

محاسبات ابتدا به ساکن آنتالپی و تأثیر فشار بر خواص الکترونی، الکتریکی و مغناطیسی

ترکیب MoS_2 ایثار کریم مناحی^۱، آزاده اعظمی^{*}، محمد معرفی رمیله^۱^۱ گروه فیزیک، واحد اهواز، دانشگاه آزاد اسلامی، اهواز، ایران**First principle calculations to determine enthalpy and the effect of pressure on electronic, electrical and magnetic properties of MoS_2 compound**Issar Karim Menahi¹, Azadeh Aezami^{* 1},
Mohammad Moarrefi romeileh¹¹ Department of Physics, Ahvaz Branch, Islamic
Azad University, Ahvaz, Iran.**Abstract**

In this research, we investigate the effects of pressure and enthalpy on the composition of molybdenum disulfide in the framework of the density functional theory and with the Espresso quantum code with flat waves and the exchange potential of the generalized slope approximation of the stationary charge. The lattice constants of the hexagonal structure of molybdenum disulfide compound were calculated and compared with other works and we have seen the agreement of the results. The electronic properties of the compound were plotted and calculated for comparison with pressure application. The band structure of molybdenum disulfide shows the semiconducting nature with a gap of about 2.27 electron volts, which is larger than the results of other researches. The density of states is plotted for the molybdenum disulfide compound and confirms the semiconducting nature of the compound. The gap obtained from the density of states is more consistent with the results of other works and its value is about 1.3 electron volts. It draws the density of partial states and shows the role of d orbital of molybdenum atom and p of sulfur atom in the overall state density. In the following, we apply different pressures, by applying constant positive pressures, the network increases, and first the bandgap decreases, then increases a little in energy, and then decreases again until the structure changes from a semiconducting nature to a metal, and by applying pressures. The lattice constant negativity is reduced and the bandgap is reduced, and in the same application of the initial pressures, it is out of the semiconducting nature and tends towards the metallic property.

Keywords: Quantum espresso code, MoS_2 , enthalpy, Density Functional theory, Density of state, band Structure**Received:** 15/01/2023**Accepted:** 27/02/2023**چکیده**

در کار حاضر به بررسی آثار فشار و آنتالپی بروی ترکیب دی‌سولفید مولیبدن در چارچوب نظریه تابعی چگالی و با کد کوانتوم اسپرسو با امواج تخت و پتانسیل تبادل تقریب شیب تعمیم یافته بار پایسته پرداخته شده است. خواص الکترونی ترکیب برای مقایسه با اعمال فشار رسم و محاسبه شد. ساختار نواری دی‌سولفید مولیبدن ماهیت نیم‌رسانایی را با گافی حدود ۲/۲۷ الکترون ولت را داد، که گاف به دست آمده بزرگتر از نتایج دیگر پژوهش‌ها بوده است. چگالی حالت‌ها برای ترکیب دی‌سولفید مولیبدن رسم شده است و ماهیت نیم‌رسانایی ترکیب را تأیید می‌کند. گاف به دست آمده از چگالی حالت‌ها با نتایج دیگر کارها سازگاری بیشتری دارد و مقدار آن حدود ۱/۳ الکترون ولت به دست آمده است. نتایج محاسبات چگالی حالات جزئی نشان داد که نقش اوربیتال d اتم مولیبدن و p اتم گوگرد بیشتر است. در ادامه فشارهای مختلف را اعمال شده است. با اعمال فشارهای مثبت ثابت شبکه افزایش می‌یابد و ابتدا گاف نواری کاهش سپس در یک انرژی کمی افزایش و در ادامه باز کاهش را دارد تا ساختار از ماهیت نیم‌رسانا به فلز تبدیل گردد. با اعمال فشارهای منفی ثابت شبکه کاهش و گاف نواری کاهش یافته و در همان اعمال فشارهای اولیه از ماهیت نیم‌رسانایی خارج و به سمت خاصیت فیزی میل کرده است.

واژه‌های کلیدی: کد کوانتوم اسپرسو، MoS_2 ، آنتالپی، نظریه تابعی

چگالی، چگالی حالات، ساختار نواری

تاریخ دریافت: ۱۴۰۱/۱۰/۲۵

تاریخ پذیرش: ۱۴۰۱/۱۲/۰۸

^{*} نویسنده مسئول: آزاده اعظمی

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

پست الکترونیکی: a.aezami@gmail.com

۱. مقدمه

در سال‌های اخیر، دی‌کالکوژنیدهای^۱ فلزات واسطه (TMD) به دلیل خواص مکانیکی، انتقالی و نوری جدیدشان مورد توجه قرار گرفته‌اند [۱]. یکی از تفاوت‌های عمده این مواد با گرافن این است که TMD ها دارای گاف نواری قابل توجهی در مقایسه با گاف نواری صفر در گرافن هستند، که این ویژگی TMD ها را برای توسعه دستگاه‌های الکترونیکی و نوری جدید جالب‌تر و مناسب‌تر می‌کند [۲]. h-BN، یک ماده دویبعدی لایه‌ای با گاف نواری پهن (۹/۵ الکترون‌ولت)، به دلیل سطح فوق‌العاده صاف، ثابت دی‌الکتریک پایین و پایداری حرارتی و مکانیکی بالا، به عنوان یک دی‌الکتریک دروازه‌ای برای دستگاه‌های الکترونیکی مبتنی بر گرافن، توجه زیادی را به خود جلب کرد. مشخص شد که دستگاه‌های الکترونیکی گرافنی با مساحت بزرگ ساخته شده بر روی بستر h-BN در مقایسه با دستگاه‌های الکترونیکی گرافنی روی بسترهای دی‌اکسید سیلیکون (SiO₂) تحرک حامل‌های بزرگ‌تر و عملکرد بهتر دستگاه را در پی داشته‌اند. TMD های تک لایه تا چند لایه با روش‌های مختلفی از جمله لایه برداری میکرومکانیکی با جدا کردن لایه‌های اتمی از بلورهای حجیم مربوطه، رسوب لایه روی لایه توسط فرآیند رسوب بخار شیمیایی^۲، داسازی لایه‌ها از طریق ترکیب لیتیوم و لایه برداری مایع لایه‌ها در حلال‌های آلی تحت فرآیند فراصوت تهیه شده‌اند. خواص مختلف TMD ها به تعداد لایه‌ها و نانو ساختارها و مورفولوژی آن‌ها بستگی دارد که برای دیدگاه‌های کاربردی مهم هستند. گرافن، اکسید گرافن (GO)، اکسید گرافن احیا شده (RGO)^۳ و نانوکامپوزیت‌های مبتنی بر آن‌ها با نانوذرات فلزی، پلیمرهای رسانا، پارچه‌ها، نانولوله‌های کربنی کربنات، اکسیدهای فلزی و غیره، برای ساخت دستگاه‌های الکترونیکی از جمله FET های انعطاف‌پذیر، نمایشگرها، دستگاه‌های حافظه، حسگرهای فشار، حسگرهای گاز و شیمیایی، حسگرهای زیستی، حسگرهای برچسب شناسایی

