHONONУ код ашигласан [86]. Фононы тооцоололд 3×3 супертор, хүчний тогтмол матрицын интерполяц хийхэд $3 \times 3 \times 3$ k -цэгийн зангилаа сонгосон.

3.4 Тооцооллын үр дүн

3.4.1 MoS₂

Хоёр хэмжээст материал нь суурин дээр бэхлэгдсэн байх тул MoS₂ болон суурины торын үл нийцлээс хамаарч хоёр тэнхлэгийн дагуух деформац хамгийн ихдээ 2.5% байхыг зөвшөөрдөг [87]-[90]. Бид юуны өмнө MoS₂ –ын дан үед осмийн атом суулгаж (Os/MoS₂) хоёр тэнхлэгийн дагууд деформацад оруулах байдлаар бүтцийн болон термодинамик тогтворжилтыг шалгасан болно. Үүний дараа MoS₂ –ын хоёр хэмжээст торонд $\pm 4\%$ -ийн шахах болон сунгах деформац (η) олгосон. Энд: $\eta = \left[\frac{a_{\parallel} - a_{\perp}}{a_0} \right] \times 100\%$ ба a_{\parallel} , a_0 нь хувьсах болон тэнцвэрт торын тогтмолууд юм. MoS₂ –ын торын тогтмолыг тооцоолход 3.18 \AA гэж олдсон нь туршилтын утгатай (3.15 \AA) ойролцоо байна [91]. Харин Os суусан хүхрийн тал дээр торын тогтмол бараг өөрчлөгдөөгүй байна. Os атом нь молибдены хавтгайгаас алслагдах $h = 1.80 \text{ \AA}$ зайд суусан ч энэ утга нь деформац бүрийн хувьд ялгаатай байсан. Жишээлбэл, $\eta = -\pm 4\%$ үед энэ нь 1.95 \AA болж нэмэгдсэн бол $\eta = \pm 4\%$ үед энэ нь 1.64 \AA болж буурсан байна.

Энэ үед Гельмгольцын чөлөөт энергийг

$$F(T, V) = F_0 + F_{эл} + F_{хэл} + F_{маг}. \quad (3.39)$$

хэлбэртэй бичиж болно. Энд: F_0 - тэг температурын системийн нийт энерги, $F_{эл}$, $F_{хэл}$, $F_{маг}$ нь чөлөөт энергийн электроны, хэлбэлзлийн болон магноны хандив болно. Чөлөөт энергийн өөрчлөлт нь термодинамик талаасаа фазын тогтворжилтыг

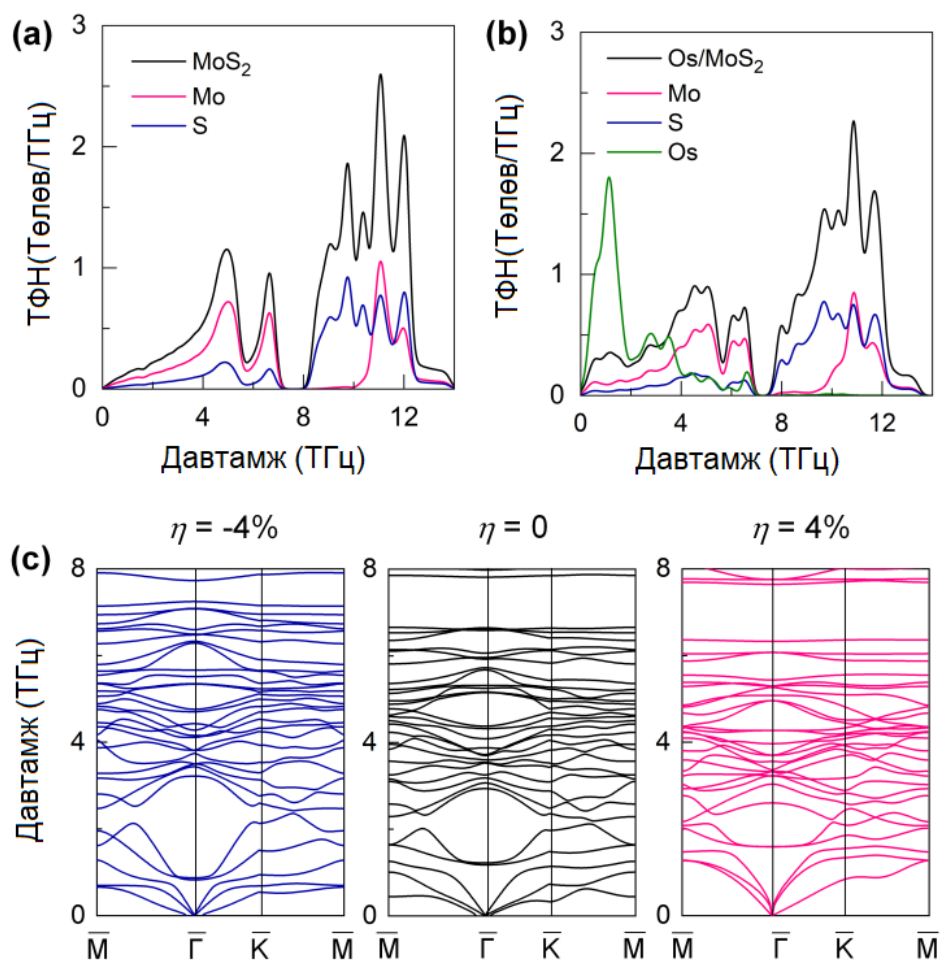
$$\Delta F(T, V) = F(T, V) - \sum_i N_i F_i(T, V) \quad (3.40)$$

тодорхойлох бөгөөд энэ нь тухайн фаз задрах явцыг эсэргүүцэх чадвар болно [92, 93]. (3.40) тэгшитгэл дэх $F(T, V)$ - системийн чөлөөт энерги, $F_i(T, V)$, N_i нь тус тус чөлөөт энерги ба i гэсэн задрах бүрэлдэхүүн хэсгийн тоо болно. MoS_2 -ын хувьд Mo ба S_2 молекулыг задардаг фазууд гэж үздэг. Харин Os/MoS_2 -ын хувьд (балк-Os)+(балк-Mo)+ S_2 гэсэн задардаг фазуудыг авч үзнэ.

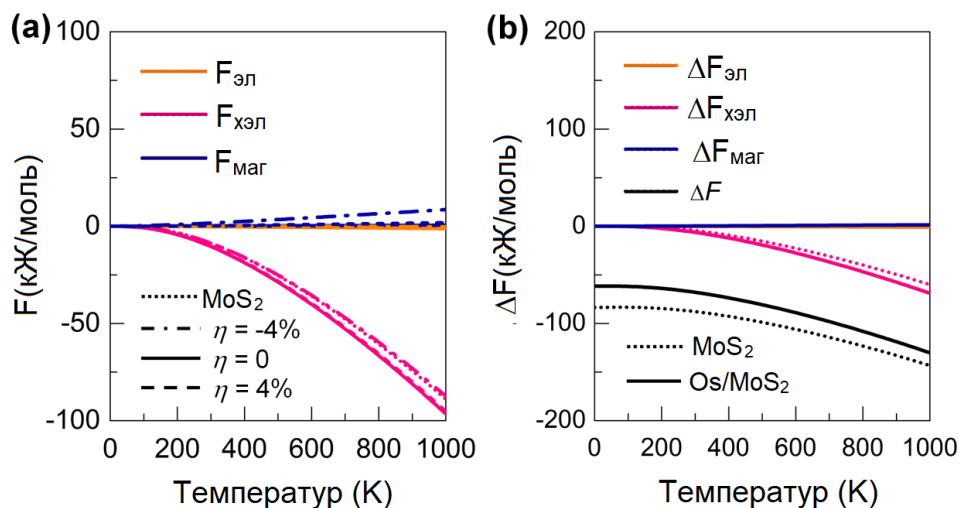
Сонгон авсан системийн термодинамик шинж чанарыг тодорхойлохын тулд осми агуулаагүй (Зураг 3.4a) болон агуулсан Os/MoS_2 бүтцийн төлөвийн фононы нягтыг (ТФН) тооцоолж графикийг байгуулсан (Зураг 3.4b). Зурагт үзүүлсэн ТФН-ын график нь туршилтын үр дүнтэй сайн тохирсон байна [91]. Энд MoS_2 ба Os/MoS_2 -ын хувьд хуурмаг давтамжийн моод ажиглагдаагүй тул дээрх бүтэц нь динамикийн хувьд тогтвортой болох нь харагдаж байна.

