

MoS₂ KRİSTALININ ELEKTRON STRUKTURUNUN LAYLARARASI QARŞILIQLI TƏSİRDƏN ASILILIĞI

Z.A. CAHANGİRLİ^{1,2}, N.A. ƏHMƏDOVA¹

¹AR Elm və Təhsil Nazirliyi Fizika İnstitutu, AZ 1143, H. Cavid k. 131, Bakı

²AR Elm və Təhsil Nazirliyi BDU, AZ 1148, Zəhid Xəlilov k. 33, Bakı

E-mail: zakircahangirli@yahoo.com

Sıxlıq funksionalı metodu ilə MoS₂ həcmi və çoxlaylı kristallarının elektron və optik xassələri tədqiq olunmuşdur. Hesablamanın nəticəsi göstərir ki, kvant konfaynment effektinin nəticəsində həcmi MoS₂ ilə müqayisədə, MoS₂ monolayının kovalentliyi və ionluluğu daha güclü olur. Layların sayının artması ilə kvant konfaynment effekti və laydaxili qarşılıqlı təsir azalır, eyni zamanda təbəqələrarası qarşılıqlı təsir artır, bu da qadağan zolağının azalmasına gətirir.

Açar sözlər: MoS₂, DFT, elektron strukturu, kvant konfaynment, E_g.

1. Giriş

Tipik keçid metalı dihalogenidlərindən biri olan molibden disulfid (MoS₂) katalizator [1] və hidrogeni saxlamaq üçün [2, 3] geniş istifadə olunur. Laydaxili güclü qarşılıqlı təsir, laylararası isə zəif Van der Waals qarşılıqlı təsiri sayəsində MoS₂ kristalı uzun illər mühüm bərk labrikant (sürtkü materialı) kimi tanınır [6, 7]. MoS₂-nin 1H- MoS₂ adlanan monolayını həcmi MoS₂-dən mikromexaniki kəsilmə yolu ilə almaq mümkündür [8]. 2H-MoS₂ (1T, 2H, 3R arasında) strukturu MoS₂-nin ən stabil strukturudur [9,10] və qadağan zolağı 1.29eV olan çəpkeçidli yarımkəçiricidir [4, 11, 12]. Monolaylı MoS₂ ikiölçülü təbiəti və qrafen tipli pətək quruluşu ilə də böyük diqqət çəkir. Maraqlıdır ki, monolaylı MoS₂ qadağan zolağı 1.90 eV olan düzkeçidli yarımkəçiricidir [4, 13] və sahə tranzistorları kimi istifadə edilə bilər [14]. Digər tərəfdən, qrafen sıfır qadağan zolağına malik olduğundan, onun optika və tranzistorlarda tətbiqi mümkün deyil. Bundan əlavə, nəzəri və təcrübi tədqiqatlar göstərir ki, MoS₂ laylarının sayı artıqca qadağan zolağı azalır. MoS₂ kristalında laylararası qarşılıqlı təsir layın qalınlığına həssasdır. Çoxlaylı MoS₂-nin fiziki xassələri ilə bağlı araşdırmalar ədəbiyyatda mövcuddur. Lakin, çoxlaylı MoS₂-nin elektron strukturları və optik xassələri, xüsusən də laylararası qarşılıqlı təsirlə bağlı olan fiziki xassələri hələ də yaxşı öyrənilməmişdir. Bu məqalədə MoS₂ kristalının elektron strukturunun layların sayından asılılığı tədqiq olunur. Hal-hazırda ab-initio hesablamalar müxtəlif materialların elektron və optik xassələrini öyrənmək üçün uğurla tətbiq olunur. Bu məqalədə *ab initio* hesablamalarından istifadə etməklə bir neçə laydan ibarət və həcmi MoS₂ kristalının elektron xassələri sistemli şəkildə tədqiq olunur. Verilən maddələrin optik xassələri də həmçinin, tədqiq olunmuşdur. Hesablamalar göstərir ki, $E//x$ polarizasiyasında $\epsilon_2^{xx}(\omega)$ dielektrik funksiyasının xəyali hissəsi uzun platolara malikdir. Bu platoların sonunda iki, dörd, laylı MoS₂-nin $\epsilon_2^{xx}(\omega)$ funksiyası uyğun olaraq, iki və dörd sayda kiçik pillələr göstərir.