فرکانس رادیویی^۴، ابرخازن‌ها، سلول‌های خورشیدی، نانو-ژنراتورها، محافظ تداخل الکترومغناطیسی و باتری‌های لیتیومی قابل شارژ مورد مطالعه قرار گرفته‌اند. اگرچه انواع مشابهی از کاربردهای دستگاهی در فناوری‌های الکترونیک برای TMD های نازک اتمی در نظر گرفته شده است، TMD ها راه درازی در پیش دارند تا همتای مشابه آن‌چه برای مواد مبتنی بر گرافن در زمینه الکترونیک انعطاف‌پذیر انجام شده است، شوند [۲]. در طول دهه‌های گذشته در میان طیف متنوع TMD ها، پیشرفت سریعی در مطالعه لایه نازک MoS₂ به دلیل خواص عالی الکتریکی، نوری، مکانیکی و حرارتی آن، برای ادغام این خواص منحصر به فرد فیلم لایه نازک MoS₂ در نسل بعدی دستگاه‌های الکترونیک و الکترونیک نوری صورت گرفته است [۲]. به همین دلیل دی‌سولفیدمولیبدن در حال حاضر یکی از جالب‌ترین مواد برای کاربرد در دستگاه‌های نانو الکترونیکی و اپتوالکترونیکی به دلیل همین خواص جالب الکترونیکی، مکانیکی، حمل و نقل و نوری منحصر به فرد است. MoS₂ یکی از پایدارترین دی‌کالکوژنیدهای فلزات واسطه لایه‌ای است که با آرایش شش ضلعی گرافن مانند از اتم‌های Mo و S که در کنار هم قرار گرفته‌اند، تشکیل می‌شود تا ساندویچ‌های S-Mo-S را به صورت منشوری مثلثی هماهنگ کند (شکل ۱). ساختار S-Mo-S توسط نیروهای ضعیف واندروالس تشکیل شده است [۳]. انبوهه MoS₂ یک نیمه‌هادی لایه لایه با گروه فضایی (P63mmc) و گروه نقطه‌ای D6h است [۴]. دی‌سولفیدمولیبدن با ساختار شش-ضلعی یک ماده نیمه‌هادی مهم با خواص فیزیکی و شیمیایی منحصر به فرد است و کاربردهای مختلفی از جمله تولید هیدروژن، سلول‌های خورشیدی، کاتالیز، زیست پزشکی، سنسجش، فتوولتائیک و فوق روانکاری دارد [۵-۷]. اخیراً، MoS₂ تک لایه برای ساخت ترانزیستورهای اثر میدانی (FET) استفاده شده است که می‌تواند مصرف انرژی کمتری نسبت به ترانزیستورهای کلاسیک ارائه دهد [۸، ۹]. هم‌چنین فوتوترانزیستور جدیدی مبتنی بر تک لایه MoS₂ ساخته شده

³ Reduced Graphene Oxide

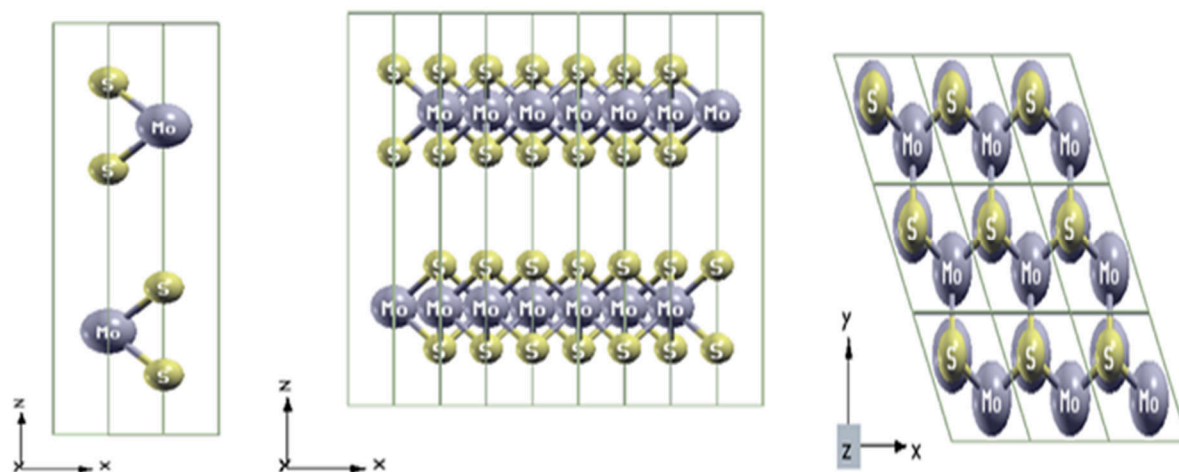
⁴ RFID

¹ Transition metal dichalcogenide

² Chemical Vapor Deposition (CVD)

اندازه‌گیری‌های نوری مشهود است. عملکرد عالی فوتوالکتریک عمدتاً به فرآیند استخراج و تزریق حامل بار نسبت داده می‌شود که در فصل مشترک $\text{BaTiO}_3/\text{MoS}_2$ رخ داده و جمعیت حامل را در کانال MoS_2 افزایش می‌دهد. بنابراین، روش‌های کنترل سطحی، آزادی بیشتری برای مداخله در بهینه‌سازی ویژگی‌های الکترونیک نوری TMD ایجاد می‌کند. با توجه به موارد گفته شده در این تحقیق قصد بررسی ویژگی‌های ساختاری و بررسی اثر فشار با محاسبه آنتالپی بر روی خواص ساختاری ترکیب MoS_2 را با استفاده از نظریه تابعی چگالی و روش شبه پتانسیل با کد محاسباتی کوانتوم اسپرسو خواهیم داشت

است که در مقایسه با دستگاه مبتنی بر گرافن، پاسخگویی به نور بهتری از خود نشان می‌دهد [۱۰]. به جز مطالعات تجربی، کارهای نظری زیادی برای بررسی خواص تک لایه MoS_2 انجام شده است. بینگ و همکاران [۱۱] در سال ۲۰۲۰، مهندسی ساختار نواری در ساختارهای ناهمسان مبتنی بر MoS_2 در ساخت فوتوترانزیستورهای با کارایی بالا بررسی نمودند. به‌طور خلاصه، آشکارسازهای نوری $\text{BaTiO}_3/\text{MoS}_2$ با کارایی بالا از طریق مهندسی ساختار نواری سطحی به دست آمدند. ساختارهای ناهمگون نوع I در مقیاس اتمی از طریق پوشش دورانی نانوذرات BaTiO_3 بر روی ورقه‌های دو بعدی MoS_2 شناسایی شدند، که نشان‌دهنده ویژگی سطحی مشخصه‌ای است که توسط



شکل ۱- ساختار شبیه سازی شده MoS_2 در نماهای مختلف با استفاده از نرم افزار xcrystden نشان داده شده است.

