نشریه علمی

تحقیقات در علوم مهندسی سطح و نانومواد

سال ۲، شماره ۱، بهار ۱۴۰۲ ۴۱

بررسی خواص ساختاری، الکتریکی و مغناطیسی MoS_2 آلایش یافته با Co

مظفر کاظم ربیع [۱]، آزاده اعظمی [*۱]

[۱] گروه فیزیک، واحد اهواز، دانشگاه آزاد اسلامی، اهواز، ایران

چکیده

در این مقاله خواص ساختاری و الکترونی ترکیبات MoS_2 و MoS_2 آلایش یافته با Co در دو حالت غیر مغناطیسی و مغناطیسی در چارچوب نظریهٔ تابعی چگالی با کد محاسباتی کوانتوم اسپرسو در دو تقریب تبادلی همبستگی شیب تعمیم یافته بررسی شد. همچنین چگالی موضعی از نوع بار پایسته مورد بررسی قرار گرفت. مقایسه ثابت‌های شبکه، محاسبه شده با سایر نتایج گزارش شده همخوانی داشته است. نتایج حاصل از ساختار نواری و چگالی حالت‌ها برای ترکیب MoS_2 خاصیت نیم-رسانایی را نشان داده است. ساختار نواری و چگالی حالت‌ها برای ترکیب MoS_2 آلایش یافته با Co در حالت غیر مغناطیسی خاصیت فلزی و در حالت مغناطیسی خاصیت فرو مغناطیس ضعیف و ماهیت فلزی را نشان داده است. چگالی حالت‌های جزئی برای ترکیب MoS_2 نقش اربیتال d اتم مولیبدن و اربیتال p اتم گوگرد را نشان می‌دهد و برای MoS_2 آلایش یافته با Co نقش اربیتال d اتم کبالت و اربیتال d اتم مولیبدن و اربیتال p اتم گوگرد را نشان داده است. برای مقایسه خواص ساختاری، ساختار ترکیب MoS_2 بعد از آلایش با Co از ساختار هگزاگونال به ساختار تترا گونال تبدیل می‌شود. نتایج با کارهای پیشین سازگار بوده است.

واژه‌های کلیدی: *کوانتوم اسپرسو، Co ،MoS_2 چگالی حالات کلی و جزئی، ساختار نواری.*

تاریخ دریافت: ۱۴۰۲/۰۲/۰۹

تاریخ پذیرش: ۱۴۰۲/۰۳/۱۸

Investigating the structural, electrical and magnetic properties of MoS_2 doped with Co

Muthafer Kazem Rabie [1], Azadeh Aezami [*1]

[1] *Departments of Physics, Ahvaz Branch, Islamic Azad University, Ahvaz, Iran.*

Abstract

In this paper, the structural and electronic properties of MoS_2 and MoS_2 compounds doped with cobalt in two non-magnetic and magnetic states are investigated in the framework of the density functional theory with the Espresso quantum computing code in two exchange approximations of the generalized slope correlation and the local density of the constant charge type. The lattice constants were calculated and compared and were consistent with the results. The band structure and density of states for the MoS_2 compound showed semiconducting properties. The band structure and density of states for the cobalt-doped MoS_2 compound in the non-magnetic state showed metallic properties. The band structure and density of states for the cobalt-doped MoS_2 composite in the magnetic state with cobalt showed weak ferromagnetism and metallic nature. The density of partial states for the composition of MoS_2 shows the role of d orbital of molybdenum atom and p orbital of sulfur atom, and for MoS_2 doped with cobalt, it shows the role of d orbital of cobalt atom, d orbital of molybdenum atom and p orbital of sulfur atom, which is consistent with the results of others. To compare the structural properties of the two structures, the MoS_2 compound changes from the hexagonal structure to the tetragonal structure after doping with cobalt. The results are consistent with previous works.