Elektron və optik xassələrin *ab initio* hesablamaları DFT [11] əsasında Wien2k proqram kodunda [12] həyata keçirilən tam potensiallı xəttişədirilmiş müstəvi dalğalar (FP-LAPW) metodundan [13] istifadə ediləməklə aparılmışdır. Mübadilə-korrelasiya qarşılıqlı

əlaqəsi ümumiləşdirilmiş Qradient Yaxınlaşmasında (GGA) təsvir edilmişdir [14]. Mo və S atomları üçün maffin-tin (MT) sferalarının radiusları uyğun olaraq 2.5 a.u. və 2.0 a.u götürülmüşdür. MT sferaları daxilində potensial və yük sıxlığının ayrılışı $l_{\max} = 10$ ilə həyata keçirilmişdir. Baza funksiyalarının ayrılışında bazis funksiyaların sayını təyin edən $R_{MT}K_{\max} = 7$ istifadə edilmişdir, burada R_{MT} atom sferası radiuslarının ən kiçiyi, K_{\max} isə müstəvi dalğalarda maksimum dalğa vektorudur. Öz-özünü tənzimləyən hesablamalar üçün Brillüen zonasının (BZ) götürülməyən hissəsində 186 k-nöqtədən istifadə edilmişdir ki, bu da BZ-də 1500 k-nöqtəsinə uyğundur. Öz-özünü tənzimləyən hesablamalar tam enerjinin yığılmasının dəqiqliyinin 10^{-4} Ry-ə çatana qədər davam etdirilmişdir.

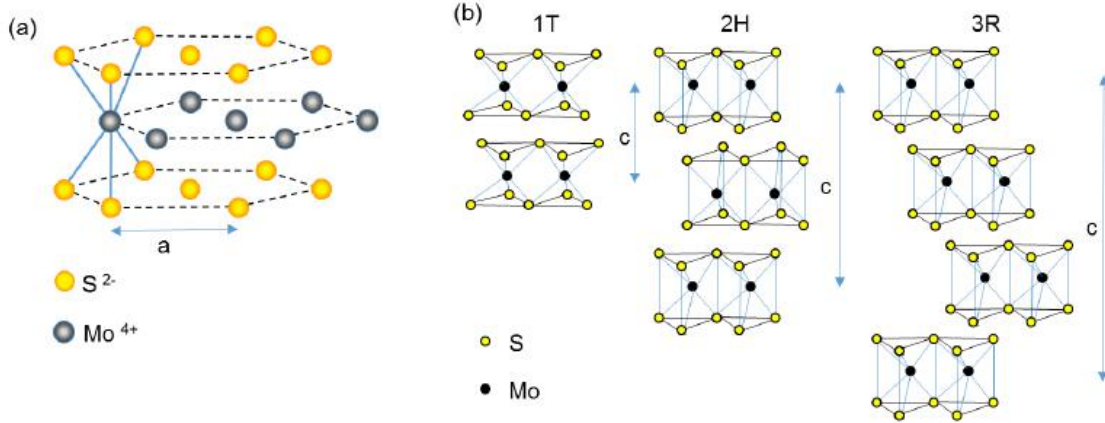
2. Kristal quruluşu

Molibden disulfid (MoS₂) MX₂ formuluna malikdir, burada M IV qrup (Ti, Zr, Hf), V qrup (V, Nb, Ta) və ya VI qrupunun (Mo, W) keçid metal elementi, X isə halqogendir (S, Se, Te). Bu materiallar keçid metal atomlarının müstəvisi ilə ayrılmış iki altıbucaqlı halqogen müstəvisi atomlarından ibarət X–M–X formasında laylı strukturlar əmələ gətirir. Məsələn, MoS₂, qonşu S–S təbəqələri arasında zəif van der Waals (vdW) qarşılıqlı təsirləri ilə əlaqələndən təbəqələrə bağlanan kovalent S–Mo–S-dən ibarət laylı bir quruluşa malikdir. Şəkil 1a-da göstərilədiyi kimi, S və Mo atom təbəqələri altıbucaqlı quruluşa malikdir və hər bir Mo atomu altı S atomunun yaratdığı triqonal prizmanın mərkəzində yerləşir [19].