ساختار و بررسی خواص گوناگون ترکیبات، ثابت‌های شبکه است. وقتی که شبکه در کمینه انرژی خود قرار گرفته باشد ثابت‌های شبکه تعادلی محاسبه می‌گردند. ثابت‌های شبکه در برخی موارد به‌صورت تجربی محاسبه شده‌اند. برای بهینه سازی این پارامتر به‌صورت اجزای خودسازگار متوالی محاسبات صورت می‌گیرد و در پایان محاسبات به‌زای هر ثابت شبکه یک انرژی محاسبه می‌شود. نقاط ویژه k در ناحیه اول بریلوئن از مقدار $1 \times 1 \times 6$ بهینه سازی شد همچنین انرژی قطع^۲ برای ترکیب MoS_2 برابر 55 Ry بهینه‌سازی شد. این موارد متغیرهای اساسی محاسبات می‌باشد که تقریباً در

۲. روش انجام محاسبات

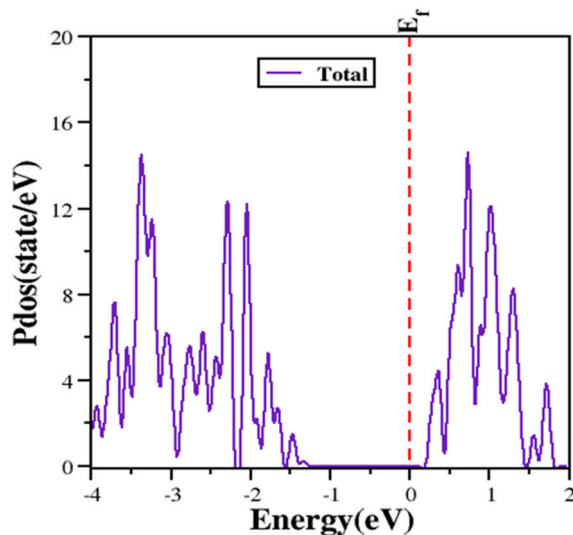
محاسبات انجام شده در این مطالعه از نوع خودسازگار بوده است. از آنجا که در کد محاسباتی کوانتوم اسپرسو [۱۲] می‌توان از تقریب‌های متنوعی با دقت‌های متفاوت و برای ساختارهای مختلف استفاده کرد، معرفی نوع تقریب به کار رفته در محاسبات حائز اهمیت است. در این مطالعه از تقریب شیب تعمیم یافته یا GGA^1 استفاده شده است. دقت تمام محاسبات از لحاظ بزرگی انرژی تا 10^{-12} Ry تنظیم شده است. به همین ترتیب مبنای همگرایی بار نیز تا 10^{-3} Ry ادر نظر گرفته شد. یکی از مهم‌ترین پارامترها در شبیه‌سازی

² Ecut

¹ Generalized Gradient Approximation

محاسبه شده برای این ترکیب در تقریب شیب تعمیم یافته $2/62$ الکترون ولت در نقطه گاما به صورت مستقیم می‌باشد که با نتایج کارهای پیشین اختلاف دارد [۱۷-۱۳، ۱].

در ادامه چگالی حالت های انرژی به صورت کلی و جزئی بررسی می‌شود. چگالی حالت‌ها در واقع به تعداد مجاز حالت‌های الکترونی اشاره دارد. می‌دانیم که هر نوار انرژی در ساختار نواری در واقع از هم‌پوشانی و مشارکت اوربیتال‌های اتمی ترکیب ایجاد شده است. چگونگی و میزان این مشارکت در نمودارهای چگالی حالت‌های کلی و جزئی قابل تشخیص است و هم‌چنین از روی آن‌ها می‌توان جزئیات گاف نواری را نیز مشخص نمود. نمودار چگالی حالت های کلی انرژی در شکل ۳ رسم شده است.



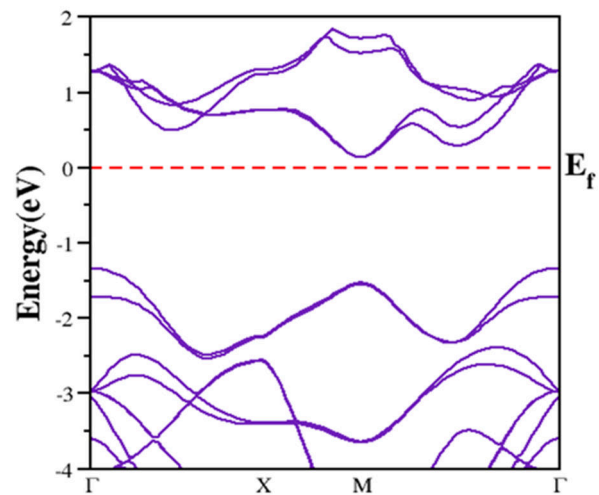
شکل ۳- نمودار چگالی حالت کلی در تقریب شیب تعمیم یافته را نشان می‌دهد.

در شکل ۳ تراز فرمی به صفر محور منتقل شده است. نمودار چگالی حالت انرژی در بازه -4 تا 2 الکترون ولت رسم شده است در این نمودار نیز تراز فرمی توسط نوارهای انرژی قطع نشده است و دارای گاف می‌باشد اما گاف به دست آمده اختلاف زیادی با گاف نواری دیده شده در محاسبات ساختار نواری دارد. اما گاف نواری که از چگالی حالات بدست آمده است، به نتایج کارهای پیشین نزدیک‌تر است. مقدار گاف به دست آمده $1/34$ الکترون ولت بوده است. که با نتایج کارهای پیشین سازگاری دارد [۱۷-۱۳، ۱].

تمام کار مورد استفاده بوده است. به صورت شماتیک ساختار بلوری ترکیب MoS_2 در جهات مختلف در شکل ۱ نشان داده شده است.