Зураг 3.4c-д $\eta = -4, 0, 4\%$ -ийн деформацтай үеийн Os/MoS_2 -ын акустик давтамжийн моодын фононы дисперсийн муруйг үзүүлэв. Деформацад ороогүй болон орсон ШМДХ-ийн дан үеийн фононы дисперсийн судалгаа түгээмэл хийгдсэн байдаг [93]-[95] тул бид термодинамик тогтворжилтын талаар судласан болно. Зураг 3.4c-ээс үзвэл материалд шахах хүчдэл олгоход илүү дисперсит чанар илэрч байгаа бол сунгах хүчдэл үйлчлэхэд шугаман шинж чанартай болж байна. Үүний улмаас шахах хүчдэлээс сунгах хүчдэлд шилжих үед оптик болон акустик фононы давтамжийн моодын хоорондын зааг нэмэгдэж байна. Энэ шинж чанарыг графен болон WS_2 -ын дан үед хийсэн бусад судлаачдын тооцооллын үр дүнгээс харах боломжтой.

Зураг 3.5a -д $\eta = -4, 04\%$ -ийн деформацад орсон MoS_2 ба Os/MoS_2 бүтцийн



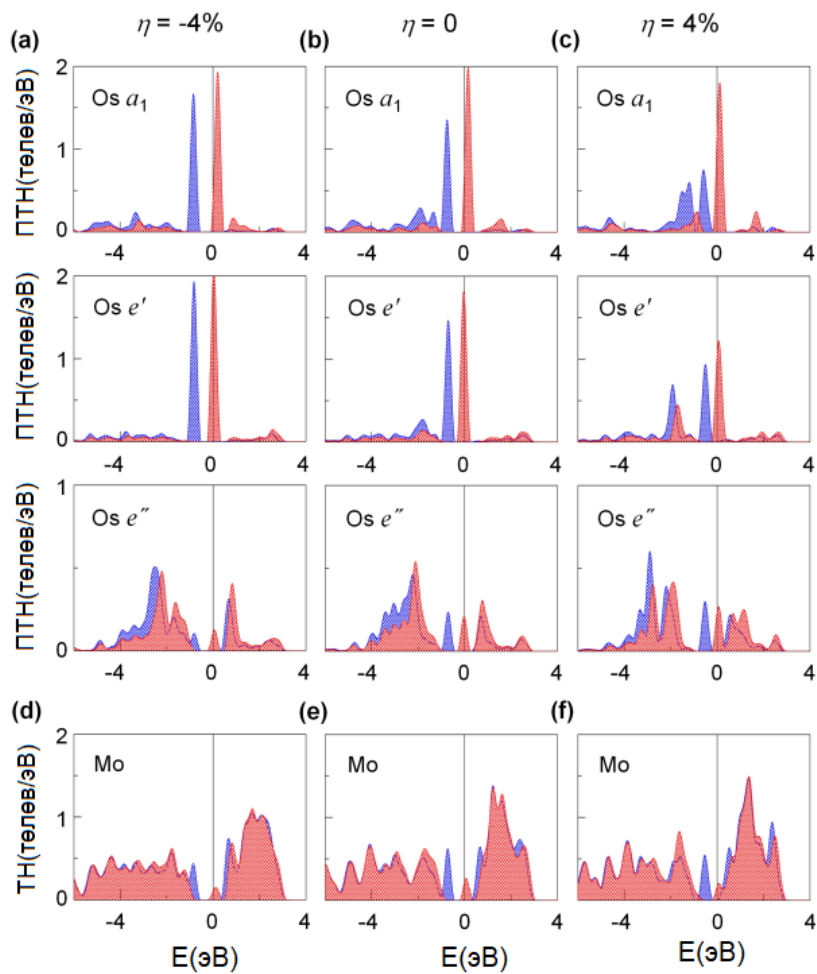
Зураг 3.4: (a) Os атомгүй болон (b) Os атом бүхий MoS_2 дан үеийн төлөвийн фононы нягт (ТФН). (c) $\eta = -4\%$ (зүүн талын), $\eta = 0$ (дунд талын) ба $\eta = 4\%$ (баруун талын) үед Os/MoS_2 -ын фононы давтамжийн дисперсийн муруй.



Зураг 3.5: (а) $\eta = -4\%$ (цэгтэй тасархай шугам), $\eta = 0$ (үргэлжилсэн шугам) ба $\eta = 4\%$ (тасархай шугам) үед Os атомгүй (цэгэн шугам) болон Os атом бүхий MoS₂ дан үеийн электроны, хэлбэлзлийн болон магны чөлөөт энергийн температураас хамаарах хамаарал. (b) Os атомгүй (цэгэн шугам) болон Os атом бүхий (үргэлжилсэн шугам) MoS₂ дан үеийн чөлөөт энергийн өөрчлөлт болон температурын хамаарал.

$F_{\text{эл}}(T, V)$, $F_{\text{хэл}}(T, V)$ болон $F_{\text{маг}}(T, V)$ чөлөөт энергийн температураас хамаарах хамаарлыг үзүүлэв. Зургаас MoS₂ ба Os/MoS₂ бүтцийн аль алиных нь хувьд $F_{\text{хэл}}$ нь дангаараа чөлөөт энерги ба температурын хамаарлыг тодорхойлж чадаж байгааг харж болно. Os/MoS₂ бүтцийн хувьд деформацийн нөлөөгөөр чөлөөт энергийн абсолют утга төдийлэн өөрчлөгдөөгүй байна. Зураг 3.5b – д деформацад ороогүй MoS₂ ба Os/MoS₂ бүтцийн чөлөөт энергийн өөрчлөлт $\Delta F(T, V)$ ба түүнийг бүрэлдүүлэгч $\Delta F_{\text{эл}}(T, V)$, $\Delta F_{\text{хэл}}(T, V)$ болон $\Delta F_{\text{маг}}(T, V)$ –ын температурын хамаарлын муруйг үзүүлжээ. $T=0\text{K}$ температурт MoS₂ ба Os/MoS₂ –ын $\Delta F(T, V)$ чөлөөт энергийн өөрчлөлт нь тус тус -83.5 кЖ/моль (0.86 эВ/атом) ба -61.7 кЖ/моль (0.64 эВ/атом) гэж тодорхойлогдов. Температур өсөхийн хэрээр $\Delta F(T, V)$ болон $\Delta F_{\text{хэл}}(T, V)$ –ийн утга буурсан болно. Энд: $\Delta F_{\text{эл}}(T, V)$, $\Delta F_{\text{маг}}(T, V)$ чөлөөт энергийн хандив маш бага байсан. Эндээс дээрх системүүд нь термодинамик тэнцвэр сайтай болох нь харагдаж байна.

Зураг 3.6a – 3.6c –д $\eta = -4, 0, 4\%$ –ийн деформацад орсон MoS₂ –ын дан үед суулгасан Os атомын d –орбиталын проеклогдсон электроны төлөвийн нягтыг (ПТН) үзүүлжээ. Зураг 3.6d – 3.6f –д Mo ба түүний дээр орших Os атомын нийт төлөвийн нягтыг (ТН) үзүүлсэн. Бипирамид маягийн кристалл оронд таван d –орбитал

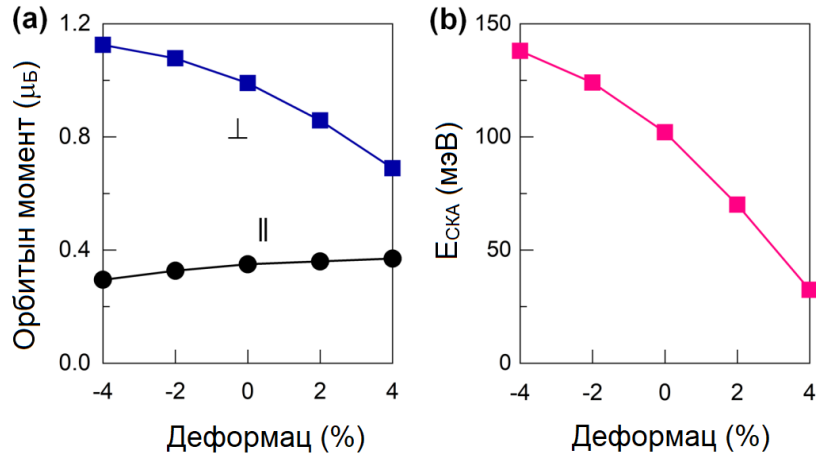


Зураг 3.6: (a) $\eta = -4\%$, (b) $\eta = 0$, (c) $\eta = 4\%$ тохиолдлууд дахь MoS_2 дан үеийн гадарга дэх Os атомын спин ба d -орбиталын ПТН. (d) –(f) Os атомын доор байрлах Mo атомд харгалзах ТН. Улаан ба цэнхэр өнгөөр будсан хэсэг нь харгалзан үндсэн ба үндсэн бус спины төлөвийг харуулна. Фермийн түвшинг тэг байхаар тохируулсан.