Belə üçlaylı sendviç strukturu MoS₂-nin bir layı hesab olunur və çoxlaylı MoS₂ yaratmaq üçün Şəkil 1b-də göstərilədiyi kimi zəif vdW S–S əlaqəi olan üç mümkün konfigurasiya mümkündür. Belə vdW qarşılıqlı təsiri MoS₂-yə yığma sırası və atom koordinasiyası ilə fərqlənən müxtəlif politiplərdən ibarət həcmi kristal əmələ gətirməyə imkan verir. Şəkil 1b-də göstərilədiyi kimi, məlum olan üç MoS₂ strukturu vardır. 2H və 3R strukturları təbiətdə mövcuddur və üçbucaqlı prizmatik koordinasiya malikdir. 3R tipi rombhedral simmetriyaya malikdir və elementar qəfəsdə üç S–Mo–S layına malikdir. 2H- MoS₂ iki S–Mo–S layı olmaqla heksaqonal simmetriyaya malikdir. 1T tipli MoS₂ metastabil

strukturudur və tetraqonal simmetriya ilə oktaedral koordinasiyaya malikdir. Həm 1T, həm də 3R tipləri me-

tastabilidir və qızdırıldıqda 2H- MoS₂ strukturuna keçə bilirlər



Şəkil 1. (a) S və Mo təbəqələrinin altıbucaqlı quruluşu; (b) MoS₂-nin 1T/2H/3R tipli strukturlarının yandan görünüşünün sxematik təsviri.

2H- MoS₂ quruluşu ən stabil quruluş olduğundan [9, 10] bu işdə 2H tipli MoS₂-nin elektron strukturu və optik xassələri araşdırılır. MoS₂ laylı quruluşa malik olduğundan monolayı asanlıqla həcmi kristaldan ayırmaq

mümkündür. Həcmi MoS₂-nin qəfəs sabitləri $a=b=3.1604\text{Å}$, $c = 12.295\text{Å}$ [10].

3. Çoxlaylı MoS₂ kristalının elektron strukturları

Cədvəl 1.

Çoxlaylı MoS₂ üçün qəfəs parametri, atomlararası məsafə, qadağan zolağının eni və $\epsilon^{xx}(0)$.

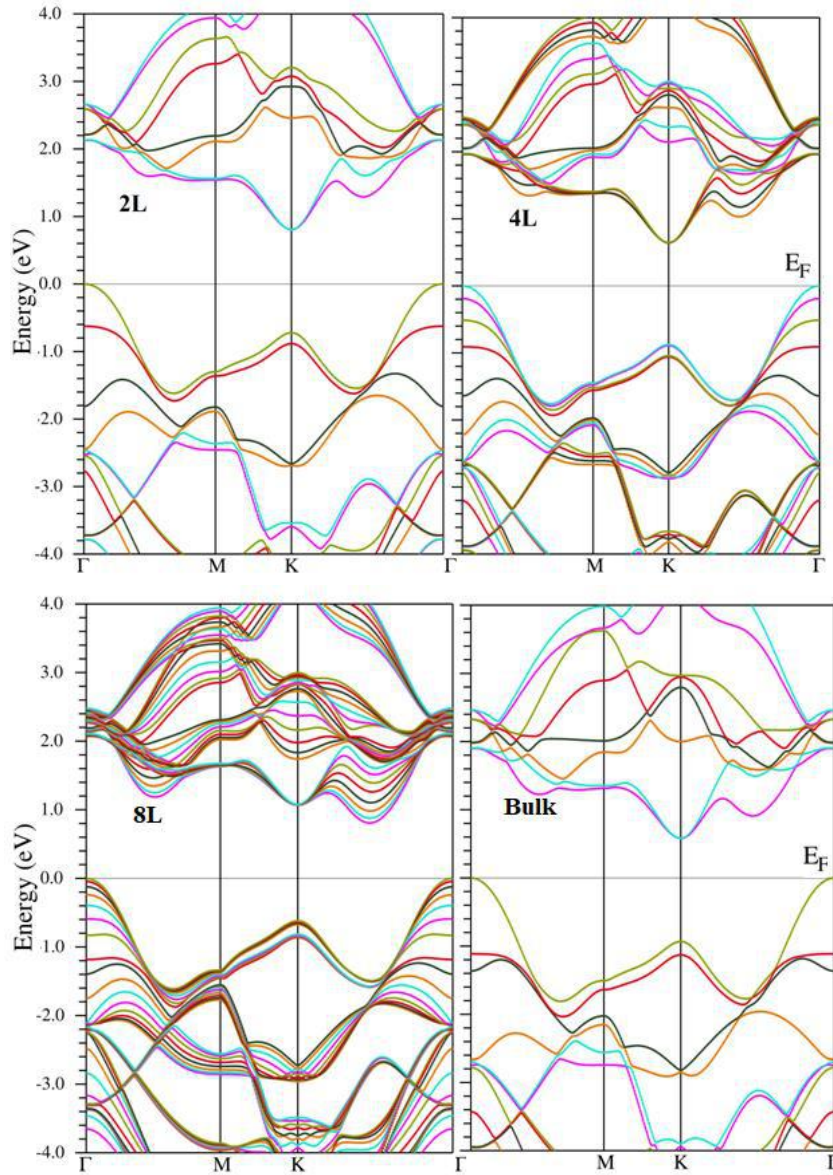
	2L	4L	8L	Həcmi
a (Å)	3.16	3.16	3.16	3.16
d (Mo-S) (Å)	2.354	2.354	2.354	2.354
E_g (eV)	1.01	0.99	0.93	0.90
$\epsilon^{xx}(0)$	5.9	8.0	12.0	15.0