۳. بحث و نتایج

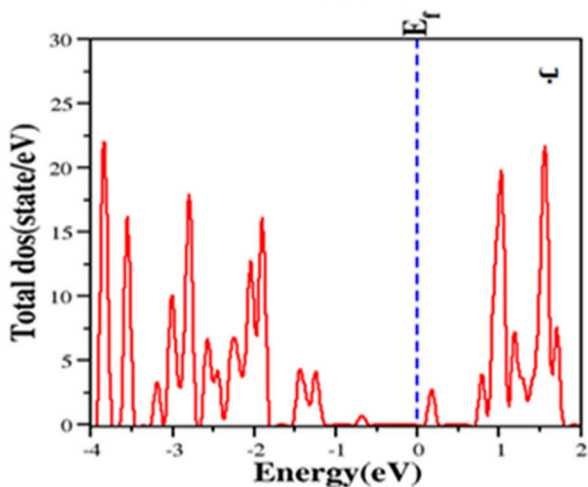
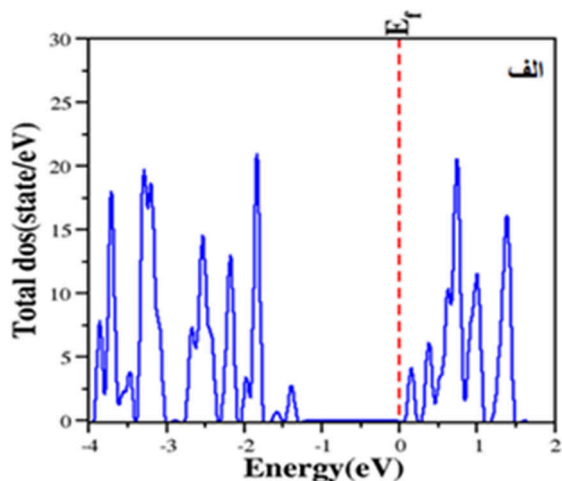
پس از انجام بهینه‌سازی پارامترهای اولیه با استفاده از کد محاسباتی کوانتوم اسپرسو ابتدا به بررسی خواص ترکیب MoS_2 از روی ساختار نواری پرداخته خواهد شد. برای این کار شکل ناحیه اول بریلوئن و نقاط پرتقارنی که در مسیر آنها ساختار نواری رسم خواهد شد بسیار اهمیت دارد. لذا ابتدا با استفاده از نرم‌افزار XCrySDen این ناحیه و نقاط مورد استفاده در اجرای خودسازگار مربوطه تعیین می‌شود. پس از آن محاسبات را انجام داده و با استفاده از نتایج به دست آمده ساختار نواری همان ترکیب از نوارهای انرژی در مسیر مورد نظر، رسم می‌گردد. اگر ساختار فلز نباشد یک گاف بین نوارهای ظرفیت و رسانش مشاهده خواهد شد. در نمودار ساختار نواری برای سادگی، تراز انرژی فرمی روی صفر قرار داده شده و انواع گاف‌های مستقیم و غیر مستقیم و اندازه‌های آن (گاف اصلی و در صورت وجود گاف‌های ثانویه و دیگر) تعیین می‌گردد.



شکل ۲- نمودار ساختار نواری در تقریب شیب تعمیم یافته را نشان می‌دهد.

تراز فرمی در شکل ۲ به صفر منتقل شده است همانطور که مشاهده می‌شود ترازهای رسانش و ظرفیت تراز فرمی را قطع نمی‌کند و اطراف تراز فرمی محدوده ممنوعه‌ای که نشان دهنده گاف نواری می‌باشد نمایان است. گاف نواری

سمت نوارهای رسانش مشابه ترکیب دی سولفید مولیبدن بدون اعمال فشار بوده است و با اعمال فشار ۰.۵٪ ثابت شبکه کاهش یافته و در این نمودار نیز ماهیت نیم رسانایی ترکیب دی سولفید مولیبدن را با گاف حدود ۰.۵۵ الکترون ولت نشان می دهد. در هر دو نمودار می توان مشاهده نمود که چگالی حالت ها تمایل به رفتن به خاصیت فلزی دارند ولی همچنان در حالت نیم رسانا باقی مانده اند.

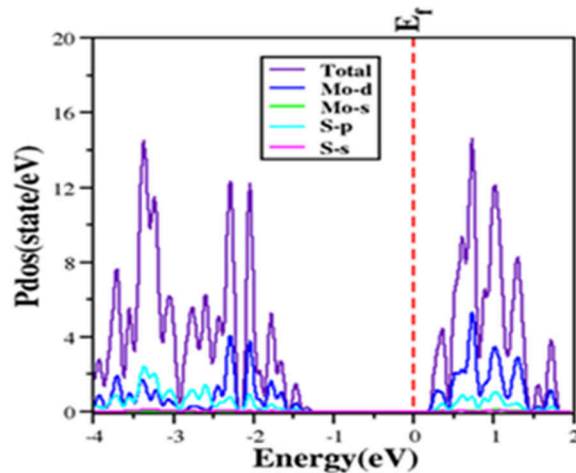


شکل ۵- نمودارهای چگالی حالت انرژی. الف) ۰.۵٪ و ب) ۱۰٪ را نشان می دهد.

ب) اعمال فشار ۱۰٪

فشار بعدی که بر روی ساختار ترکیب دی سولفید مولیبدن اعمال می گردد فشار ۱۰ درصد می باشد. نمودار چگالی حالت ها برای دو فشار در شکل ۶ رسم شده است. با اعمال فشار ۱۰٪ ثابت شبکه افزایش یافته ولی نمودار چگالی حالت ها همچنان ماهیت نیم رسانایی را با گاف حدود

در ادامه چگالی حالات جزئی را رسم نموده تا سهم اوربیتال ها را در اطراف تراز فرمی بر روی خواص الکترونی ترکیب بررسی گردد. نمودار چگالی حالات جزئی در شکل ۴ آورده شده است.



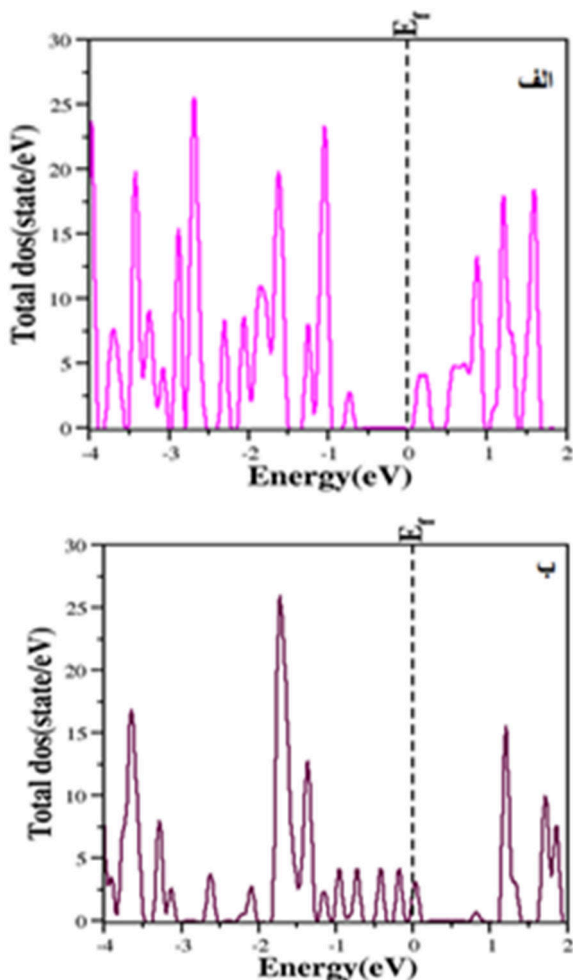
شکل ۴- نمودار چگالی حالت جزئی در تقریب شیب تعمیم یافته را نشان می دهد.

برای رسم چگالی حالات جزئی الکترون های ظرفیت را در نظر گرفته و نسبت به آن ها خواص الکترونی را بررسی می - گردد. الکترون های ظرفیت در محاسبات نقش اساسی دارند. با توجه به شکل ۴ اوربیتال d اتم مولیبدن در اطراف تراز فرمی نقش کلیدی ایفا می کند و بعد از آن اوربیتال p اتم گوگرد در اطراف تراز فرمی بر روی خواص الکترونی ترکیب نقش مهمی دارد. در ادامه با اعمال فشار های متفاوت بر روی سلول واحد ترکیب دی سولفید مولیبدن خواص الکترونی ترکیب را رسم و باهم و در حالت بدون اعمال فشار مقایسه خواهد شد.