төлөв нь нэг ширхэг a_1 буюу $m = 0(d_{z^2})$, e' буюу $m = \pm 2(d_{xy/x^2-y^2})$ ба e'' буюу $m = \pm 1(d_{xy/yz})$ гэсэн хоёр ширхэг дублетэд задарна. Дээр дурдсан деформац бүрийн хувьд a_1 синглет болон e' дублет орбитын төлөв нь үндсэн спины электронуудаар (\uparrow) бүрэн дүүргэгддэг бол e'' төлөв нь хэсэгчлэн дүүргэгддэг. Нөгөө талаас e' төлөв нь үндсэн бус электронуудаар дүүргэгддэг бол $\eta = 4\%$ үед (Зураг 3.6с) a_1 ба e' төлөвүүд нь дээрх электронуудаар дүүргэгддэг байна. Үндсэн бус спины төлөвийн ПТН –ын пик нь Os $5d$ болон Mo $4d$ орбитал төлөвийн хооронд орших Фермийн түвшин орчимд байрлана. Эндээс Os $5d$ орбиталын бага-спин бүхий үндсэн төлөв нь Mo $4d$ орбиталын төлөвтэй эрлийз холбоо үүсгэдэг болохыг харж болно. Эндээс MoS₂ дан үеийн гадаргад байрлах Os атомын спины соронзон моментыг $1.59\mu_B$ гэж тодорхойлсон байна.

Энэ тооцооллыг үргэлжлүүлэн цэнэгийн түгэлтийн Бадерын анализын тооцооллыг хийсэн. Энэ тооцооллоор Os атомын $5d^6$ орбитал нь хөрш Mo атомаас $0.3e$ цэнэг авснаар Mo (2.16) атомаас илүү цахилгаан сөрөг чанартай (2.20) болно. Os атомд «булаагдсан» электронууд нь дээр орших a_1 , e' төлөвүүдийг эзэлсэнээр хос үүсгээгүй электронууд нь бага спинтэй төлөвт очиж сууна. $S = 1/2$ үед бага спинтэй төлөвт эффектив соронзон моментыг $\mu_{эф} = \sqrt{n(n+2)}\mu_B$ томъёогоор тооцоолход $1.73\mu_B$ гэж олдсон бөгөөд энд n нь хос үүсгээгүй электроны тоо юм. Спины соронзон моментыг өөртөө нийцсэн орны тооцооноос $1.59\mu_B$ гэж тодорхойлсон байна. Спины соронзон момент (μ_s) нь $\eta = -4\%$ үед $1.64\mu_B$ байснаа $\eta = 4\%$ үед $1.45\mu_B$ болж буурсан. Os – Mo зай буюу h зай 1.92 \AA –аас ($\eta = -4\%$) 1.64 \AA ($\eta = 4\%$) болж буурсан. Энэ үед Os атом $0.2e$ цэнэг олж авсан. Үүнийг 3.6с –р зурагт үзүүлсэн ба шахах деформацаас \rightarrow сунгах деформацад шилжих үед дээрх цэнэгийг олж авсан байна.

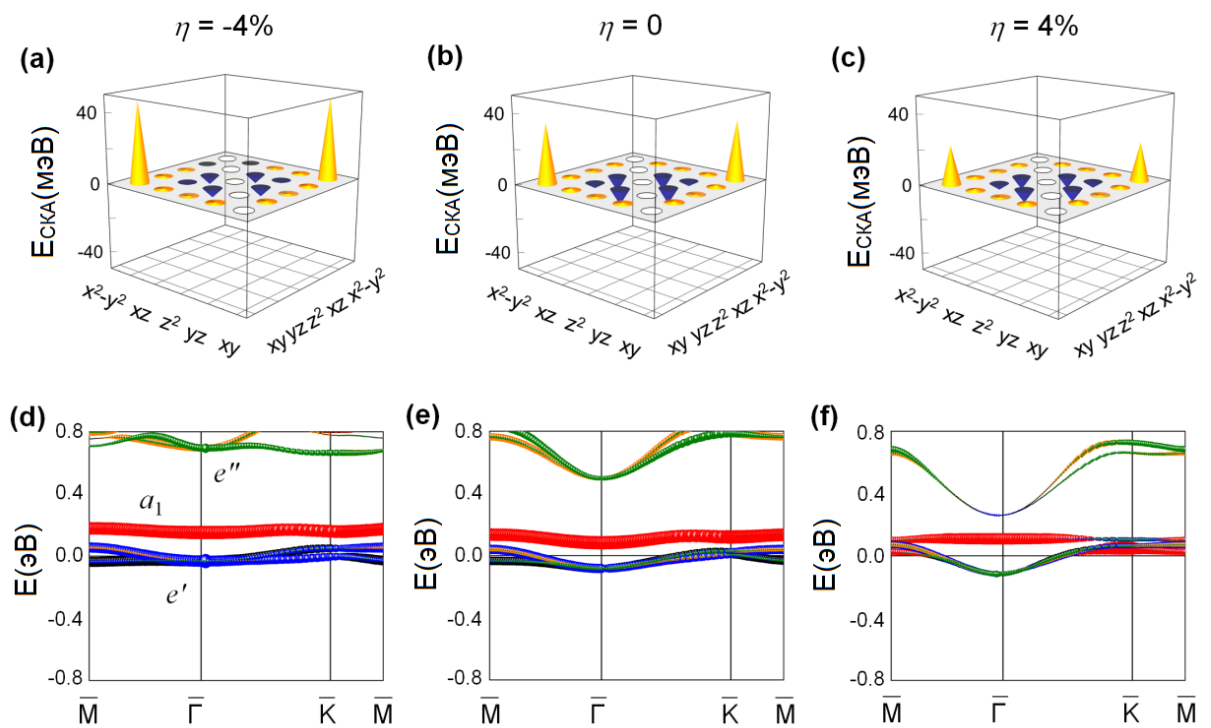
Pt, CuN ба MgO –ийн гадарга дээр Co, Fe, Mn атомуудыг оруулахад 60 мэВ/атом хүртэлх ПСКА –ын энергийг гарган авч болдог талаарх туршилтын судалгааны үр дүнгүүд хэвлэгдсэн байдаг [96]-[99]. Дээрх үр дүнгүүдэд тулгуурлан Os $5d$ орбиталын нөлөөгөөр 100 мэВ/атом хүртэлх ПСКА –ын энергийг бий болгох боломжтой гэсэн таамаглал дэвшүүлсэн. ПСКА –ын энергийн утга өндөр байхад дулааны тэнцвэрийн фактор буюу Δ гэсэн ойлголт бий болно. Энэ факторыг $\Delta = (KV)/k_B T$ томъёогоор олж болно. Үүнд: K , V , k_B ба T нь тус тус соронзон анизотропын тогтмол, эзэлхүүн, Больцманы тогтмол ба температур болно.



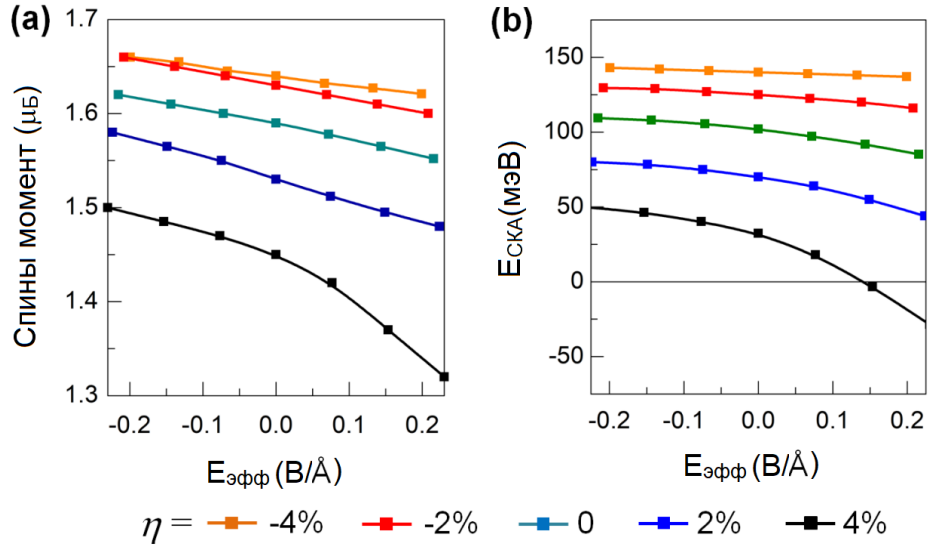
Зураг 3.7: (а) z тэнхлэгийн дагуу (\perp) ба xy хавтгай дээрх (\parallel) μ_0 орбитын соронзон момент. (b) $\eta = 0$, (c) $\eta = 4\%$ тохиолдлууд дахь MoS_2 дан үеийн гадарга дэх Os атомын соронзон кристаллын анизотропын энерги $E_{СКА}$.