Keywords: *Quantum Espresso, Co, MoS_2, Density of state, Band structure*

Received: 29/04/2023

Accepted: 08/06/2023

[*] نویسنده مسئول: آزاده اعظمی

نشانی: اهواز، گروه فیزیک، واحد اهواز، دانشگاه آزاد اسلامی

پست الکترونیکی : a.aezami@gmail.com

۱. مقدمه

بررسی شده‌ترین عضو خانواده دی‌کالکوژنید[1] فلزات واسطه (TMD)، دی‌سولفیدمولیبدن (MoS_2) است که به‌دلیل خواص منحصر به فردش توجه گسترده‌ای را برای انواع کاربردهای نسل بعدی دستگاه‌های الکتریکی و نوری به‌خود جلب کرده است. این ماده دارای ساختار بلوری متشکل از پیوند کووالانسی است که توسط نیروهای ضعیف واندروالس به یکدیگر متصل شده‌اند. از آن‌جایی که MoS_2 دارای انعطاف مکانیکی بالا و استحکام شکستگی است، دستگاه‌های ساخته شده بر این اساس اصولاً می‌توانند بر روی بسترهای انعطاف پذیر اجرا شوند [۱]. Mn، Fe، Co، Zn و $Fe\text{-}X_6$ آلایش شده به تک لایهٔ MoS_2 به عنوان نیم-رساناهای مغناطیسی رقیق شده دو بعدی پیش‌بینی می‌شوند [۲]. از آن‌جایی که جاینشانی رقیق در آزمایش‌ها دشوار است، لازم است راه‌های دیگری برای معرفی مغناطیس در تک لایه MoS_2 یافت شود. اثر مجاورت مغناطیسی [۳]، تزریق اسپین از یک الکترود فرومغناطیسی با قطبش اسپین بالا (FM) روش امیدوارکننده‌ای به‌نظر می‌رسد. رابطهای Fe_4N/MoS_2 و Gd/MoS_2 مورد بررسی قرار گرفته [٤]، نتایج نشان می‌دهد که قطبش اسپین در MoS_2 توسط لایه های فرومغناطیسی القا شده است. از سوی دیگر گزارش شده است که Fe و Co منابع الکترون‌های قطبی شده اسپین[2] هستند [٥]. مواد فرومغناطیسی جایگزین و اکسیدهای نیم-رسانای فرومغناطیسی نیز به دلیل قطبش اسپین بالا، پایداری محیطی و تزریق کارآمد اسپینی، می‌توانند منابع تزریق اسپینی باشند [٦]. MoS_2 خالص یک نیم‌رسانا با گاف نواری مستقیم است که مقدار تقریبی آن ۱٫۷۰ eV است. برای MoS_2 آلایش شده مانند(۱٫۰۱ eV) $Ti\text{-}MoS_2$ (۱٫۱۰ eV)، $Ni\text{-}MoS_2$ و (۱٫۰۱ eV)($Pd\text{-}MoS_2$) که نیم‌رساناهایی با گاف نواری مستقیم هستند، در حالی که (۱٫۳۹ eV) $Pt\text{-}MoS_2$ یک نیم-رسانا با گاف نواری غیرمستقیم است. انرژی فرمی MoS_2 خالص ۱٫۹۰ eV تخمین زده شده است. زمانیکه MoS_2 خالص با یک اتم TM آلایش داده شود، انرژی فرمی تغییر می‌کند. هنگامی که سطح فرمی به سمت مثبت تغییر کند، MoS_2 آلایش شده با TM یک نیم‌رسانای نوع n است که غلظت الکترون بیشتری نسبت به غلظت حفره دارد. هنگامی که مقدار سطح فرمی به سمت منفی تغییر می‌کند، MoS_2 آلایش شده با TM تبدیل به یک نیم‌رسانای نوع p می‌شود که غلظت الکترون کمتری نسبت به غلظت حفره دارد. برای مثال، پس از آلایش با اتم TM مانند $Ti\text{-}MoS_2$، $Pt\text{-}MoS_2$ و $Ni\text{-}MoS_2$ به یک نیم‌رسانای نوع n تبدیل می‌شوند در حالی که $Pd\text{-}MoS_2$ به یک نیمه‌هادی نوع p تبدیل می‌شود [۷]. دنگ[3] و همکاران در سال ۲۰۱۹ در یک مطالعه بر حسب تئوری تابعی چگالی (DFT)، بررسی خواص الکترونیکی MoS_2 تک لایهٔ خالص و فلزات انتقالی مختلف (Ni، Pt، Ti و Pd) آلایش شده با MoS_2 را انجام دادند. مشخص شد که انرژی جذب CH_2O (۰٫۱۱ eV) روی تک لایهٔ MoS_2 بسیار ضعیف است، که نشان می‌دهد MoS_2 خالص نسبت به فرمالدئید (CH_2O) حساس نیست. با این حال، تک لایهٔ $TM\text{-}MoS_2$ میل نسبتاً بالایی در جذب CH_2O را نشان می دهد. بنابراین آلایش TM می‌تواند به طور قابل ملاحظه‌ای حساسیت نسبت به CH_2O را بهبود بخشد. به منظور بررسی مکانیسم جذب، خواص الکترونیکی مانند چگالی حالت‌های پیش‌بینی‌شدهٔ مولکولی و انتقال بار محاسبه شده است و نتایج نشان داد که جذب روی تک لایه $Ti\text{-}MoS_2$ (۱٫۵۹ eV) با پایدارترین جذب بسیار امیدوارکننده است[۸].