الف) اعمال فشار ۰.۵٪

اولین فشار اعمالی فشار ۰.۵ درصد می باشد. نمودار چگالی حالت انرژی حاصل از فشارهای ۰.۵٪ در شکل ۵ نشان داده شده است. تراز فرمی به صفر محور منتقل شده است. با اعمال فشار ۰.۵٪ ثابت شبکه افزایش یافته ولی نمودار چگالی حالت ها همچنان ماهیت نیم رسانایی را با گاف حدود ۱/۲۲ الکترون ولت را حفظ می کند. این گاف نزدیک به گاف محاسبه شده برای ترکیب دی سولفید مولیبدن بدون اعمال فشار می باشد و همچنین محل قرار گیری تراز فرمی در

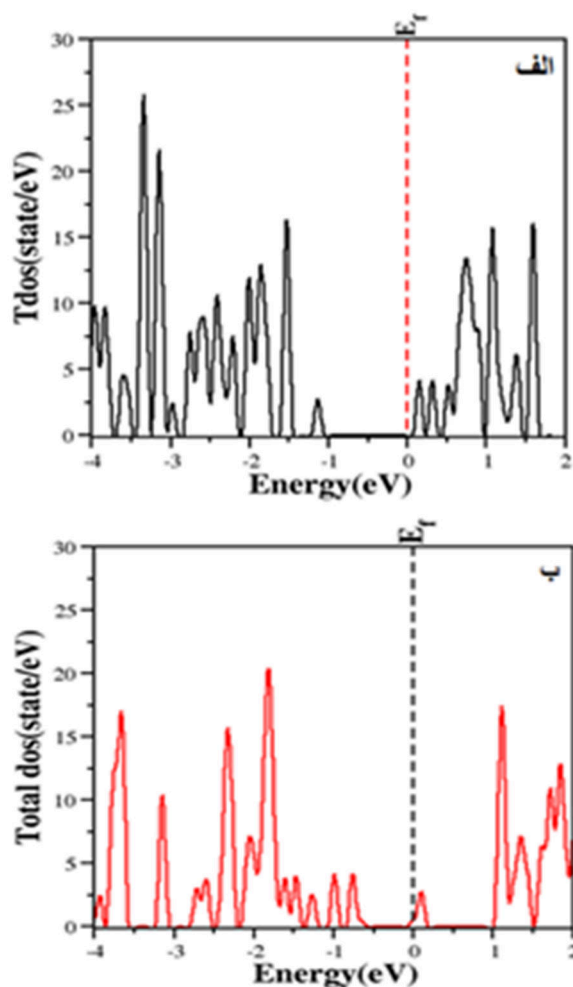
به محاسبات قبل انتظار می‌رود که در فشار $+15\%$ گاف کوچک‌تر شده باشد و در فشار -15% ترکیب همچنان روند فلزی خود را ادامه دهد و همچنین محل قرارگیری تراز فرمی در سمت نوارهای رسانش مشابه ترکیب دی سولفید مولیبدن بدون اعمال فشار باشد.



شکل ۷- نمودارهای چگالی حالت انرژی (الف) $+15\%$ و (ب) -15% را نشان می‌دهد.

با اعمال فشار $+15\%$ ثابت شبکه افزایش یافته ولی نمودار چگالی حالت‌ها همچنان ماهیت نیم‌رسانایی را با گاف حدود 0.55 الکترون‌ولت حفظ می‌کند. این گاف با محاسبه شده برای ترکیب دی سولفید مولیبدن بدون اعمال فشار اختلاف دارد و مشاهده شد که افزایش فشار باعث کاهش گاف تا این مرحله از محاسبات شده است و همچنین محل قرارگیری تراز فرمی در سمت نوارهای رسانش مشابه ترکیب دی سولفید مولیبدن بدون اعمال فشار بوده است. با اعمال فشار -15% ثابت شبکه کاهش یافته و در این نمودار

الکترون‌ولت حفظ می‌کند این گاف با گاف محاسبه شده برای ترکیب دی سولفید مولیبدن بدون اعمال فشار اختلاف دارد ولی همچنان محل قرارگیری تراز فرمی در سمت نوارهای رسانش مشابه ترکیب دی سولفید مولیبدن بدون اعمال فشار بوده است و مشاهده شد که افزایش فشار باعث کاهش گاف تا این مرحله از محاسبات شده است و با اعمال فشار -10% ثابت شبکه کاهش یافته و در این نمودار ماهیت فلزی ترکیب دی سولفید مولیبدن را نشان می‌دهد. در اینجا نیز مشاهده شده است با افزایش فشار منفی در ترکیب ماهیت فلزی پیدا می‌کند.



شکل ۶- نمودارهای چگالی حالت انرژی (الف) $+10\%$ و (ب) -10% را نشان می‌دهد.

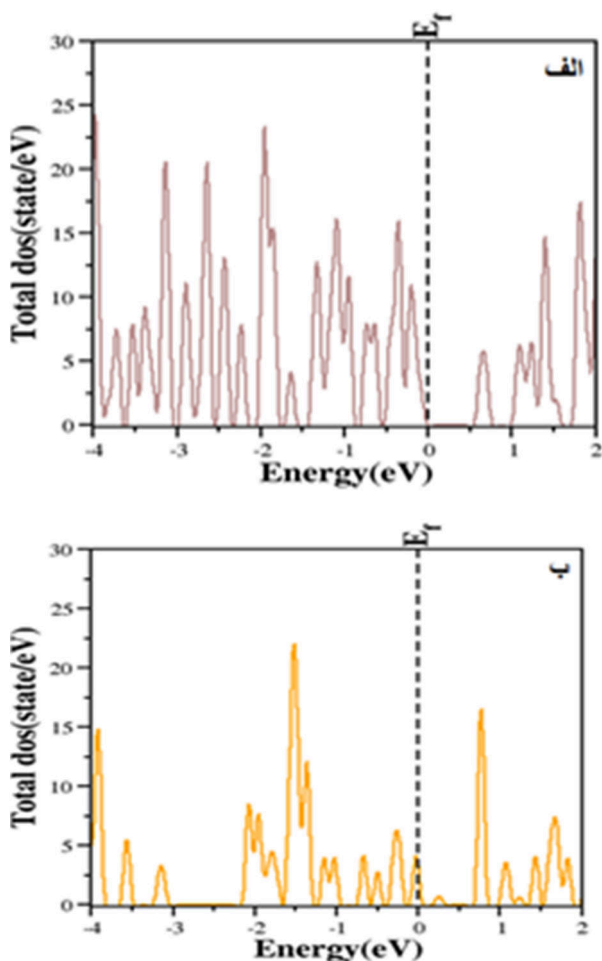
ج) اعمال فشار 15%

فشار بعدی که بر روی ساختار ترکیب دی سولفید مولیبدن اعمال می‌گردد فشار 15% درصد می‌باشد. نمودار چگالی حالت‌ها برای دو فشار در شکل ۷ رسم شده است. با توجه

افزایش یافته ولی نمودار چگالی حالت‌ها همچنان ماهیت نیم‌رسانایی را با گاف حدود 0.75 الکترون‌ولت حفظ می‌کند ولی تراز فرمی به سمت نوارهای ظرفیت منتقل شده است. با این حال می‌توان گفت نسبت به مرحله قبل افزایش داشته است این گاف با گاف محاسبه شده برای ترکیب دی‌سولفید مولیبدن بدون اعمال فشار اختلاف دارد و همچنین جابه‌جایی تراز فرمی را شاهد خواهیم بود. با اعمال فشار 20% ثابت شبکه کاهش یافته و در این نمودار ماهیت فلزی ترکیب دی‌سولفیدمولیبدن را نشان می‌دهد در اینجا نیز مشاهده شده است با افزایش فشار منفی ترکیب فلز باقی می‌ماند.