Зураг 3.7а –аас деформацийн нөлөөгөөр ПСКА нь эрч өөрчлөгддөг болохыг харж болно. Энд $\eta = -4\%$ үед $E_{СКА}$ нь 140 мэВ/атом байснаа $\eta = 4\%$ үед 32 мэВ/атом болж буурч байна. $E_{СКА}$ болон μ_0^\perp –ын аль аль нь ижил зүй тогтол харуулсан. $E_{СКА}$ ба μ_0^\perp нь Бруногийн дүрэм гэж нэрлэгдэх $E_{СКА} = \frac{\xi}{4\mu_B} \Delta\mu_0$ хамаарлаар уялддаг. Энд: ξ нь спин орбитын холбоосын (СОХ буюу SOC- spin orbital coupling) тогтмол, $\Delta\mu = \mu_0^\perp - \mu_0^\parallel$.

ПСКА –ын энерги ба деформацийн хамаарлыг физик талаас нь тайлбарлахын тулд нэг бөөмийн энергийн спектр анализыг агуулсан хоёрдугаар эрэмбийн хөндөлтийн онолыг ашиглав [100]. Зураг 3.8а–3.8f –д $\eta = -4, 0, 4\%$ үеийн хувьд Os атомын хольцын спины электрон хориотой бүсийн бүтэц болон d –орбиталын $E_{СКА}$ –ыг үзүүлэв. Деформацийн аль ч тохиолдолд электрон бүс нь шулуун (flat) байсан ба e' , e'' –ийн бүсүүд давхцсан байна. Фермийн түвшнээс дээш орших хориотой бүс нь гол төлөв a_1 ба e'' –ийн шинж чанарыг үзүүлж байв. Деформацад ороогүй материалын хувьд их хэмжээний ПМКА үүсдэг нь нь $\langle xy(\downarrow) | L_z | x^2 - y^2(\downarrow) \rangle$ матрицын элементээс үүдэлтэй (Зураг 3.6b). Энд: үндсэн спины e' бүс нь бүрэн дүүргэгдсэн тул $\downarrow\uparrow, \uparrow\uparrow$ спины хандивыг тооцдоггүй. Нөгөө талаас $\langle xz, yz(\downarrow) | L_x | z^2(\downarrow) \rangle$ матрицын элемент нь ПМКА-д сөрөг тэмдэгтэй багахан хандив үзүүлнэ. Электрон бүсийн дүн шинжилгээнээс ПСКА нь гол төлөв \bar{M} ба \bar{K} орчимд бий болдог. Энд: бусад d –орбиталын матрицын элементийн хандив маш бага байна. Үүний адилаар $\eta = -4, 4\%$ –ийн деформацад



Зураг 3.8: $\eta = -4, 0, 4\%$ байх үед MoSe_2 -ын дан үед суусан Os атомын (a), (b), (c) d -орбиталын үүсгэх соронзон кристаллын анизотропын энерги, (d), (e), (f) хольцын спины электрон бүтэц. (a), (b), (c) зураг дахь шар багана нь $E_{\text{СККА}}$ -ийн эерэг ба сөрөг утгуудыг харуулна. (d), (e) ба (f) зурагт e' (d_{xy/x^2-y^2}), e'' ($d_{xz/yz}$) ба a_1 (d_{z^2}) орбиталын төлөвийг хар/хөх, ногоон/улбар шар ба улаан өнгөөр үзүүлэв. Фермийн түвшинг тэг байхаар тохируулав.



Зураг 3.9: MoS₂ –ын дан үед суулгасан Os атомын (a) спи́ны соронзон момент болон (b) СКА –ын энергийн эффе́ктив хүчлэгээс хамаарах хамаарал. Энд: Деформацийн хэмжээ харилцан адилгүй байгаа болно.

орсон материалын хувьд авч үзвэл $\eta = -4\%$ үед (Зураг 3.8a) $\langle xy(\downarrow)|L_z|x^2 - y^2(\downarrow) \rangle$ матрицын элемент нь ПМКА-д эерэг хандив үзүүлдэг бол $\eta = 4\%$ үед (Зураг 3.8c) энэ нь буурдаг байна. $\eta = -4\%$ үед d_{xy} ба $d_{x^2-y^2}$ хос бүс нь Фермийн түвшинд өндөр тэгш хэм бүхий $\overline{M\Gamma K M}$ шугамын дагуу үүсэх ба энд e' бүс нь $\bar{\Gamma}$ цэг орчимд дүүргэгддэг болно (Зураг 3.8d). Үүний эсрэгээр $\eta = 4\%$ үед \bar{K} ба \bar{M} цэг орчимд e' бүс дүүргэгдээгүй байх тул ПМКА-д эерэг хандив үзүүлдэггүй байна. Шахах ба сунгах деформацийн үед Os-Мо холбоосын урт өөрчлөгдсөний улмаас осмийн атомын e' -Мо ба a_1 эрлийзжилтийн зэрэг ялгаатай байх тул дээрх бүсийн шилжилтийг бий болгодог. $\eta = \pm 4\%$ тохиолдолд $\langle xz, yz(\downarrow)|L_x|z^2(\downarrow) \rangle$ матрицын элементээр үүсгэгдэх сөрөг $E_{\text{СКА}}$ нь деформациад ороогүй үеийнхтэй ижил байна. Эндээс хавтгайд перпендикуляр Мо $4d$ электронуудтай эрлийзжилтэнд орсон хавтгайн дагуух Os $5d$ электронуудын хувийн утга нь СКА-ыг тодорхойлно хэмээн дүгнэх боломжтой.

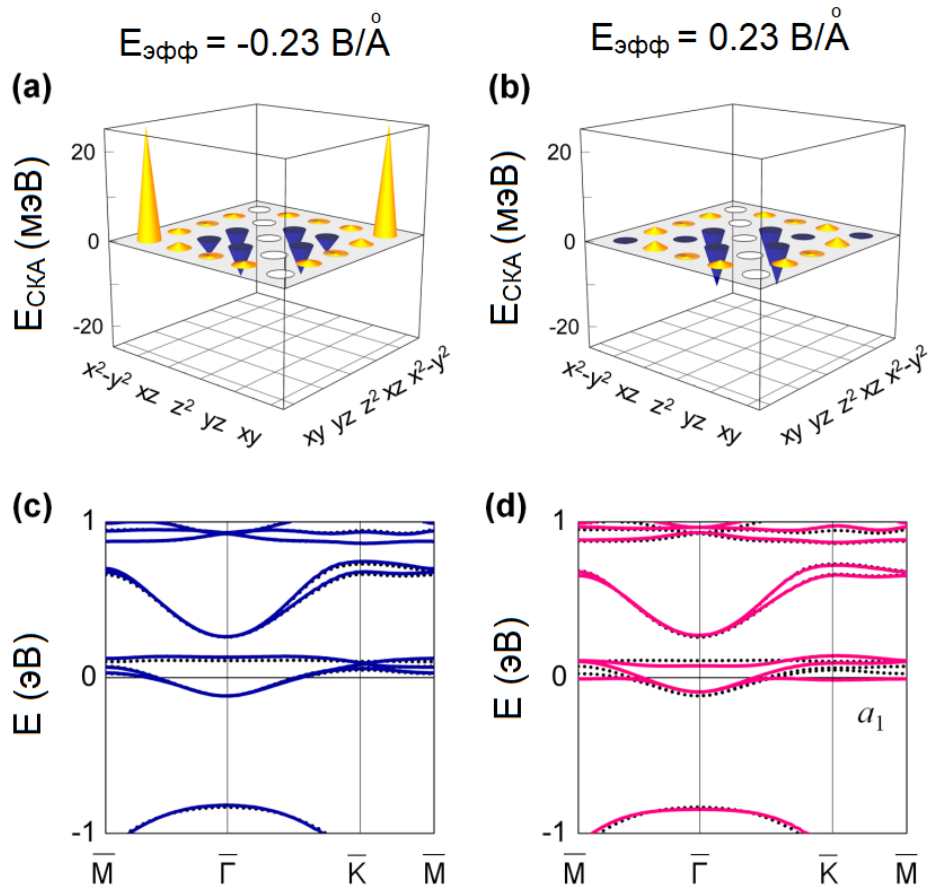
Одоо деформац үйлчилсэн хоёр хэмжээст материалаа цахилгаан орноор үйлчилхэд соронзон шинж чанарт ямар өөрчлөлт бий болох талаар судалъя. Зураг 3.9a, b –д Os атом бүхий MoS₂ –ын дан үеийн деформацаар үүсгэгдсэн спи́ны соронзон момент болон $E_{\text{СКА}}$ энергийн цахилгаан орны хүчлэгээс хамаарах хамаарлыг үзүүлэв. $\vec{E}_{\text{гад}}$ хүчлэг бүхий гадны цахилгаан орон нь дан үеийн хавтгайд перпендикуляр чиглэлд үйлчилсэн бөгөөд осми агуулаагүй хүхрийн үе рүү чиглэсэн. Үелэх захын нөхцөлийн