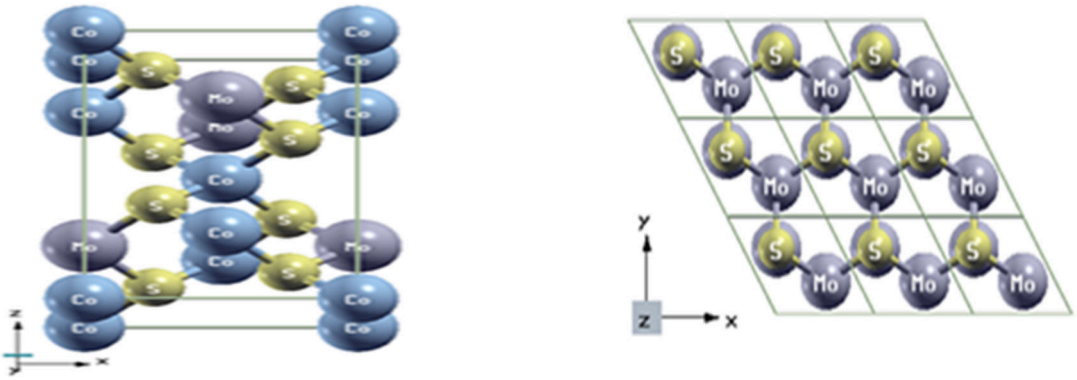
لی[4] و همکاران در سال ۲۰۲۲ در مطالعه‌ای با عنوان " کاهش مقاومت تماسی و تقویت عملکرد دستگاه تک لایه MoS_2 توسط آلایش موضعی Fe" به این نتیجه رسیدند که نیم-رساناهای دوبعدی به‌عنوان نامزدهای قابل قبولی برای نسل بعدی نانوالکترونیک برای مقابله با چالش مقیاس ترانزیستورها ظاهر می‌شوند. نیم‌رساناهای دو بعدی در مقیاس ویفر، مانند MoS_2 و WS_2، اخیراً با موفقیت سنتز شده‌اند. در این مطالعه MoS_2 آلایش شده با Fe و فیلم‌هایی به اندازه سانتی‌متر روی SiO_2/Si با روش رسوب بخار

[1] dichalcogenides
[2] Spin-Polarized electrons
[3] Deng
[4] Li

شیمیایی یک مرحله‌ای سنتز شدند. دستیابی به دامنه‌های تک‌لایه‌ای MoS_2 آلایش شده با Fe روی یاقوت کبود تجاری صفحهٔ ۲ اینچی امکان سنتز نیم‌رساناهای تک بلوری دوبعدی در مقیاس ویفر را فراهم می‌کند. عملکرد عالی تک‌لایهٔ Fe-MoS_2 با تحرک الکترون فوق‌العاده بالا و نسبت جریان روشن/خاموش، به لطف کیفیت بلوری بالا و جایگاه آلایش مناسب تأیید شده است. با ترکیب محاسبات DFT و اندازه‌گیری‌های انتقال الکتریکی وابسته به دما، مقاومت تماس فوق‌العاده کم و سد انرژی صفر در تک لایهٔ Fe-MoS_2 به دلیل هم‌ترازی نوار مناسب و جرم مؤثر الکترون نشان داده شده‌اند. چنین نتایجی پیشرفتی را به سوی سنتز کنترل‌شدهٔ نیم رساناهای دوبعدی به اندازهٔ سانتی‌متر و الگوی جدیدی برای بهبود عملکرد دستگاه‌های الکترونیکی تک‌لایه با فناوری آلایش یافته ارائه می‌کند[۹]. در این پژوهش، ساختار الکترونیکی و مغناطیسی ترکیب Co/MoS_2را با محاسبات ابتدا به ساکن[1] با استفاده از نظریهٔ تابعی چگالی و روش شبه پتانسیل با کد محاسباتی کوانتوم اسپرسو مطالعه شده است. همچنین مغناطیس و ساختارهای الکترونیکی وابسته به اسپین به‌طور سیستماتیک مورد مطالعه قرار می‌گیرند.

۲. روش انجام محاسبات

در این تحقیق محاسبات با استفاده از روش امواج تخت با شبه پتانسیل فوق نرم در چارچوب نظریه‌ی تابعی چگالی با نرم افزار کوانتوم اسپرسو انجام شده است [۱۰]. همچنین در محاسبات تابعی تبادلی همبستگی از تقریب‌های LDA و GGA استفاده شده است. بهینه‌سازی و بررسی خواص ترکیب MoS_2 و MoS_2 آلایش یافته با Co در حالت‌های غیرمغناطیسی و فرومغناطیس پس از بهینه‌سازی‌های اولیه بدست آمد. شبیه‌سازی ساختار دو ترکیب با نرم‌افزار Xcrysden انجام گرفت. در این تحقیق ترکیب MoS_2 با ساختار هگزاگونال با گروه فضایی ($P_{63}mmc$) و گروه نقطه‌ای D_{6h} و ترکیب MoS_2 آلایش یافته با Co با ساختار تتراگونال و ثابت‌های شبکه ترکیبات به‌ترتیب برابر a= ۳/۱۹۰۳ و c= ۱٤/۸۷۹۰ و a= ۵/۰٤٦۷ و c= ۱۰/۳۱۰۱ آنگستروم شبیه‌سازی شده است. ساختارهای شبیه‌سازی شده ترکیب MoS_2 و ترکیب MoS_2 آلایش یافته با Co در شکل ۱ نشان داده شده است.