ه) اعمال فشار 25%

فشار بعدی که بر روی ساختار ترکیب دی‌سولفید مولیبدن اعمال می‌کنیم فشار 25% درصد می‌باشد. نمودار چگالی حالت‌ها برای دو فشار در شکل ۹ رسم شده است.

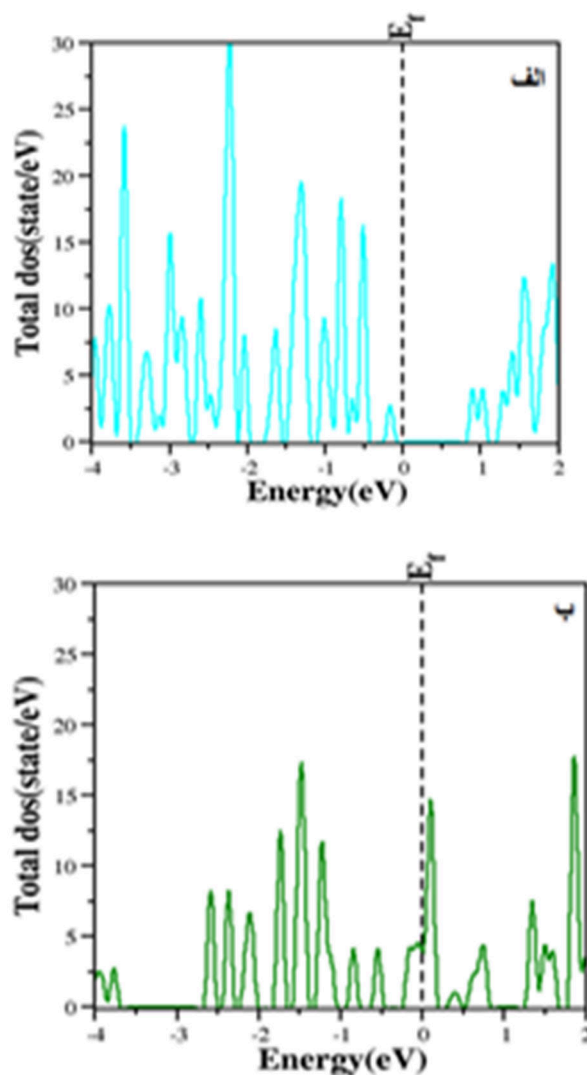


شکل ۹- نمودارهای چگالی حالت انرژی الف) 25% و ب) 25% را نشان می‌دهد.

ماهیت فلزی ترکیب دی‌سولفید مولیبدن را نشان می‌دهد در اینجا نیز مشاهده شده است با افزایش فشار منفی ترکیب بصورت فلز باقی می‌ماند ولی محل قرارگیری تراز فرمی به سمت نوارهای ظرفیت جابه‌جا شده است.

د) اعمال فشار 20%

فشار بعدی که بر روی ساختار ترکیب دی‌سولفیدمولیبدن اعمال می‌گردد فشار 20% درصد می‌باشد. نمودار چگالی حالت‌ها برای دو فشار در شکل ۸ رسم شده است.



شکل ۸- نمودارهای چگالی حالت انرژی الف) 20% و ب) 20% را نشان می‌دهد.

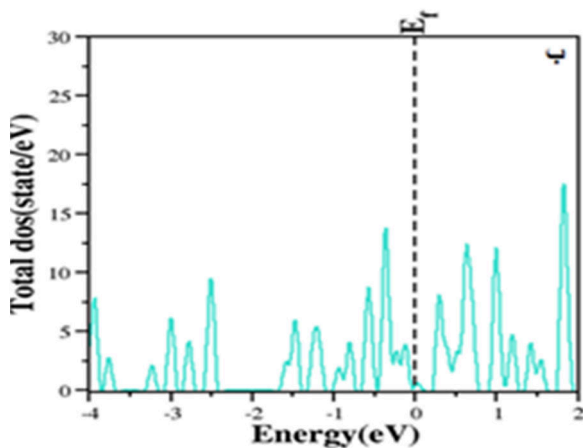
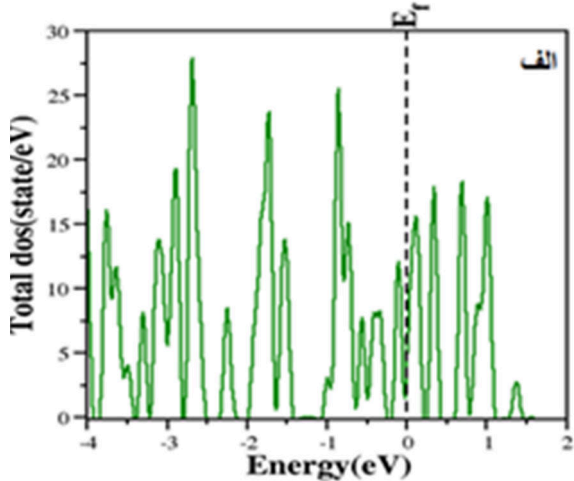
با توجه به محاسبات قبل انتظار می‌رود که در فشار 20% گاف کوچک تر شده باشد و در فشار 20% ترکیب همچنان روند فلزی خود را ادامه دهد. با اعمال فشار 20% ثابت شبکه

با اعمال فشار ۳۰٪+ ثابت شبکه افزایش یافته و نمودار چگالی حالت‌ها ماهیت فلزی را نشان می‌دهند زیرا ترازهای ظرفیت تراز فرمی را قطع کردند. با اعمال فشار ۳۰٪- ثابت شبکه کاهش یافته و در این نمودار ماهیت فلزی ترکیب دی‌سولفید مولیبدن را نشان می‌دهد در اینجا نیز مشاهده شده است با افزایش فشار منفی ترکیب فلز باقی می‌ماند.

بنابراین تاکنون با اعمال فشارهای بیشتر مثبت و منفی در هر دو حالت چگالی حالت‌ها از حالت نیم‌رسانایی به حالت فلزی می‌روند و این روند در دو فشار ۲۵٪ و ۳۰٪ ثابت باقی مانده است برای تایید این روند دو فشار دیگر اعمال شده و روند بررسی می‌گردد.