улмаас нэгж үүрийн дагуу үүсэх хуурмаг цахилгаан орны нөлөөг арилгах зорилгоор тооцоонд диполийн засвар нэмж оруулсан. Энд цахилгаан орны эффе́ктив хүчлэгийг $\vec{E}_{\text{эфф}} = \vec{E}_{\text{гад}}/\varepsilon^{\perp}$ бөгөөд ε^{\perp} нь MoSe₂ –ын дан үеийн диэлектрикийн тензорын хавтгайгаас гадагш чиглэх байгуулагч юм. Бид $\eta = -4, -2, 2, 2, 4\%$ байхад MoS₂ –ын дан үеийн ε^{\perp} нь тус тус 3.76, 3.60, 3.48, 3.35 ба 3.25 болохыг тодорхойлов.

$\vec{E}_{\text{эфф}}$ хүчлэг эерэгээс сөрөг болж өөрчлөгдөхөд спи́ны соронзон момент болон $E_{\text{СКА}}$ буурсан нь орбитын соронзон моменты́н хавтгайгаас гадагш чиглэх байгуулагч μ_o^{\perp} (энэ ажлын үр дүнд тусгаагүй болно) буурч байгаатай төстэй байна. Цахилгаан хүчдэлээр удирдагдаж буй спи́ны соронзон момент болон $E_{\text{СКА}}$ нь шахах деформациаас илүүтэй сунгах деформацийн үед буурч байна. $\eta = 4\%$ үед цахилгаан орныг сөрөг→эерэг чиглэлд өөрчилхөд Os 5d орбиталын цэнэг нь $E_{\text{эфф}} = -0.23B/\text{Å}$ байхад $6.35e$, $E_{\text{эфф}} = 0.23B/\text{Å}$ үед $6.51e$ болж өөрчлөгдөнө. Энэхүү илүүдэл цэнэг нь гол төлөв хольцын спи́ны a_1 төлөвт хуримтлагдана. Сонирхолтой нь $\eta = 4\%$, $E_{\text{эфф}} = 0.15B/\text{Å}$ байхад ПСКА нь хавтгайн дагуух соронзжилттой болж өөрчлөгдөнө.

Хүчдэл соронзжилтод хэрхэн нөлөөлдөг болохыг ойлгохын тулд Зураг 3.10а, б – д үзүүлсэн d орбиталаар үүсгэгдэх соронзон анизотропын энерги болон 3.10с, d –д үзүүлсэн $E_{\text{эфф}} = -0.23B/\text{Å}$ ба $E_{\text{эфф}} = 0.23B/\text{Å}$ үеийн Os атомын хольцын спи́ны электроны бүсийн бүтцийг авч үзье. Зураг 3.8е ба Зураг 3.10b –ийг харьцуулан үзвэл $E_{\text{эфф}} = -0.23B/\text{Å}$ үед $\langle xy(\downarrow)|L_z|x^2 - y^2(\downarrow) \rangle$ матрицын элемент нь ПСКА –д эерэг хандив үзүүлдэг бол $E_{\text{эфф}} = 0.23B/\text{Å}$ үед $\langle xy(\downarrow)|L_z|x^2 - y^2(\downarrow) \rangle$ дээрх эерэг хандив алга болдог (Зураг 3.10b). Энэ үед $\langle xy, yz(\downarrow)|L_x|z^2(\downarrow) \rangle$ матрицын элементийн сөрөг хандив нилээд чухал болж ирдэг. Үүнийг хүчдэлийн нөлөөгөөр хольцын спи́ны a_1 төлөв нь Фермийн түвшний доор \bar{K} ба \bar{M} цэгийн орчим шилжсэнтэй холбон тайлбарлаж болно (Зураг 3.10d).

Дээр хийгдсэн тооцооллоор соронзон шинж чанартай атомаар хольцолсон MoS₂ –ын дан үед деформац болон гадны цахилгаан орноор нөлөөлхөд материалын соронзон шинж чанар нь эрс өөрчлөгдөж байгааг харуулсан тул осмийн нэг атомаар хольцолсон MoSe₂, WSe₂ болон WS₂-ийн дан үеийн соронзон шинж чанарыг тооцоолсон болно. Жишээлбэл 3.1 –р хүснэгтэд $\eta = -2, 0, 2\%$ байх үед Os/WSe₂ –ын хувьд хийсэн тооцооллын үр дүнг харуулав. Энд Os/MoS₂ –ын адил бүтцийн хувьд торын тогтмол, Os атомын W атомуудын хавтгайгаас алслагдах өндөр, спи́ны соронзон момент,



Зураг 3.10: $\eta = 4\%$ деформацад орсон $MoSe_2$ -ын дан үеийн $E_{эфф} = -0.23 \text{ V/\AA}$ ба $E_{эфф} = 0.23 \text{ V/\AA}$ хүчлэгтэй байх тохиолдолд d орбиталаар үүсгэгдэх $E_{СКА}$ (а) ба (b), (c) ба (d) хольцын спины электроны бүсийн бүтэц. (a) ба (b) зураг дахь шар болон хөх багана нь $E_{СКА}$ энергийн эерэг ба сөрөг утгыг харуулна. (c) ба (d) зурагт тэг-орны бүсийн бүтцийг тасархай шугамаар зурж харьцуулав. (d) зурагт a_1 бүс нь Фермийн түвшнээс доогуур $\bar{K}\bar{M}$ шугам дагуу байрлана. Фермийн түвшинг тэг байхаар тохируулав.

Хүснэгт 3.1: Харилцан адилгүй деформацад орсон Os/MoS₂ –ын a - торын тогтмол (Å), h - Os атомын Mo атомуудын хавтгайгаас алслагдах өндөр (Å), μ_s - спины соронзон момент (μ_B /атом), $\delta\mu_o$ - орбитын моменты анизотроп (μ_B /атом), E_{MKA} - соронзон кристаллын анизотропын энерги (мэВ/атом).

η	a	h	μ_s	$\delta\mu_o$	E_{MKA}
-2%	3.11	1.87	1.60	0.71	110
0	3.18	1.76	1.52	0.60	80
2%	3.24	1.64	1.38	0.42	39

орбитын моменты анизотроп болон соронзон кристаллын анизотропын энергийн утгуудыг үзүүлэв. Энд $\delta\mu_o$ болон E_{MKA} –д деформацийн нөлөө мөн л их байв. E_{MKA} –ийн утгууд нь деформацийн утгууд бүрт харгалзан 110, 80 ба 39 мэВ/атом байсан нь Os/MoS₂ –ын утгаас 20мэВ/атом утгаар бага байна.

Төслийн судалгааны объект болох осмийгоор хольцолсон MoSe₂, WSe₂ болон WS₂-ын дан үед сунгах болон шахах деформац олгосон тохиолдол бүрт системийн үндсэн төлөвийн энерги E_0 , энтальпи (formation enthalpy) H_f , a ба b торын параметр болон K_U гэсэн соронзон кристаллын анизотропын утга хэрхэн өөрчлөгдөж буй тодорхойлсон. Дээрх тооцооллын үр дүнг 3.2 –3.5 –р хүснэгтэд харуулав.

Хүснэгт 3.2: Харилцан адилгүй деформацад орсон Os/MoS₂ системийн үндсэн төлөвийн энерги E_0 , энтальпи H_f , a ба b торын параметр, μ_s - спины соронзон момент болон K_U - соронзон кристаллын анизотропын утгуудыг тодорхойлсон үр дүн.

Os/MoS ₂	-5	-4	-2	0	2	4	5
E_0 (эВ)	-195.2	-195.9	-196.9	-197.2	-196.9	-196.2	-195.6
H_f (эВ/атом)	-0.16	-0.17	-0.18	-0.19	-0.2	-0.21	-0.21
a ба b (Å)	9.06	9.16	9.35	9.54	9.73	9.92	10.02
μ_s (μ_B)	1.82	1.807	1.798	1.779	1.763	1.731	1.733
K_U (мэВ)	135.41	138.51	128.86	103.36	70.01	36.07	27.05

Дээрх үр дүнгүүдийг харьцуулан үзвэл дээрх материалуудын хувьд шахах деформацийн нөлөөгөөр соронзон шинж чанар нэмэгдэж байна. Эдгээрийн соронзон шинж чанарыг өсөх дарааллаар нь эрэмблэвэл Os/WSe₂, Os/MoSe₂, Os/WS₂ болон Os/MoS₂ байна.