Cədvəl 1-dən göründüyü kimi çoxlaylı MoS₂-nin qəfəs sabitləri həcmi kristalın qəfəs sabitləri ilə demək olar ki, eynidir. Şəkil 2-də müxtəlif laylı MoS₂ təbəqələrinin hesablanmış zona quruluşu verilmişdir. İkilyaylı və üçlaylı MoS₂ üçün valent zonasının maksimumu (VBM) Γ nöqtəsində, keçirici zonanın minimumu (CBM) isə K nöqtəsində yerləşir və çəpkeçidli qadağan zolağının eni müvafiq olaraq, 1.17 və 1.08 eV təşkil edir. Bununla yanaşı, MoS₂ təbəqələrinin sayı dörd və dördədən yuxarı artdıqca, bütün çoxlaylı MoS₂ təbəqələrinin zona quruluşu eyni xarakter göstərir. Beləki, bütün bu təbəqələr üçün həcmi kristalda olduğu kimi VBM Γ nöqtəsində, CBM isə Γ və K nöqtələri arasında yerləşir. Çəpkeçidli qadağan zolağı iki, dörd, səkkiz laylı və həcmi MoS₂ üçün müvafiq olaraq 1.03 eV, 1.01eV, 0.99 eV, 0.93 eV təşkil edir. Ümumiyyətlə, bir neçə laydan ibarət MoS₂-nin elektron zona quruluşu həcmi MoS₂-yə bənzəyir (şəkil 2), çünki həcmi MoS₂ əslində MoS₂ təbəqələri arasında zəif qarşılıqlı təsirə malik laylı materialdır. Hesablamalar (cədvəl 1) göstərir ki, MoS₂ təbəqələrinin sayı azaldıqca fundamental qadağan zolağı monoton şəkildə artır. Bu elektronların hərəkətinin laylarda məhdudlaşdırılması ilə əlaqədardır ki, bu ölçü kvant effekti yaradır. Bundan başqa, həc-

mi MoS₂-də layların sayı azaldıqca o düzkeçidli yarımkəçiriciyə doğru dəyişilir və birlaylı təbəqə düzkeçidli yarımkəçirici olur. Əvvəl qeyd edildiyi kimi, həcmi MoS₂ çəpkeçidli yarımkəçiricidir. Şəkil 2-dən göründüyü kimi həcmi MoS₂-nin zona quruluşunda laylararası qarşılıqlı təsirdən doğan parçalanma (monolaylı MoS₂ ilə müqayisədə), əsasən Γ -nöqtəsi ətrafında baş verir. İki laylı (2L) və 2L-dən çox laylı MoS₂-də də laylararası qarşılıqlı təsir nəticəsində zonaların parçalanması baş verir. Amma, həcmi kristalda zonaların parçalanması bir neçə laylı kristala nisbətən daha güclüdür. Bu isə həcmi kristalda laylar arasındakı qarşılıqlı təsir bir neçə laylı kristala nisbətən daha güclü olduğunu göstərir. Digər tərəfdən Brillüen zonasında (BZ) K nöqtəsi ətrafında zonaların parçalanması xeyli zəifdir. Valent zonasının yuxarı hissəsində elektron halları K nöqtəsində S atomunun (p_x , p_y)-orbitallarının azacıq qarışığı olmaqla, əsasən Mo atomunun d_{xy} və $d_{x^2-y^2}$ orbitallarından təşkil olunmuşdur (şəkil 3). Mo atomu S-Mo-S təbəqəsinin ortasında yerləşir. Onun ən yaxın qonşuları təbəqədəki S atomları olduğundan K nöqtəsində laylararası qarşılıqlı təsir az olur. Şəkil 3-dən göründüyü kimi, K nöqtəsindəki ilə müqayisədə Γ nöqtəsində daha güclü təbəqələrarası qarşılıqlı təsir mövcuddur. Çünki Γ nöq-