ح) اعمال فشار ۵۰٪

فشار بعدی که بر روی ساختار ترکیب دی‌سولفید مولیبدن اعمال می‌کنیم فشار ۵۰ درصد می‌باشد. نمودار چگالی حالت‌ها برای دو فشار در شکل ۱۱ رسم شده است.

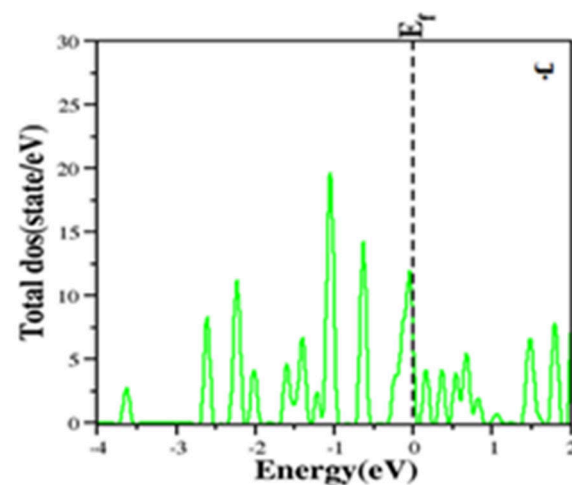
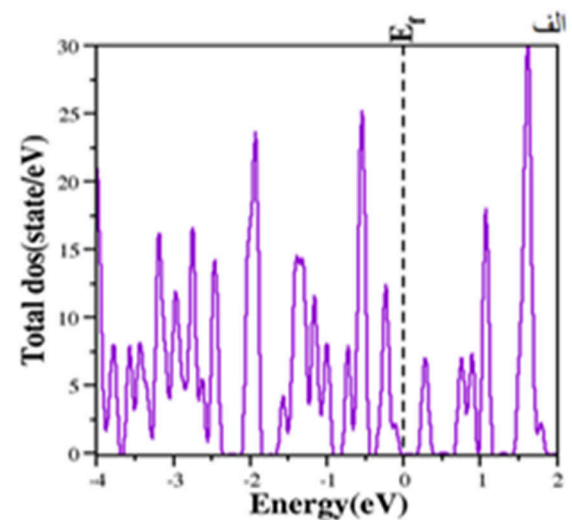


شکل ۱۱- نمودارهای چگالی حالت انرژی الف) ۳۰٪+ و ب) ۵۰٪- را نشان می‌دهد.

با توجه به محاسبات قبل انتظار می‌رود که در فشار ۲۵٪+ گاف کوچک تر شده باشد و در فشار ۲۵٪- ترکیب همچنان روند فلزی خود را ادامه دهد. با اعمال فشار ۲۵٪+ ثابت شبکه افزایش یافته و نمودار چگالی حالت‌ها ماهیت فلزی را نشان می‌دهند زیرا ترازهای ظرفیت تراز فرمی را قطع کردند. با اعمال فشار ۲۵٪- ثابت شبکه کاهش یافته و در این نمودار ماهیت فلزی ترکیب دی‌سولفید مولیبدن را نشان می‌دهد در اینجا نیز مشاهده شده است با افزایش فشار منفی ترکیب فلز باقی می‌ماند.

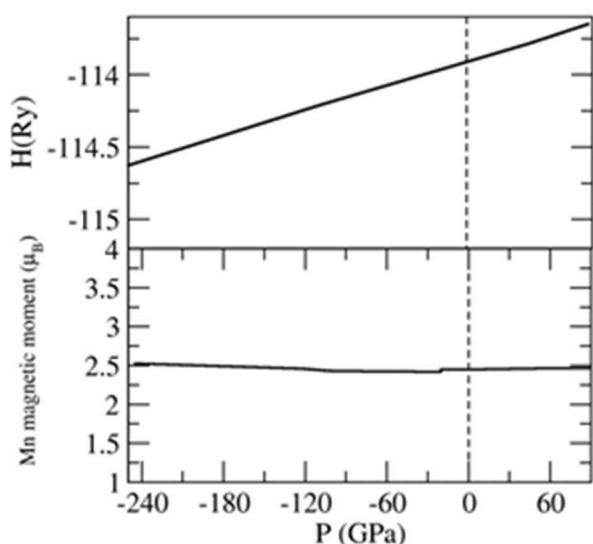
و) اعمال فشار ۳۰٪

فشار بعدی که بر روی ساختار ترکیب دی‌سولفید مولیبدن اعمال می‌گردد فشار ۳۰ درصد می‌باشد. نمودار چگالی حالت‌ها برای دو فشار در شکل ۱۰ رسم شده است.



شکل ۱۰- نمودارهای چگالی حالت انرژی الف) ۳۰٪+ و ب) ۳۰٪- را نشان می‌دهد.

با اعمال فشار ۷۰٪+ ثابت شبکه افزایش یافته و نمودار چگالی حالت‌ها ماهیت فلزی را نشان می‌دهند زیرا ترازهای ظرفیت تراز فرمی را قطع کردند. با اعمال فشار ۷۰٪- ثابت شبکه کاهش یافته و در این نمودار ماهیت فلزی ترکیب دی‌سولفید مولیبدن را نشان می‌دهد در اینجا نیز مشاهده شده است با افزایش فشار منفی ترکیب فلز باقی می‌ماند. بنابراین این نتیجه حاصل می‌گردد که از فشار ۲۵٪ در هر دو حالت ترکیب از ماهیت نیم‌رسانایی به ماهیت فلزی تبدیل می‌شود. محاسبات آنتالپی را برای هر یک از نمونه‌ها قبل از اعمال فشار و پس از اعمال فشار صورت پذیرفت [۱۸]. نتایج محاسبات نشان می‌دهد که با اعمال فشار در این ترکیب گذار مغناطیسی^۱ دیده نمی‌شود. نتایج محاسبات در شکل ۱۳ ملاحظه می‌گردد.



شکل ۱۳- نمودار آنتالپی و نمودار تکانه مغناطیسی کل برحسب فشار را نشان می‌دهد.

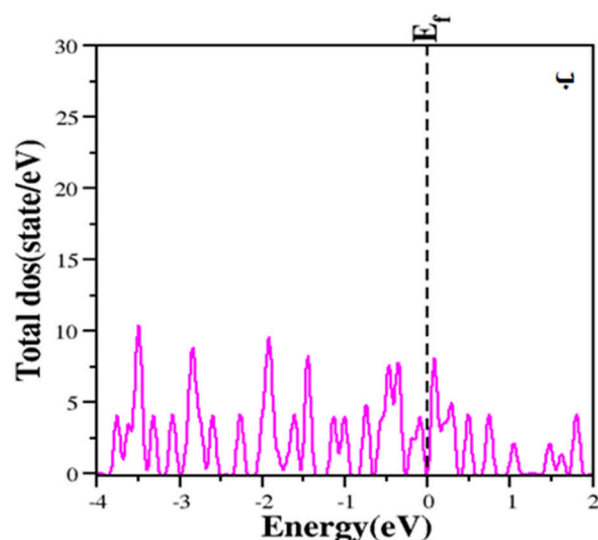
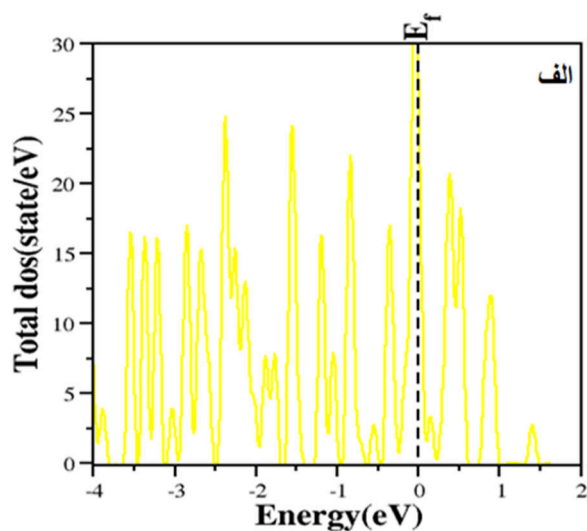
۴. نتیجه‌گیری