الف ب

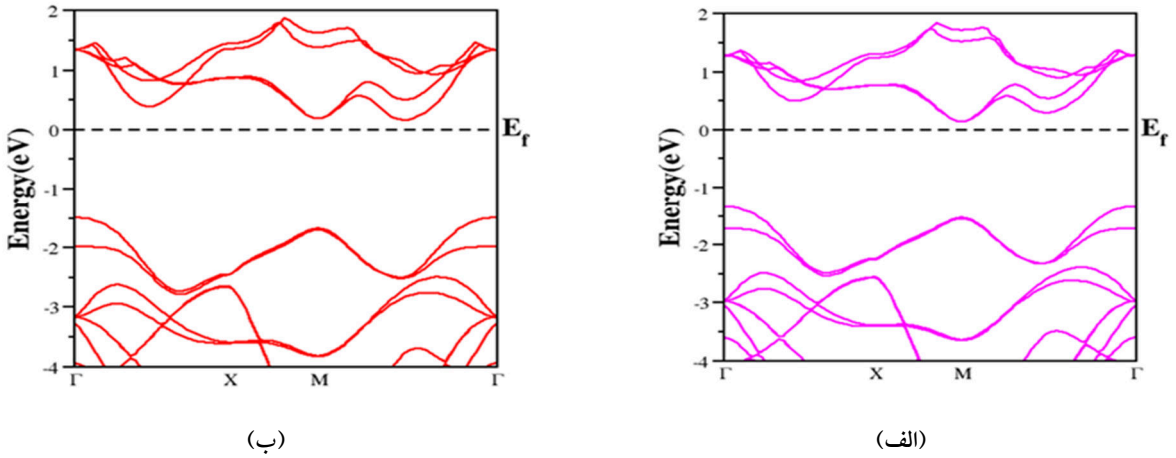
شکل ۱- (الف) ساختار شبیه‌سازی شده ترکیب MoS_2 در فاز هگزاگونال. (ب) ساختار شبیه‌سازی شده ترکیب MoS_2 آلایش یافته باCo.

۳. بحث و نتایج

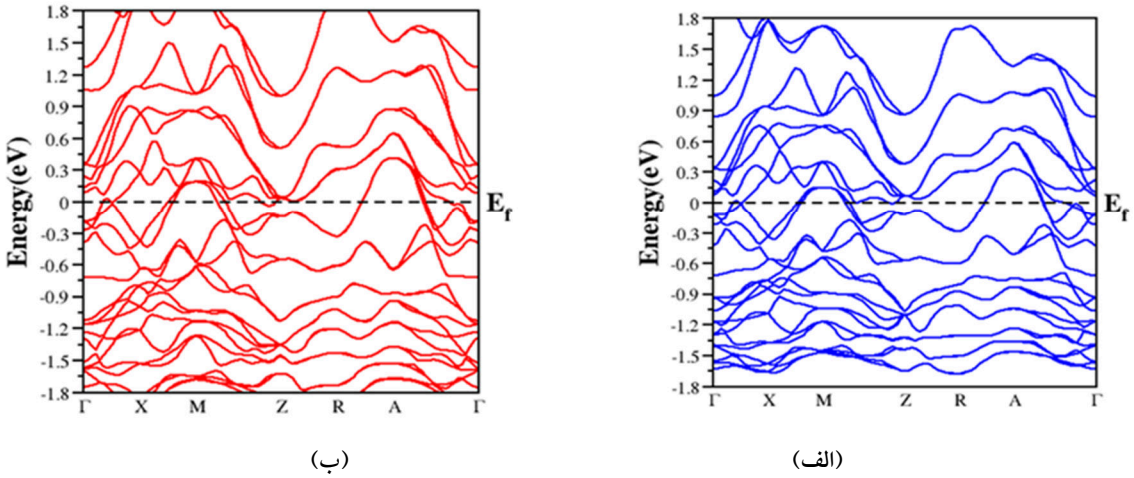
با در اختیار داشتن پارامترهای ضروری بهینه‌شده ، به محاسبه و بررسی خواص الکترونی ترکیب MoS_2 از جمله ساختار نواری و چگالی حالت‌های الکترونی کلی و جزئی پرداخته می‌شود. با توجه به شکل (۲ الف و ب) ترازهای رسانش و ظرفیت هیچ یک تراز فرمی را قطع نمی‌کنند و این بیانگر خاصیت نیم‌رسانایی ترکیب MoS_2 در حالت انبوهه می‌باشد، زیرا ترکیب دارای گاف ممنوعه بوده است. مقادیر گاف-نواری محاسبه شده در دو تقریب GGA و LDA به ترتیب