təsində ən yüksək dolu zonalar Mo atomlarının dz₂ orbitalları və S atomlarının p_z orbitallarından əmələ gəlir.

Buna görə də, S-S laylararası qarşılıqlı təsiri Γ nöqtəsində K nöqtəsindən daha güclüdür.



Şəkil 2. 2L, 4L, 8L və həcmi MoS₂ –nin BZ-nin yüksək simmetriyalı xətləri boyunca zona quruluşu.

3. Çoxlaylı MoS₂ kristalının optik xassələri.

Materialın əsas elektron strukturları və dalğa funksiyaları məlum olarsa onların əsasında optik xassələri hesablamaq mümkündür. $\epsilon_2^{\alpha\beta}(\omega)$ dielektrik funksiyasının xəyali hissəsi aşağıdakı tənliklə müəyyən edilir:

$$\epsilon_2^{\alpha\beta}(\omega) = \frac{4\pi^2 e^2}{\Omega} \lim_{q \rightarrow 0} \frac{1}{q^2} \sum_{c,v,k} 2w_k \delta(E_{ck} - E_{vk} - \hbar\omega) \times \langle u_{ck+e_{\alpha}q} | u_{vk} \rangle \langle u_{ck+e_{\beta}q} | u_{vk} \rangle^* \quad (1)$$

burada α və β indeksləri Dekart istiqamətlərini, c və v keçiricilik və valent zonalarını ifadə edir, E_{ck} və E_{vk} müvafiq olaraq keçiricilik və valent zonalarının enerjiləridir. $\epsilon_1^{\alpha\beta}(\omega)$ dielektrik funksiyasının həqiqi hissəsini $\epsilon_2^{\alpha\beta}(\omega)$ dielektrik funksiyasının xəyali hissəsindən Kramers-Kroniq münasibəti vasitəsilə təyin etmək mümkündür:

$$\epsilon_1^{\alpha\beta}(\omega) = 1 + \frac{2}{\pi} P \int_0^{\infty} \frac{\epsilon_2^{\alpha\beta}(\omega') \omega'}{\omega'^2 - \omega^2 + i\eta} d\omega' \quad (2)$$

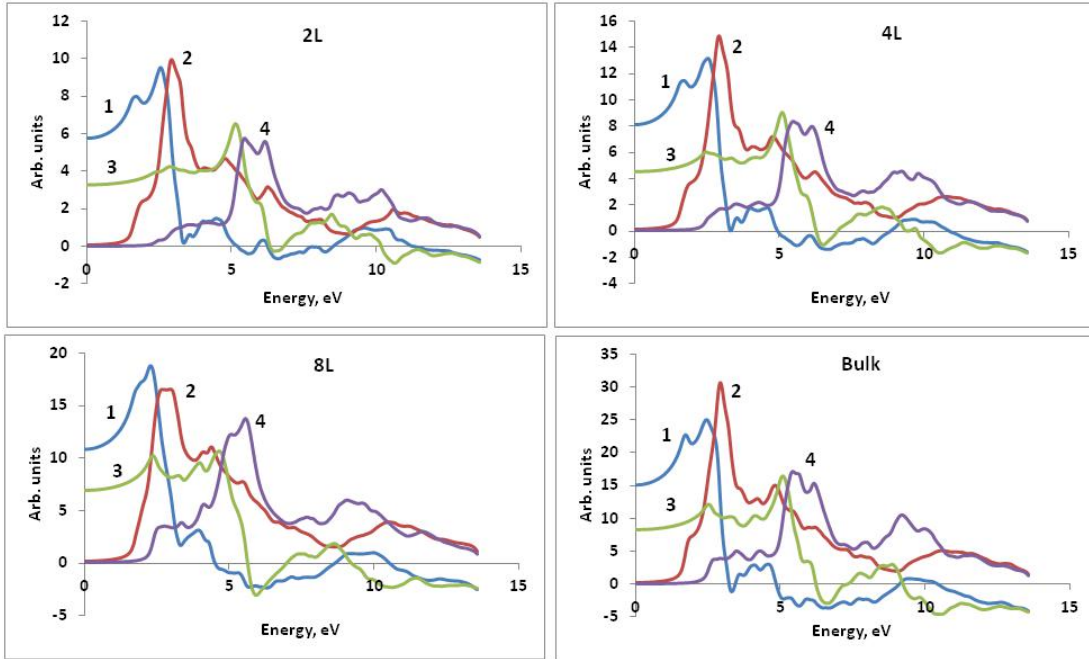
P –inteqralın baş qiymətidir.