Хүснэгт 3.3: Харилцан адилгүй деформацад орсон Os/MoSe₂ системийн үндсэн төлөвийн энерги E₀, энтальпи H_f, *a* ба *b* торын параметр, μ_s - спины соронзон момент болон K_U - соронзон кристаллын анизотропын утгуудыг тодорхойлсон үр дүн.

Os/MoSe ₂	-5	-4	-2	0	2	4	5
E ₀ (эВ)	-179.8	-180.5	-181.3	-181.6	-181.3	-180.6	-180.1
H _f (эВ/атом)	-0.18	-0.18	-0.19	-0.20	-0.21	-0.22	-0.23
<i>a</i> ба <i>b</i> (Å)	9.45	9.55	9.75	9.94	10.14	10.34	10.44
μ _s (μ _B)	1.83	1.82	1.79	1.78	1.78	1.77	1.75
K _U (мэВ)	82.1	73.1	-57.0	-52.0	-44.7	-32.5	-22.0

Хүснэгт 3.4: Харилцан адилгүй деформацад орсон Os/WS₂ системийн үндсэн төлөвийн энерги E₀, энтальпи H_f, *a* ба *b* торын параметр, μ_s - спины соронзон момент болон K_U - соронзон кристаллын анизотропын утгуудыг тодорхойлсон үр дүн.

Os/WS ₂	-5	-4	-2	0	2	4	5
E ₀ (эВ)	-212.2	-213.1	-214.1	-214.4	-214.1	-213.3	-212.6
H _f (эВ/атом)	-0.13	-0.14	-0.15	-0.16	-0.17	-0.18	-0.19
<i>a</i> ба <i>b</i> (Å)	9.07	9.17	9.36	9.55	9.74	9.93	10.03
μ _s (μ _B)	1.806	1.797	1.776	1.754	1.732	1.723	1.718
K _U (мэВ)	120.78	121.48	110.86	80.08	38.45	-12.05	-10.3

Хүснэгт 3.5: Харилцан адилгүй деформацад орсон Os/WSe₂ системийн үндсэн төлөвийн энерги E₀, энтальпи H_f, *a* ба *b* торын параметр, μ_s - спины соронзон момент болон K_U - соронзон кристаллын анизотропын утгуудыг тодорхойлсон үр дүн.

Os/WSe ₂	-5	-4	-2	0	2	4	5
E ₀ (эВ)	-195.1	-195.8	-196.7	-197.0	-196.7	-195.9	-195.4
H _f (эВ/атом)	-0.18	-0.19	-0.20	-0.21	-0.22	-0.23	-0.24
<i>a</i> ба <i>b</i> (Å)	9.45	9.55	9.75	9.95	10.15	10.35	10.45
μ _s (μ _B)	1.81	1.79	1.75	1.74	1.74	1.73	1.72
K _U (мэВ)	52.8	35.7	-45.8	-42.8	-35.2	-26.0	-20.4

Бүлэг 4

Ерөнхий дүгнэлт

Төслийн үр дүнг нэгтгэн дараах дүгнэлтэд хүрсэн. Үүнд:

1. Si/SiO₂ суурин дээр MoSe₂, WSe₂-ын 0.75-3.75 нм зузаантай цөөн үеийг амжилттай гарган авч оптик судалгаагаар баталгаажуулав.
2. Атомын хүчний микроскопын контактын болон контактын бус горимд явуулсан олон давталттай хэмжилтээр MoSe₂, WSe₂-ын цөөн үеийг зузаан 2.75-10 нм зузаантай болохыг тодорхойлов. Контактын горимын хэмжилтийн үр дүн нарийвчлал сайтай аргачлал болохыг тогтоолоо.
3. Тэмтрэх тунелийн микроскопын судалгаагаар MoSe₂, WSe₂-ын морфологийн судалгааг явуулж, гадаргууд хоёр төрлийн вакансын гажиг илрүүлсэн.
 - Дээрх гажгуудын төв, цэнэгийн түгэлтийн судалгааг явуулж эдгээр гажгууд нь гадаргуугийн селенийн атомуудын доор вольфрам болон молибдены атомуудын хавтгайд орших зарим атомууд бусад төрлийн донор болон акцептор атомуудаар солигдох үед үүсдэг гажгууд болохыг тогтоосон.
4. НФО-оор Os хольц бүхий MoSe₂, WSe₂-ын дан үеийн соронзон момент болон СКА-ыг тодорхойлж, цахилгаан орон болон деформацийн нөлөөгөөр дээрх хоёр материалын соронзон шинж чанарыг тохируулах боломжтойг харуулсан.
 - MoSe₂ ба WSe₂ –г осмигоор хольцолход соронзон шинж чанартай болсон бөгөөд шахах деформацийн улмаас соронзон шинж чанар нэмэгдэж байгааг тогтоов.

- MoS_2 , MoSe_2 , WS_2 , WSe_2 –ыг осмийн атомаар хольцолж 0.1-0.2 В/А хүчлэг бүхий цахилгаан орноор үйлчилж, хавтгайд перпендикуляр чиглэлтэй деформацад оруулхад СКА-ын хүчдлийн утга хавтгайн дагуух чиглэлээс даруй 6 дахин их байгааг тогтоов.

5. Хоёр хэмжээст MoSe_2 ба WSe_2 –г газрын ховор элементээр хольцолход цахилгаан болон соронзон шинж чанар хэрхэн өөрчлөгдөж буй талаарх туршилтын үр дүнгүүд одоогоор хомс хэвээр тул дээрх материалын соронзон шинж чанарын судалгааг өргөжүүлэн, онолын тооцооллын үр дүнг баталгаажуулах нь чухал. Иймд энэ ажил цаашид үргэлжлэх болно.

Номзүй

- [1] Novoselov, K., Geim, A., Morozov, S., Jiang, D., Zhang, Y., Dubonos, S., Grigorieva, I., Firsov, A. *Science*, 306, 2004, 666.
- [2] Neto, A.H.C., Guinea, F., Peres, N.M.R., Novoselov, K.S., Geim, A.K. *Rev. Mod. Phys.*,81, 2009, 109.
- [3] Bao, L., Jie, Y., Yonghao, H., Tingjing, H., Wanbin, R., Cailong, L., Yanzhang, M., Chunxiao, G. *J. App. phys.* 109, 2011, 53717.
- [4] Ali, M.N. et al., *Nature*, 514, 2014, 205.
- [5] Kuc, A., Zibouche, N., Heine, T. *Phys. Rev. B*, 83, 2011, 245213.
- [6] Castro Neto, A.H. *Phys. Rev. Lett.*, 86, 2001, 4382.
- [7] Ramasubramaniam, A., Naveh, D., Towe, E. *Phys. Rev. B*, 84, 2011: 205325.
- [8] Wang, Q. H.; Kalantar-Zadeh, K.; Kis, A.; Coleman, J. N.; Strano, M. S. *Electronics and Optoelectronics of Two-Dimensional Transition Metal Dichalcogenides*, *Nat. Nanotechnol.* (2012), 7, 699–712.
- [9] Eda, G., Fujita, T., Yamaguchi, H., Voiry, D., Chen, M., Chhowalla, M. *ACS Nano*, 6, 2012, 7311.
- [10] Lin, Y.-C. et al. *Atomically Thin Heterostructures Based on Single-Layer Tungsten Diselenide and Graphene*, *Nano Lett.* (2014), 14, 6936-6941.
- [11] Lebegue, S., Bjorkman, T., Klintonberg, M., Nieminen, R.M., Eriksson, O. *Phys. Rev.X*, 3, 2013, 031002.

