УДК 538.9

ПОИСК НОВЫХ АЛЛОТРОПОВ НА ОСНОВЕ ДИСУЛЬФИДА МОЛИБДЕНА И ФОСФОРЕНА. ИССЛЕДОВАНИЕ ИХ ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ СВОЙСТВ

Абраменко Н.Д. (Университет ИТМО), **Рожков М.А.** (Университет ИТМО), **Романов А.Е.** (Университет ИТМО), **Колесникова А.Л.** (Университет ИТМО),

Научный руководитель – доктор физико-математических наук, профессор Романов А.Е.

(Университет ИТМО)

Проведен анализ существующих научных работ по влиянию структурных дефектов на свойства двумерных однослойных кристаллов дисульфида молибдена и фосфорена; проведен расчет для трех новых производных материалов на их основе с помощью теории функционала плотности. По полученным расчетным данным сделаны выводы о электронных характеристиках данных материалов.

Введение. Углерод способен образовывать множество аллотропов - твердых тел из одного и того же элемента, различного по строению. Например, алмаз - самый твердый природный материал; графит – противоположен ему по свойствам, который имеет широкое применение (например, в качестве сухой смазки и проводника), и др. В зависимости от своей внутренней структуры эти аллотропы могут демонстрировать различное поведение электронов на внешней электронной оболочке, ответственных за взаимодействие между атомами углерода.
Если взять один изолированный атомный слой графита, то мы получим графен - двумерный кристалл углерода с гексагональной решеткой. Графен обладает многообещающими прикладными свойствами: необычными электронными свойствами, высокой теплопроводностью и уникальным набором механических характеристик. Его успешный синтез привлек большое внимание и ознаменовал активный рост интереса к изучению двумерных кристаллов.
Кроме графена, в семействе однослойных двумерных кристаллов находятся такие представители, как фосфорен и дисульфид молибдена. Оба этих материала обладают интересными свойствами и являются перспективными кандидатами на использование в оптике, электронике и других областях.
Физическими и механическими свойствами подобных материалов можно управлять с помощью внешних воздействий (механических, электрических, магнитных) и / или путем изменения локального кристаллического совершенства кристаллической решетки. Дефекты кристаллической решетки, в свою очередь, изменяют механические свойства (что аналогично эффектам, наблюдаемым в обычных трехмерных кристаллах), способствуя в то же время изменению электронных и теплопроводящих характеристик данных кристаллов.
Целью данной работы является исследование новых аллотропных модификаций однослойных двумерных кристаллов с гексагональной кристаллической решеткой и моделирование их электронных характеристик.

Основная часть.
В результате моделирования новых аллотропных модификаций двумерных кристаллов дисульфида молибдена и фосфорена было получено:
- Описание кристаллических решеток (внешний вид и их координаты) для каждого кристалла
- Диаграммы зонной структуры полученных материалов

Было обнаружено, что все проанализированные материалы являются структурно стабильными, что в теории подтверждает возможность их успешного синтеза и анализа уже на основе экспериментального исследования. Новые материалы демонстрируют переход к металлическому характеру от полупроводникового, который свойственен для бездефектных кристаллов фосфорена и дисульфида молибдена.

В дальнейшем предлагается провести следующие исследования:
- Провести расчеты иных характеристик данных материалов с помощью метода молекулярной динамики и теории функционала плотности: планируется изучение механических свойств данных кристаллов и других характеристик;
- Выполнить проектирование новых аллотропных модификаций на основе исследованных на основе ранее исследованных углеродных однослойных двумерных кристаллов;
- В одном из предыдущих исследований был проведен обзор кристаллов псевдо-графена, разделяющих то же семейство материалов; в обзоре была предложена классификация для подобных материалов. Предлагается включить исследованные материалы в данную классификацию, расширив её применение на не углеродные двумерные материалы.

Выводы.
Используя известные наработки в области моделирования аллотропов графена, были составлены кристаллические решетки для новых материалов на основе однослойного двумерного кристалла дисульфида молибдена и фосфорена. По полученным кристаллическим решеткам были проведены расчеты зонных диаграмм и структурной стабильности с помощью теории функционала плотности. Полученные в результате вычислений данные показывают о том, что спроектированные материалы являются стабильными, а их характеристики отличаются от исходного кристалла. Предлагается в будущем провести расчеты для остальных характеристик новых кристаллов (таких как физические характеристики, оптические характеристики и т.д.).

Абраменко Н.Д. (автор)

Романов А.Е. (научный руководитель)