MoS₂ birozlu quruluşa malik olduğundan, $\epsilon^{xx}(\omega)$ və $\epsilon^{yy}(\omega)$ eynidir. Bu işdə yalnız x-y müstəvisinə para-

lel olan E elektrik vektoru müzakirə olunur, yəni $E||x$ MoS_2 x - y müstəvisinə paralel hala baxılır. Şəkil 3-də çoxlaylı MoS_2 kristalının $E||x$ polarizasiyasında $\epsilon^{xx_2}(\omega)$ dielektrik funksiyasının xəyali hissəsi verilmişdir. Marafıdır ki, $\epsilon^{xx_2}(\omega)$ dielektrik funksiyasının xəyali hissələri platolara malikdir və MoS_2 -nin müxtəlif təbəqələrinin platoları $1.75eV \div 2.19eV$ diapazonunda təxminən eynidir. Qadağan zolağının kənarından $1.75eV$ -ə qədər $\epsilon^{xx_2}(\omega)$ müxtəlif çoxlaylı MoS_2 üçün tamamilə fərqlidir. Müxtəlif laylar üçün platoların başlanğıc və son enerjiləri müxtəlifdir. Monolayın platosunun eni digər çoxlaylı quruluşlara nisbətən xüsusən genişdir. Bir laylı MoS_2 -nin dielektrik funksiyasının başlanğıc enerjisi $1.64 eV$ düz keçid enerjisinə bərabərdir. Bununla belə, ikilaylı quruluşunu dielektrik funksiyasının başlanğıc enerjisi $1.17 eV$ çəp keçidə deyil, valent və keçirici zonalararası $1.62 eV$ düz keçidə uyğun gəlir. Bu, ona görə belə olur ki, çəp keçidlərdə fononlar da iştirak etdiyindən bu ikinci tərtib həyəcanlaşmaya uyğun gəlir və belə keçidlərin ehtimalı az olur. Ona görə, optik hesablamalarda biz yalnız valent və keçirici zonalararası düz keçidləri nəzərə alırıq. MoS_2 təbəqələrinin sayı dörd və yuxarı olduqda, $\epsilon^{xx_2}(\omega)$ -in həcmi kristalın dielektrik funksiyasından fərqlənmədiyi görü-

nür. Ona görə, biz burada yalnız birlaylı, ikilaylı, dördlaylı, səkkiz laylı və həmçinin həcmi MoS_2 -nin dielektrik funksiyalarını tədqiq edirik. Birlaylı, ikilaylı, dördlaylı, səkkiz laylı və həmçinin həcmi MoS_2 -nin dielektrik funksiyalarının platoları müvafiq olaraq $2.57eV$, $2.28eV$, $2.21eV$ və $2.19eV$ -da bitir. Dielektrik funksiyalarının real və xəyali hissələri üçün hesablanmış qiymətlər eksperimental nəticələrlə yaxşı uyğunlaşır.