- [12] Ataca, C., Şahin, H., Ciraci, S. *J. Phys. Chem. C*, 116, 2012, 8983.
- [13] Kam, K.K., Parkinson, B.A. *J. Phys. Chem.*, 86, 1982a: 463.
- [14] Kam, K. K., Parkinson, B. *J. Chem. Phys.*, 86, 1982b: 463.
- [15] Young, P.A. *J. Phys. D*, 1, 1968, 936.
- [16] Scalise, E., Houssa, M., Stesmans, A., Geoffrey, P., Afanasev, V. *Phys. E*, 54, 2012, 416.
- [17] Scalise, E., Houssa, M., Stesmans, A., Geoffrey, P., Afanas'ev, V. *Nano Res.*, 5, 2011, 43.
- [18] Ataca, C., Sahin, H., Akturk, E., Ciraci, S. *J. Phys. Chem. C*, 115, 2011, 3934.
- [19] Mak, K.F., Lee, C., Hone, J., Shan, J., Heinz, T.F. *Phys. Rev. Lett.*, 105, 2010, 136805.
- [20] Splendiani, A. et al. *Nano Lett.*, 10, 2010, 1271.
- [21] Han, S.W. et al. *Phys. Rev. B*, 84, 2011, 045409.
- [22] Seidl, A., Gorling, A., Vogl, P., Majewski, J.A., Levy, M. *Phys. Rev. B*, 53, 1996, 3764.
- [23] Novoselov, K.S., Jiang, D., Schedin, F., Booth, T.J., Khotkevich, V.V., Morozov, S.V., Geim, A.K. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*, 102, 2005, 10451.
- [24] Ayari, A., Cobas, E., Ogundadegbe, O., Fuhrer, M.S. *J. Appl. Phys.*, 101, 2007, 014507.
- [25] Lee, K., Kim, H.K., Lotya, M., Coleman, J.N., Kim, G.T., Duesberg, G.S. *Adv. Mater.*, 23, 2011, 4178.
- [26] Radisavljevic, B., Radenovic, A., Brivio, J., Giacometti, V., Kis, A. *Nat. Nanotechnol.*, 6, 2011a, 147.
- [27] Liu, H., Ye, P. D. *IEEE Electron Device Lett.*, 33, 2012, 546.

- [28] Cheiwchanchamnangij, T., Lambrecht, W.R.L. *Phys. Rev. B*, 85, 2012, 205302.
- [29] Cheng, Y., Zhu, Z., Schwingenschlögl, U. *RSC Adv.*, 2, 2012, 7798.
- [30] Molina-Sanchez, A., Wirtz, L. *Phys. Rev. B*, 84, 2011, 155413.
- [31] Wieting, T.J., Verble, J.L. *Phys. Rev. B*, 3, 1971, 4286.
- [32] Lee, C., Yan, H., Brus, L.E., Heinz, T.F., Hone, J., Ryu, S. *ACS Nano*, 4, 2010, 2695.
- [33] Korn, T., Heydrich, S., Hirmer, M., Schmutzler, J., Schuller, C. *Appl. Phys. Lett.*, 99, 2011, 102109
- [34] Thompson, S. et al. *Electron Devices Meeting Technical Digest International*, San Francisco, CA, 61, 2002.
- [35] Yue, Q., Kang, J., Shao, Z., Zhang, X., Chang, S., Wang, G., Qin, S., Li, J. *Phys. Lett. A*, 376, 2012, 1166
- [36] Castellanos-Gomez, A., Poot, M., Steele, G.A., van der Zant, H.S.J., Agrait, N., Rubio-Bollinger, G. *Adv. Mater.*, 24, 2012, 772
- [37] H.J. Conley, B. Wang, J.I. Ziegler, R.F. Haglund, S.T. Pantelides, and K.I. Bolotin: Bandgap engineering of strained monolayer and bilayer MoS₂. *Nano Lett.* 13, 3626 (2013)
- [38] Yi M and Shen Z. A review on mechanical exfoliation for the scalable production of graphene. 2015. *J. Mater. Chem. A* 3 11700–15
- [39] D.-M. Tang, D.G. Kvashnin, S. Najmaei, Y. Bando, K. Kimoto, P. Koskinen, P.M. Ajayan et al., *Nat. Commun.* 5, 3631, 2014. Bohr J. Adhesive tape exfoliation: why it works for graphene *Europhys. Lett.* 109 58004. 2015
- [40] Blake P, Hill E, Neto A C, Novoselov K, Jiang D, Yang R, Booth T and Geim A. Making graphene visible *Appl. Phys. Lett.* 91 063124. 2007
- [41] Benameur M M, Radisavljevic B, Héron J S, Sahoo S, Berger H and Kis A 2011 Visibility of dichalcogenide nanolayers *Nanotechnology* 22 125706

- [42] Müller M R, Gumprich A, Ecik E, Kallis K T, Winkler F, Kardynal B, Petrov I, Kunze U and Knoch J. 2015. Visibility of two-dimensional layered materials on various substrates. *J. Appl. Phys.* 118 145305
- [43] Simsek E and Mukherjee B. 2015. Visibility of atomically-thin layered materials buried in silicon dioxide. *Nanotechnology* 26 455701
- [44] Nemes-Incze P, Osvath Z, Kamaras K and Biro L. 2008. Anomalies in thickness measurements of graphene and few layer graphite crystals by tapping mode atomic force microscopy. *Carbon*. 46 1435–42
- [45] L. Ottaviano, S. Palleschi, F. Perrozzi, G. D'Olimpio, F. Priante, M. Donarelli, P. Benassi, M. Nardone, M. Gonchigsuren, M. Gombosuren, A. Lucia, G. Moccia, O. A. Cacioppo. Mechanical exfoliation and layer number identification of MoS₂ revisited. *2D Mater.* 4 045013.
- [46] Bohr J. Adhesive tape exfoliation: why it works for graphene *Europhys. Lett.* 109 58004. 2015
- [47] Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. Теоретическая физика. Электродинамика сплошных сред. 2-е изд., испр. -М.: Наука. (т. VIII)
- [48] Li, Y., Chernikov, A., Zhang, X., Rigosi, A., Hill, H. M., van der Zande, A. M., Heinz, T. F. (2014). Measurement of the optical dielectric function of monolayer transition-metal dichalcogenides: MoS₂, MoSe₂, WS₂, and WSe₂. *Physical Review B*, 90(20), 205422.
- [49] K. F. Mak, K. He, C. Lee, G. H. Lee, J. Hone, T. F. Heinz, and J. Shan, Tightly bound trions in monolayer MoS₂, *Nature Mat.* 12, 207 (2013).
- [50] Zhang, H., Ma, Y., Wan, Y., Rong, X., Xie, Z., Wang, W., Dai, L. (2015). Measuring the refractive index of highly crystalline monolayer MoS₂ with high confidence. *Scientific reports*.
- [51] Li Y, Dong N, Zhang S, Wang K, Zhang L and Wang J 2016 Optical identification of layered MoS₂ via the characteristic matrix method *Nanoscale* 8 1210–5

- [52] Michelson A 1927 *Studies in Optics* (Chicago: The University of Chicago Press)
- [53] Ma B, Wang P, Ren S, Jia C and Guo X. 2016. Versatile optical determination of two-dimensional atomic crystal layers *Carbon* 109 384–9
- [54] Ohnesorge, Frank (1 January 1993). "True atomic resolution by atomic force microscopy through repulsive and attractive forces". *Science*. 260 (5113): 1451–6.
- [55] Brixner, L. H. Preparation and Properties of the Single Crystalline AB₂-type Selenides and Tellurides of Niobium, Tantalum, Molybdenum and Tungsten, *J. Inorg. Nucl. Chem.* (1962), 24, 257
- [56] Glemser, O.; Sauer, H.; König, P. The Sulfides and Selenides of Tungsten, *Z. Anorg. Chem.* (1948), 257, 241246.
- [57] Antal A. Koós.; Péter Vancsó.; Márton Szendrő.; Gergely Dobrik.; David Antognini Silva.; Zakhar I. Popov.; Pavel B. Sorokin.; Luc Henrard.; Chanyong Hwang.; László P. Biró.; Levente Tapasztó. Influence of Native Defects on the Electronic and Magnetic Properties of CVD Grown MoSe₂ Single Layers, *The Journal of Physical Chemistry C* (2019), 123, 24855-24864
- [58] Zhang, Ch.; Wang, C.; Yang, F.; Huang, J. K.; Li, L. J.; Yao, W.; Ji, W.; Shih, Ch. K. Engineering Point-Defect States in Monolayer WSe₂, *ACS Nano*, (2019), 13, 15951602.
- [59] Sommerhalter, Ch.; Matthes, Th. W.; Boneberg, J.; Lux-Steiner, M. Ch.; Leiderer, P. Investigation of Acceptors in p-type WS₂ by Standard and Photo-Assisted Scanning Tunneling Microscopy/Spectroscopy, *Appl. Surf. Sci.* (1999), 144145, 564569.
- [60] Klein, A.; Dolatzoglou, P.; Lux-Steiner, M.; Bucher, E. Influence of Material Synthesis and Doping on the Transport Properties of WSe₂ Single Crystals Grown by Selenium Transport, *Sol. Energy Mater. Sol. Cells*, (1997), 46, 175186.
- [61] Matthes, Th. W.; Sommerhalter, Ch.; Rettenberger, A.; Bruker, P.; Boneberg, J.; Lux-Steiner, M. C.; Leiderer, P. Imaging of Dopants in Surface and Sub-Surface Layers of the Transition Metal Dichalcogenides WS₂ and WSe₂ by Scanning Tunneling Microscopy, *Appl. Phys. A: Mater. Sci. Process*, (1998), 66, 10071011.