[1] Ab initio

برابر با ۲/۷۳و ۲/۸۲ الکترون‌ولت است [۱۱]. در ادامه زمانی که Co وارد ساختار MoS_2 می‌شود ساختار نواری آن را در شکل (۳ الف و ب) رسم نموده و مشاهده می‌شود که ترازهای انرژی تراز فرمی را قطع نموده پس ترکیب دارای گاف ممنوعه نبوده و ماهیت فلزی دارد. از دو شکل (۲) و (۳) نتیجه می‌گیریم که بعد از آلایش MoS_2 با Co ترکیب از حالت نیم‌رسانایی به سمت فلزی می‌رود. در ادامه در شکل (٤) تاثیر این آلایش را بر خواص مغناطیسی ترکیب بررسی نموده و مشاهده می‌شود که اسپین‌های بالا و پایین به صورت خیلی جزئی باهم اختلاف دارند و ترکیب گافی ندارد و این نشان دهنده خاصیت فرومغناطیسی خیلی ضعیف ترکیب است. در نتیجه که آلایش MoS_2 با کبالت خاصیت غیرمغناطیسی MoS_2 به فرومغناطیس ضعیف تبدیل می‌شود و همچنان گافی مشاهده نمی‌شود با کارهای پیشین سازگاری دارد [۱۲].

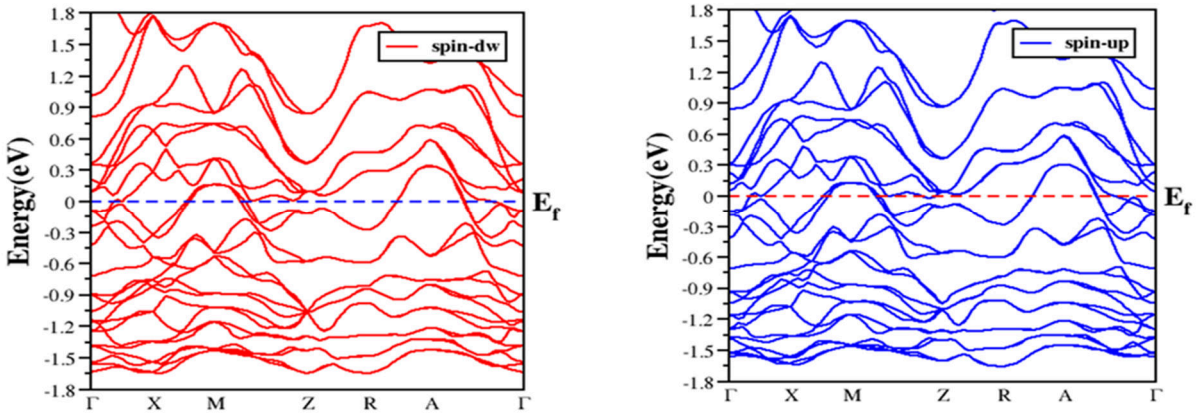


شکل ۲- ساختار نواری ترکیب MoS_2 در فاز هگزاگونال. الف: تقریب GGA و ب: تقریب LDA.



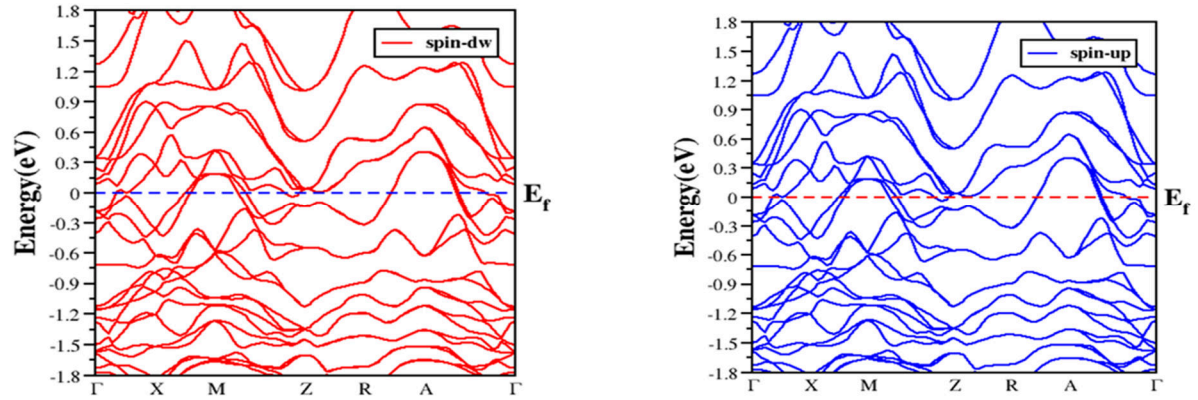
شکل ۳– ساختار نواری ترکیب MoS_2 آلایش یافته با Co در فاز تتراگونال. الف: تقریب GGA و ب: تقریب LDA.

تمرکز حالت‌های الکترونی در یک بازهٔ انرژی (یک نوار) همان چگالی حالت‌ها محسوب می‌شود. با رسم نمودار چگالی حالت‌های مختلف بر حسب انرژی می‌توان به چگونگی مشارکت اتم‌ها (به طور خاص اربیتال‌های مختلف در نوارهای رسانش و ظرفیت) در ساختار نواری پی‌برد. این نمودارها گاف‌انرژی را نیز که پیش‌تر در ساختار نواری بدست آمده بود، نشان می‌دهند. هم‌چنین نوع پیوندهای اتمی (یونی یا کوالانسی یا هر دو) نیز از این نمودارها قابل تشخیص است.



