

Badania ab initio właściwości dynamicznych struktur warstwowych na bazie dichalkogenków metali przejściowych

Tomasz Woźniak¹, Paweł Scharoch¹, Joanna Jadczyk², Arkadiusz Wójs¹

¹ *Katedra Fizyki Teoretycznej, Wydział Podstawowych Problemów Techniki, Politechnika Wroclawska, wyb. Wyspiańskiego 27, 50-370 Wrocław*

² *Katedra Fizyki Doświadczalnej, Wydział Podstawowych Problemów Techniki, Politechnika Wroclawska, wyb. Wyspiańskiego 27, 50-370 Wrocław*

W ostatnich latach dichalkogenki metali przejściowych (TMDC) budzą niegasnące zainteresowanie badaczy ze względu na nadzwyczajne właściwości elektroniczne i optyczne [1, 2]. Ich kwazi-dwuwymiarowy charakter powoduje anizotropię właściwości fizycznych, które to wiedzą do licznych zastosowań technologicznych. Ponadto mieszane kryształy warstwowe pozwalają m.in. na ciągłą zmianę przerwy optycznej, dzięki czemu stopy TMDC są potencjalnymi kandydatami do zastowań w nowoczesnych urządzeniach elektronicznych i optoelektronicznych. Stąd wynika potrzeba badań eksperymentalnych oraz analizy teoretycznej tych materiałów.

Przedstawione zostaną wyniki obliczeń charakterystyk dynamicznych litych kryształów i monowarstw atomowych związków MoS₂ i MoSe₂, a także kryształów mieszanych MoS_xSe_{2-x} w ramach teorii funkcjonału gęstości (DFT). Obliczenia dla kryształów mieszanych w funkcji składu x przeprowadzono w ramach metody superkomórkowej. Wyznaczone dyspersje i gęstości stanów fononowych są w dobrej zgodności ze zmierzonymi widmami Ramana [3]. Poprzez analizę rzutowanej na atomy gęstości stanów fononowych w punkcie Gamma wyjaśniono ewolucję położenia modów ramanowskich. Dodatkowo, została rozwinięta metoda odwijania superkomórkowych stanów fononowych [4]. Pozwala ona na uproszczenie skomplikowanych dyspersji fononowych w superkomórkach i bezpośrednie porównanie z wynikami pomiarów.

[1] Q.H. Wang, K. Kalantar-Zadeh, A. Kis, J.N. Coleman, M.S. Strano, *Nat. Nanotechnol.* **7**, 11 (2012).

[2] D. Jariwala, V.K. Sangwan, L.J. Lauhon, T.J. Marks, M.C. Tobin, *ACS Nano* **8**, 2 (2014).

[3] J. Jadczyk, D.O. Dumcenco, Y.S. Huang, Y.C. Lin, K. Suenaga, P.H. Wu, H.P. Hsu, K.K. Tiong, *J. Appl. Phys.* **116**, 193505 (2014).

[4] F. Zheng, P. Zhang, *Comput. Mater. Sci.* **125**, 218 (2016).