- [62] Addou, R.; Wallace, R. M. Surface Analysis of WSe₂ Crystals: Spatial and Electronic Variability, *ACS Appl. Mater. Interfaces*, (2016), 8, 2640026406.
- [63] J. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, Generalized Gradient Approximation Made Simple, *Phys. Rev. Lett.* 77, 3865 (1996).
- [64] Vincenzo Barone, Maurizio Casarin, Daniel Forrer, Michele Pavone, Mauro Sambi, Andrea Vittadini, Role and effective treatment of dispersive forces in materials: Polyethylene and graphite crystals as test cases, *Comp.Chem.* 30,6, (2009)
- [65] Vanderbilt, D., Soft self-consistent pseudopotentials in a generalized eigenvalue formalism. *Physical review B*, 41(11), 7892, (1990).
- [66] Baroni, S., De Gironcoli, S., Dal Corso, A. and Giannozzi, P. (2001) Phonons and Related Crystal Properties from Density-Functional Perturbation Theory. *Reviews of Modern Physics*, 73, 515.
- [67] X.L. Fan, Y. R. An, and W. J. Guo, Ferromagnetism in Transitional Metal-Doped MoS₂ Monolayer, *Nanoscale Res. Lett.* 11, 154 (2016)
- [68] G. Mirabelli, M. Schmidt, B. Sheehan, K. Cherkaoui, S.Monaghan, I. Povey, M. McCarthy, A.P. Bell, R. Nagle, F. Crupi, P.K. Hurley, and R. Duffy, Back-gated Nb-doped MoS₂ junctionless field-effect-transistors, *AIP Adv.* 6, 025323 (2016).
- [69] Z. Xiang, Z. Zhang, X. Xu, Q. Zhang, Q. Wang, and C. Yuan, “Room-temperature ferromagnetism in Co-doped MoS₂ sheets”, *Phys. Chem.* 17, 15822 (2015).
- [70] Hohnberg P. , Kohn W., Inhomogeneous Electron Gas, *Phys. Rev. A*, 136, B864 (1964).
- [71] Mermin D., Thermal Properties of the Inhomogeneous Electron Gas, *Phys. Rev.* 137, A1441 (1965).
- [72] Kohn W., Sham L.J., Self - Consistent Equations Including Exchange and correlation
- [73] Hohenberg P., Kohn W., Inhomogeneous Electron Gas, *Phys. Rev.* 136 (1964), B864–B871.

- [74] Kohn W., Nobel Lecture: Electronic structure of matter—wave functions and density functionals, *Rev. Mod. Phys.* 71, 1253 (1999).
- [75] Bethe A., *Intermediate Quantum Mechanics*, Cornell University, Benjamin, Inc, New York, (1964).
- [76] Haq S, Chattaraj P. K., Deb B. M., A new form for the kinetic energy-density functional for many-electron systems, *Chem. Phys. Lett.* Volume 111,79 (1984) .
- [77] Becke A. D., Density functional calculations of molecular bond energies, *J. Chem. Phys.* 84 4524 (1986).
- [78] Марч Н., Янг У., Сампантхар С., Проблема многих тел в квантовой механике,(1969).
- [79] Jones R.O., Gunnarsson O., The density functional formalism, its applications and prospects, *Rev. Mod. Phys.* 61, 689 (1989).
- [80] Gunnarsson O., Lundquist B. I., Exchange and correlation in atoms, molecules, and solids by the spin-density-functional formalism, *Phys. Rev. B* 13, 4274 (1976).
- [81] G. Kresse and J. Hafner, Ab initio molecular dynamics for liquid metals, *Phys. Rev. B* 47, 558 (1993)
- [82] W. Zhou, X. Zou, S. Najmaei, Z. Liu, Y. Shi, J. Kong, J. Lou, P. M. Ajayan, B. I. Yakobson, and J. C. Idrobo, Intrinsic structural defects in monolayer molybdenum disulfide, *Nano Lett.* 13, 2615 (2013).
- [83] H. Li, C. Tsai, A. L. Koh, L. Cai, A. Contryman, A. H. Fragapane, J. Zhao, H. S. Han, H. C. Manoharan, F. Abild-Pedersen, J. K. Nørskov, and X. Zheng, Activating and optimizing MoS₂ basal planes for hydrogen evolution through the formation of strained sulphur vacancies, *Nat. Mater.* 15, 48 (2016).
- [84] D. D. Koelling and B. N. Harmon, A technique for relativistic spin-polarised calculations, *J. Phys. C Solid State* 10, 3107 (1977).
- [85] P. Giannozzi, S. Gironcoli, P. Pavone, and S. Baroni, Ab initio calculation of phonon dispersions in semiconductors, *Phys. Rev. B* 43, 7231 (1991).

- [86] A. Togo and I. Tanaka, First principles phonon calculations in materials science, *Scr. Mater.* 108, 1 (2015).
- [87] A. C. Gomez et al., Local Strain Engineering in Atomically Thin MoS₂, *Nano Lett.* 13, 5361 (2013).
- [88] C. R. Zhu et al., Strain tuning of optical emission energy and polarization in monolayer and bilayer MoS₂, *Phys. Rev. B* 88, 121301 (2013).
- [89] H. Li et al., Optoelectronic crystal of artificial atoms in strain-textured molybdenum disulphide, *Nat. Commun.* 6, 7381 (2015).
- [90] N. Wakabayashi, H. G. Smith, and R. M. Nicklow, Lattice dynamics of hexagonal MoS₂ studied by neutron scattering, *Phys. Rev. B* 12, 659 (1975).
- [91] H. I. Sozen, S. Ener, F. Maccari, K. P. Skokov, O. Gutfleisch, F. Kormann, J. Neugebauer, and T. Hickel, Ab initio phase stabilities of Ce-based hard magnetic materials and comparison with experimental phase diagrams, *Phys. Rev. Mater.* 3, 08440 (2019).
- [92] N. R. Mediukh, V. I. Ivashchenko, D. A. Pogrebnjak, and V. I. Shevchenko, First-principles study of thermodynamic and stability properties of TiC-SiC alloys, *Proc. NAP* 1, 01NTF4 (2019).
- [93] A. Molina-Sanchez and L. Wirtz, Phonons in single-layer and few-layer MoS₂ and WS₂, *Phys. Rev. B* 84, 155413 (2011).
- [94] H. Soni and P. K. Jha, Ab-initio study of dynamical properties of two dimensional MoS₂ under strain, *AIP Adv.* 5, 107103 (2015).
- [95] J. Su, Z. Liu, L. Feng, and N. Li, Effect of temperature on thermal properties of monolayer MoSe₂ sheet, *J. Alloy. Comp.* 622, 777 (2015).
- [96] P. Gambardella, S. Rusponi, M. Veronese, S. S. Dhesi, C. Grazioli, A. Dallmeyer, I. Cabria, R. Zeller, P. H. Dederichs, K. Kern, C. Carbone, and H. Brune, Giant Magnetic Anisotropy of Single Cobalt Atoms and Nanoparticles, *Science* 300, 1130 (2003).

- [97] I. G. Rau, S. Baumann, S. Rusponi, F. Donati, S. Stepanow, L. Gragnaniello, J. Dreiser, C. Piamonteze, F. Nolting, S. Gangopadhyay, O. R. Albertini, R. M. Macfarlane, C. P. Lutz, B. A. Jones, P. Gambardella, A. J. Heinrich, and H. Brune, Reaching the magnetic anisotropy limit of a 3d metal atom, *Science* 344, 988 (2014).
- [98] F. Donati, L. Gragnaniello, A. Cavallin, F. D. Natterer, Q. Dubout, M. Pivetta, F. Patthey, J. Dreiser, C. Piamonteze, S. Rusponi, and H. Brune, Tailoring the Magnetism of Co Atoms on Graphene through Substrate Hybridization, *Phys. Rev. Lett.* 113, 177201 (2014).
- [99] C. F. Hirjibehedin, C.-Y. Lin, A. F. Otte, M. Ternes, C. P. Lutz, B. A. Jones, and A. J. Heinrich, Large Magnetic Anisotropy of a Single Atomic Spin Embedded in a Surface Molecular Network, *Science* 317, 1199 (2007).
- [100] D. S. Wang, R. Q. Wu, and A. J. Freeman, First-principles theory of surface magnetocrystalline anisotropy and the diatomic pair model, *Phys. Rev. B* 47, 14932 (1993)