شکل ٤- ساختار نواری ترکیب MoS_2 آلایش یافته با Co در حالت فرومغناطیس فاز تتراگونال تقریب GGA

در شکل (٥) تاثیر آلایش Co را بر خواص مغناطیسی ترکیب MoS_2 بررسی نموده مشاهده می‌شود که اسپین‌های بالا و پایین به صورت خیلی جزئی با هم اختلاف دارند و ترکیب گافی ندارد و این نشان دهنده خاصیت فرومغناطیسی خیلی ضعیف ترکیب است پس می‌توان نتیجه گرفت که با آلایش MoS_2 با کبالت خاصیت غیرمغناطیسی MoS_2 به فرومغناطیس ضعیف تبدیل می‌شود و همچنان گافی مشاهده نمی‌شود با کارهای پیشین سازگاری دارد [۱۲].

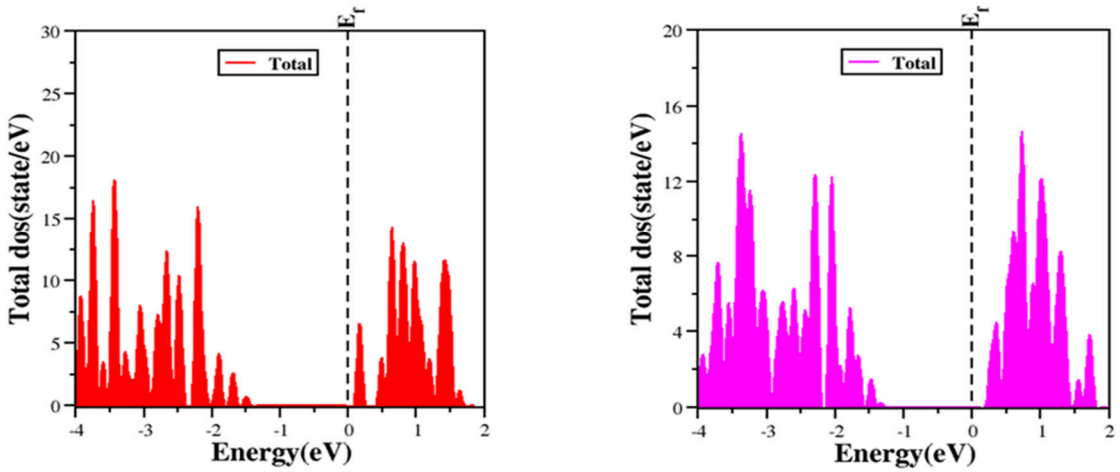


شکل ٥- ساختار نواری ترکیب MoS_2 آلایش یافته با Co در حالت فرومغناطیس فاز تتراگونال تقریب LDA.

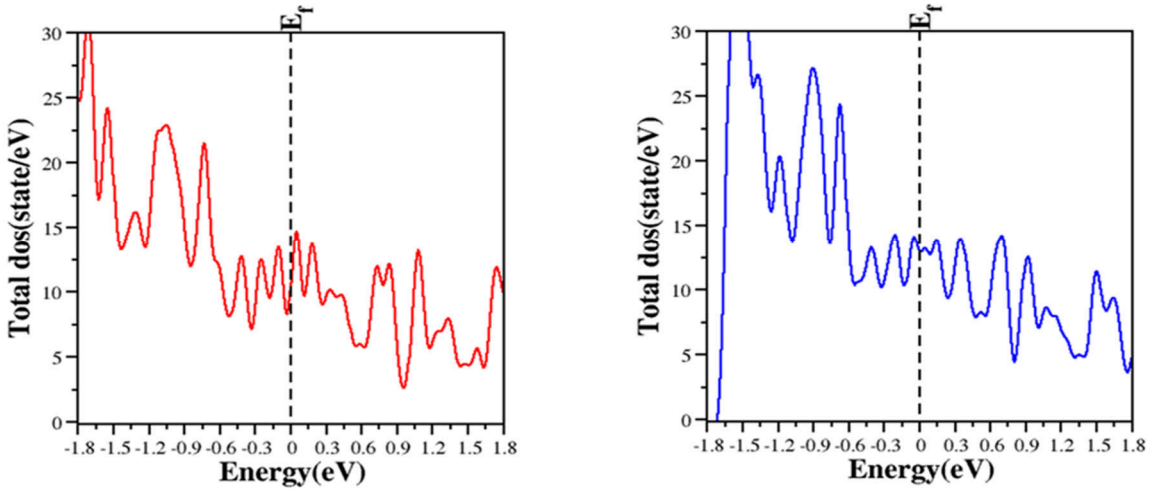
در شکل‌های (٦) و (٧) نمودارهای چگالی حالت‌های کلی انرژی برای ترکیب‌های MoS_2 و MoS_2 آلایش یافته با Co در حالت‌های غیر مغناطیسی و فرومغناطیس نشان داده شده است. با توجه به شکل (٦ الف و ب) برای ترکیب MoS_2 ترازهای انرژی، تراز فرمی را قطع نکرده و گاف ممنوعه‌ای مشاهده شده است مقادیر گاف نواری محاسبه شده از روی نمودار چگالی حالت‌ها برای دو تقریب GGA و LDA به ترتیب برابر با ۱/۳۵و ۱/٤۲ الکترون‌ولت است که نشان دهندهٔ ماهیت نیم‌رسانایی MoS_2 می‌باشد. در حالیکه این میزان با گاف محاسبه شده از ساختار نواری اختلاف زیادی داشته و گاف چگالی حالت ها به نتایج کارهای دیگر نزدیکتر بوده است [۱۱].