Çoxlaylı və həcmi MoS_2 üçün statik dielektrik sabiti adlanan $\epsilon_1(0)$ -nin hesablanmış qiymətləri Cədvəl 1-də verilmişdir. Cədvəl 1-dən görüldüyü kimi çoxlaylı və həcmi MoS_2 üçün $\epsilon^{xx_1}(0)$ -in hesablanmış qiymətləri təxminən 15.0 -dir ki, bu da həcmi MoS_2 üçün 15.0 eksperimental qiymətinə çox yaxındır. $\epsilon^{xx_1}(0)$ -in qiyməti MoS_2 təbəqələrinin sayının artması ilə artır. Bir laylı MoS_2 üçün $\epsilon^{xx_1}(0)$ -in kəskin piki təxminən $2.54 eV$ -da yerləşir. Layların sayı artdıqca, piklərin energetik mövqeyi bir qədər sola doğru sürüşür. Yuxarıda göstərdiyimiz kimi, MoS_2 -nin qadağan zolağını və optik xassələrini layların sayını dəyişməklə idarə etmək mümkündür. Bu isə MoS_2 -nin bir laylı, çoxlaylı və həcmi kristallarının fotovoltaiq tətbiqləri üçün geniş imkanlar açır.



Şəkil 3. 2L, 4L, 8L və həcmi MoS_2 -nin dielektrik funksiyasının həqiqi və xəyali hissələri (1,2- $E||a$ layları boyunca həqiqi və xəyali hissələr, 2,4- $E \perp a$ laylarına perpendikulyar real və xəyali hissələr).

Nəticə

Məqalədə *ab initio* hesablamalardan istifadə etməklə MoS_2 həcmi və çoxlaylı kristallarının elektron və optik xassələri araşdırılır. Hesablamalar göstərir ki, həcmi MoS_2 ilə müqayisədə, MoS_2 monolayının kovalentliyi və ionluluğu daha güclüdür ki, bu da monolayda daha böyük kvant konfaynment effektinin nəticəsidir. Layların sayının artması ilə kvant konfaynment effekti və laydaxili qarşılıqlı təsir azalır, eyni zamanda təbəqələrarası qarşılıqlı təsir artır, bu da qadağan zolağının və birbaşa keçidlərinin azalması ilə nəticələnir. Layların sayı ikidən çox olduqda, MoS_2 çox laylılarının

optik və elektron xassələri həcmi kristalın xassələri ilə demək olar ki, eyni olur. Çox laylı və həcmi kristalın zonaları əsasən Γ nöqtəsi ətrafında güclü parçalanma göstərir. Lakin, K nöqtəsində kiçik təbəqələrarası qarşılıqlı təsir sayəsində K nöqtəsi yaxınlığında zonaların parçalanması kiçikdir. Van Hove sinqulyarlığı nəticəsində optik xassələrdə, $\epsilon^{xx_2}(\omega)$ -də uzun platolar meydana gəlir. Bu platoların başlanğıcında birlaylı, ikilaylı və dördlaylı strukturlar üçün müvafiq olaraq bir, iki və dörd kiçik pillələr meydana çıxır. Layların sayı artdıqca kiçik pillələrin sayı artır, eni isə qısalır. Layların sayı artdıqca bu pillələr demək olar ki, görünməz olurlar. $\epsilon^{xx_2}(\omega)$ -in enerji sərhəddində platolarının sonunda nə-

zərəcərpacaq qırmızı sürüşmə müşahidə olunur, çünki təbəqələrin sayının artması K nöqtəsi yaxınlığında bir-başa enerji keçidlərində kiçik dəyişikliklərə səbəb olur (zəif təbəqələrarası qarşılıqlı təsir sayəsində). Daha güclü təbəqələrarası qarşılıqlı təsir sayəsində Γ nöqtəsinə daha güclü dəyişmələr baş verir. Nəticələr göstərir

ki, monolay və çoxlaylı MoS₂ üçün elektron və optik xassələr kəskin fərqlənir. Amma, çoxlaylı MoS₂ kristalları arasındakı fərqlər zəif fərqləndir. Alınan nəticələr optoelektronika cihazlarının hazırlanması üçün vacib olan MoS₂-nin çoxlaylı kristallarının elektron və optik xassələrinin tədqiqində istifadə oluna bilər.