با توجه به شکل (۸) نمودارهای چگالی حالت تراز فرمی را قطع کرده‌اند و هیچگونه گافی مشاهده نشده است که نشان دهندهٔ ماهیت فلزی ترکیب MoS_2 آلایش یافته با Co می‌باشد که با نتایج ساختار نواری همخوانی دارد. در نتیجه ترکیب MoS_2 بعد از آلایش با کبالت ماهیت نیم‌رسانایی خود را از دست داده و ماهیت فلزی به خود می‌گیرد. نتیجه بررسی حالت فرومفناطیسی را برای ترکیب MoS_2 آلایش یافته با Co به این صورت است که نمودار چگالی حالت‌ها در حالت عادی اسپین بالا و پایین شباهت زیادی با یکدیگر داشته و اختلاف اندکی مشاهده شده است ولی گاف نواری قابل توجهی مشاهده نشده است. در این حالت نیز ترکیب MoS_2

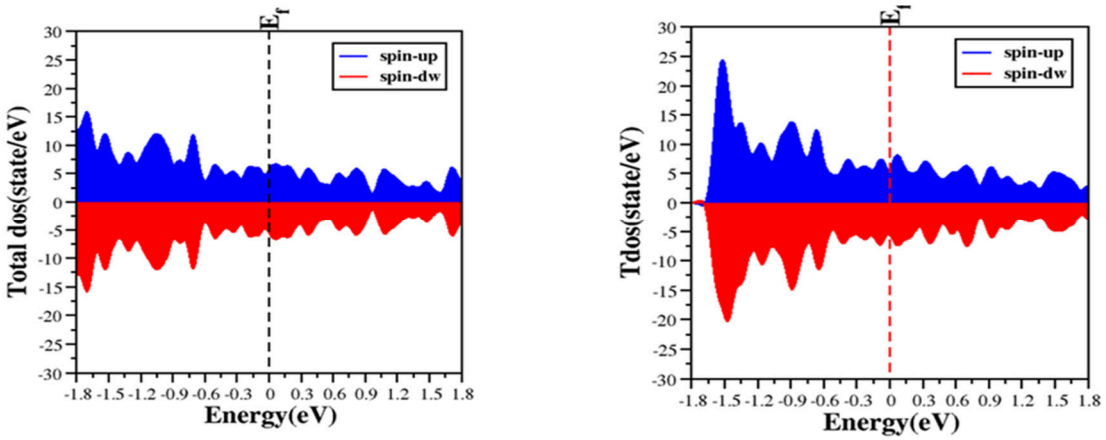
آلایش یافته با Co فرومغناطیس ضعیف با ماهیت فلزی می-باشد. چگالی حالت‌های جزئی انرژی برای ترکیب‌های MoS_2 و MoS_2 آلایش یافته با Co در حالت‌های غیر-مغناطیسی و فرومغناطیس را نیز محاسبه کردیم که نتایج محاسبات نشان می‌دهد اربیتالی که نقش بسیار مهمی در چگالی حالت کلی در اطراف تراز فرمی دارد برای ترکیب MoS_2 دارد اربیتال d اتم مولیبدن می باشد و بعد از آن اربیتال p اتم گوگرد بوده است که با نتایج کارهای پیشین سازگاری دارد[۱۱]. همچنین با توجه به نتایج محاسبات چگالی حالت‌های انرژی کلی و جزئی اربیتالی که نقش بسیار مهمی در چگالی حالت کلی در اطراف تراز فرمی ترکیب MoS_2 آلایش یافته با کبالت دارد اربیتال d اتم کبالت می‌باشد به این صورت که آلایش اربیتال d اتم کبالت بر اربیتال d اتم مولیبدن غالب شده است و سپس اربیتال d اتم کبالت، اربیتال d اتم مولیبدن و بعد از آن اربیتال p اتم گوگرد نقش دارند.



شکل ٦- چگالی حالت‌های کلی انرژی ترکیب MoS_2 در فاز هگزاگونال. الف: تقریب GGA و ب: تقریب LDA.



شکل ۷- چگالی حالت‌های کلی انرژی ترکیب MoS_2 آلایش یافته با Co در فاز تتراگونال. الف: تقریب GGA و ب: تقریب LDA.



(ب) (الف)

شکل ۸- چگالی حالت‌های کلی انرژی ترکیب MoS_2 آلایش یافته با Co در حالت فرومغناطیس فاز تتراگونال. الف: تقریب GGA و ب: تقریب LDA.

٤. نتیجه‌گیری

ساختار نواری و چگالی حالتهای ترکیبات MoS_2 و MoS_2 آلایش یافته با Co در دو حالت غیرمغناطیسی و مغناطیسی محاسبه گردید. ساختار نواری برای MoS_2 ماهیت نیم-رسانایی را در دو تقریب GGA و LDA نشان می‌دهد، گاف محاسبه شده ساختار نواری مقادیر کمتر و نزدیک‌تر به کارهای پیشین را نشان می‌دهد. چگالی حالتهای جزئی نقش مهم اربیتال d اتم مولیبدن را در چگالی حالت‌ها نشان می-دهد. ساختار نواری برای MoS_2 آلایش یافته با کبالت در حالت مغناطیسی و غیر مغناطیسی ماهیت فلزی را در دو تقریب GGA و LDA را نشان می‌دهد. چگالی حالت‌های جزئی برای MoS_2 آلایش یافته با Co در حالت غیر-مغناطیسی نقش اربیتال d اتم Co را به صورت نقش مهم و بعد از آن اربیتال d اتم مولیبدن را نشان می‌دهد. خواص ساختاری ترکیب MoS_2 بعد از آلایش با Co از ساختار هگزاگونال به ساختار تتراگونال تبدیل می‌شود و خواص الکترونی ترکیب MoS_2 بعد از آلایش با کبالت از ماهیت نیم‌رسانایی به فلزی تبدیل شده و از حالت غیرمغناطیسی به حالت فرومغناطیس ضعیف تبدیل شده است. نتایج با کارهای پیشین سازگاربوده است.

سپاسگزاری

نویسندگان این مقاله از دانشگاه آزاد اسلامی اهواز کمال تشکر و سپاسگزاری را جهت فراهم آوردن شرایط مناسب جهت انجام این تحقیق را دارند.

مرجع‌ها

[1] D. Dumcenco, D. Ovchinnikov, K. Marinov, P. Lazic, M. Gibertini, N. Marzari, et al., "Large-area epitaxial monolayer MoS_2," *ACS nano*. **9** (2015) 4611-4620.

[2] N. N. Hieu, V. V. Ilyasov, T. V. Vu, N. A. Poklonski, H. V. Phuc, L. T. Phuong, et al., "First principles study of optical properties of molybdenum disulfide: From bulk to monolayer," *Superlattices and Microstructures*. **115** (2018) 10-18.

[3] S. Eremeev, V. Men'Shov, V. Tugushev, P. M. Echenique, and E. V. Chulkov, "Magnetic proximity effect at the three-dimensional topological insulator/magnetic insulator interface," *Physical Review B*. **88** (2013) 144430.

[4] X. Ma, X. Zhao, and T. Wang, "Effect of strain on the electronic and magnetic properties of an Fe-doped WSe 2 monolayers," *RSC advances*. **6** (2016) 69758-69763.

[5] S. Huang, R. Chang, T.-C. Leung, and C. T. Chan, "Cohesive and magnetic properties of Ni, Co, and Fe on W (100), (110), and (111) surfaces: A first-principles study," *Physical Review B*. **72** (2005) 075433.

[6] L. E. Hueso, J. M. Pruneda, V. Ferrari, G. Burnell, J. P. Valdes-Herrera, B. D. Simons, et al., "Transformation of spin information into large electrical signals using carbon nanotubes," *Nature*. **445** (2007) 410413

[7] N. Singh and U. Schwingenschlögl, "A route to permanent valley polarization in monolayer MoS2," Advanced Materials. 29 (2017) 1600970.

[8] C. e. N. e. R. Rao, A. e. K. Sood, K. e. S. Subrahmanyam, and A. Govindaraj, "Graphene: the new two-dimensional nanomaterial," *Angewandte Chemie International Edition*. **48** (2009) 7752-7777.

[9] H. Li, M. Cheng, P. Wang, R. Du, L. Song, J. He, et al., "Reducing Contact Resistance and Boosting Device Performance of Monolayer MoS_2 by In Situ Fe Doping," *Advanced Materials*. **34** (2022) 220088.

[10] P. Giannozzi, S.Baroni, et al; Matteo Calandra; "QUANTUM ESPRESSO: a Modular and OpenSource Software Project for Quantum Simulations of Materials"; *J. Phys. Condens. Matt*, **21** (2009).

[11] L. Wei, C. Jun-fang, H. Qinyu, and W. Teng, "Electronic and elastic properties of MoS_2," *Physica B: Condensed Matter*. **405** (2010) 2498-2502.

[12] M. Yin, X. Wang, W. Mi, and B. Yang, "First principles prediction on the interfaces of Fe/MoS_2, Co/MoS_2 and $Fe3O_4$/MoS_2," *Computational Materials Science*. **99** (2015) 326-335.