- [1] S.K. Srivastava, B.N. Avasthi. 1993, Preparation and characterization of molybdenum disulphide catalysts. *J Mater Sci* 28:5032–5035.
- [2] J. Chen, N. Kuriyama, H.Yuan, H.T.Takeshita, T. Sakai. 2001, Electrochemical hydrogen storage in MoS₂ nanotubes. *J Am Chem Soc* 123:11813–11814
- [3] L.Ye, C.Z. Wu, W. Guo, Y. Xie. 2006, MoS₂ hierarchical hollow cubic cages assembled by bilayers: one-step synthesis and their electrochemical hydrogen storage properties. *Chem Commun* 45:4738–4740.
- [4] K.F. Mak, C. Lee, J. Hone, J. Shan, T.F. Heinz. 2010, Atomically thin MoS₂: a new direct-gap semiconductor. *Phys Rev Lett* 105:136805.
- [5] A. Kuc, N. Zibouche, T. Heine. 2011, Influence of quantum confinement on the electronic structure of the transition metal sulfide TS₂. *Phys Rev B* 83:245213.
- [6] P.D. Fleischauer, J.R. Lince, P.A. Bertrand, R. Bauer. 1989, Electronic structure and lubrication properties of MoS₂: A Qualitative molecular orbital approach. *Langmuir* 5:1009–1015.
- [7] J.M. Martin, C. Donnet, Le Mogne T, T. Epicier. 1993, Superlubricity of molybdenum disulphide. *Phys Rev B* 48:10583–10586.
- [8] K.S. Novoselov, D. Jiang, F. Schedin, T.J. Booth, V.V. Khotkevich, S.V. Morozov, A.K.Geim. 2005, Two-dimensional atomic crystals. *Proc Natl Acad.Sci U S A*, 102:10451–10453
- [9] E. Benavente, M.A. Santa Ana, F. Mendizábal, G. González. 2002, Intercalation chemistry of molybdenum disulfide. *Coordin Chem Rev* 224:87–109.
- [10] R.W.G. Wyckoff. *Crystal Structures*, v. 1, 1963, 280–281, Interscience Publishers, New York, 1963
- [11] K.K. Kam, B.A. Parkinson. 1982, Detailed photocurrent spectroscopy of the semiconducting group VI transition metal dichalcogenides. *J Phys Chem* 86:463–467.
- [12] A.H. Reshak, S. Auluck. 2003, Calculated optical properties of 2H- MoS₂ intercalated with lithium. *Phys Rev B*, 68:125101
- [13] Li XD, Yu S, Wu S.Q, Wen Y.H, Zhou S, Z.Z Zhu. 2013, Structural and electronic properties of superlattice composed of graphene and monolayer MoS₂. *J Phys Chem C* 117:15347–15353.
- [14] P. Hohenberg, W. Kohn. *Phys. Rev. B* 136, 3B, 864 (1964).
- [15] P. Blaha, K. Schwarz, G.K.H. Madsen, D. Kvasnicka, J. Luitz. WIEN2k, An Augmented Plane Waves+Local Orbitals Program for Calculating Crystal Properties, rev. ed. Vienna University of Technology, Vienna 2008.
- [16] O.K. Andersen. *Phys. Rev. B* 12, 8, 3060, 1975.
- [17] J.P. Perdew, A. Zunger. *Phys. Rev. B* 23, 10, 5048, 1981.

Z.A. Jahangirli, N.A. Abbasova

DEPENDENCE OF THE ELECTRONIC STRUCTURE OF A MoS₂ CRYSTAL ON INTERLAYER INTERACTION

The electronic and optical properties of bulk and multilayer MoS₂ crystals were studied by the density functional method. The calculation results show that the covalency and ionicity of the MoS₂ monolayer are enhanced due to the quantum size effect. As the number of layers increases, the quantum size effect and intralayer interactions decrease, and interlayer interactions increase, which leads to a decrease in the band gap.

З.А. Джахангирли, Н.А. Аббасова

ЗАВИСИМОСТЬ ЭЛЕКТРОННОЙ СТРУКТУРЫ КРИСТАЛЛА MoS₂ ОТ МЕЖСЛОЕВОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ

Электронные и оптические свойства объемных и многослойных кристаллов MoS₂ исследованы методом функционала плотности. Результаты расчетов показывают, что ковалентность и ионность монослоя MoS₂ усиливаются за счет эффекта квантового размерного эффекта. С увеличением числа слоев квантовый размерный эффект и внутрислойные взаимодействия уменьшаются, а межслойные взаимодействия увеличивается, что приводит к уменьшению ширины запрещенной зоны.