بطور خلاصه در این تحقیق محاسبات در چارچوب نظریه تابعی چگالی و با کد محاسباتی کوانتوم اسپرسو و تقریب تبدیلی همبستگی شیب تعمیم یافته برای ترکیب دی‌سولفید-مولیبدن برای بررسی فشار در راستای محور z انجام گرفت. ساختار دی‌سولفیدمولیبدن شبیه‌سازی شد و پارامترهای اساسی برای محاسبات بهینه‌سازی گردید. خواص الکترونی

با اعمال فشار ۵۰٪+ ثابت شبکه افزایش یافته و نمودار چگالی حالت‌ها ماهیت فلزی را نشان می‌دهند زیرا ترازهای ظرفیت تراز فرمی را قطع کردند. با اعمال فشار ۵۰٪- ثابت شبکه کاهش یافته و در این نمودار ماهیت فلزی ترکیب دی‌سولفید مولیبدن را نشان می‌دهد در اینجا نیز مشاهده شده است با افزایش فشار منفی ترکیب فلز باقی می‌ماند.

خ) اعمال فشار ۷۰٪

آخرین فشار اعمالی که بر روی ساختار ترکیب دی‌سولفید-مولیبدن اعمال می‌گردد فشار ۷۰ درصد می‌باشد. نمودار چگالی حالت‌ها برای دو فشار در شکل ۱۲ رسم شده است.



شکل ۱۲- نمودارهای چگالی حالت انرژی الف) ۷۰٪+ و ب) ۷۰٪- را نشان می‌دهد.

^۱ High Spin-Low Spin

- nanoparticles as catalyst for hydrogen evolution," *Journal of the American Chemical Society*, **127** (2005) 5308-5309.
- [6] N. Yaacobi-Gross, M. Soreni-Harari, M. Zimin, S. Kababya, A. Schmidt, and N. Tessler, "Molecular control of quantum-dot internal electric field and its application to CdSe-based solar cells," *Nature Materials*, **10** (2011) 974-979.
- [7] H. Wu, R. Yang, B. Song, Q. Han, J. Li, Y. Zhang, et al., "Biocompatible inorganic fullerene-like molybdenum disulfide nanoparticles produced by pulsed laser ablation in water," *ACS nano*, **5** (2011) 1276-1281.
- [8] B. Radisavljevic, A. Radenovic, J. Brivio, V. Giacometti, and A. Kis, "Single-layer MoS₂ transistors," *Nature nanotechnology*, **6** (2011) 147-150.
- [9] T. Jin, J. Kang, E. Su Kim, S. Lee, and C. Lee, "Suspended single-layer MoS₂ devices," *Journal of Applied Physics*, **114** (2013) 164509.
- [10] O. Lopez-Sanchez, D. Lembke, M. Kayci, A. Radenovic, A. Kis, "Ultrasensitive photodetectors based on monolayer MoS₂," *Nature nanotechnology*, **7** (2013) 497-501.
- [11] H. Ying, X. Li, H. Wang, Y. Wang, X. Hu, J. Zhang, et al., "Band structure engineering in MoS₂ based heterostructures toward high-performance phototransistors," *Advanced Optical Materials*, **8** (2020) 2000430.
- [12] 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).
- [13] D. Kim, D. Sun, W. Lu, Z. Cheng, Y. Zhu, D. Le, et al., "Toward the growth of an aligned single-layer MoS₂ film," *Langmuir*, **27** (2011) 11650-11653.
- [14] K. S. Novoselov, D. Jiang, F. Schedin, T. Booth, V. Khotkevich, S. Morozov, et al., "Two-dimensional atomic crystals," *Proceedings of the National Academy of Sciences*, **102** (2005) 10451-10453.
- [15] J. N. Coleman, M. Lotya, A. O'Neill, S. D. Bergin, P. J. King, U. Khan, et al., "Two-dimensional nanosheets produced by liquid exfoliation of layered materials," *Science*, **331** (2011) 568-571.
- [16] Q. H. Wang, K. Kalantar-Zadeh, A. Kis, J. N. Coleman, and M. S. Strano, "Electronics and optoelectronics of two-dimensional transition metal dichalcogenides," *Nature nanotechnology*, **7** (2012) 699-712.
- [17] H. Xie, W. Yu, and W. Chen, "MgO nanofluids: higher thermal conductivity and lower viscosity among ethylene glycol-based nanofluids containing oxide nanoparticles," *Journal of Experimental Nanoscience*, **5** (2010) 463-472.
- [18] S. Javaid, M. J. Akhtar, et al, "Pressure driven spin crossover and isostructural phase transition in LaFeO₃," *J. App. Phys*, **114** (2013) 2437121-2437127.

ترکیب دی سولفیدمولیبدن اعم از ساختار نواری و چگالی حالت‌ها بررسی شد. ساختار نواری رسم شده کافی را نشان داده است که با نتایج کارهای دیگر اختلاف زیادی دارد. چگالی حالت‌ها خاصیت نیم‌رسانایی ترکیب را نشان داده و گاف محاسبه شده با نتایج دیگران همخوانی داشته است. فشار را از ۰.۵ تا ۳.۰٪ و بعد از آن ۵۰٪ و ۷۰٪ در دو حالت مثبت و منفی بر ساختار اعمال کرده و چگالی حالت‌ها مقایسه شد. در فشار ۰.۵٪ در دو حالت مثبت و منفی ساختار همچنان نیم رسانا باقی می‌ماند.

از فشار ۰.۱٪ تا ۷۰٪- ماهیت ترکیب دی سولفیدمولیبدن از نیم‌رسانا به فلز تبدیل می‌شود و ثابت شبکه کم‌تر و ساختار متراکم‌تر می‌شود. از فشار ۰.۵٪ تا ۱۵٪+ گاف نواری کاهش پیدا کرده و تراز فرمی سمت نوار رسانش بوده است ولی در فشار ۲۰+ تراز فرمی جابه‌جا شده و گاف انرژی اندکی از مرحله قبل افزایش پیدا کرده و از فشار ۲۵٪+ تا ۷۰٪+ ماهیت ترکیب فلز شده است. و ساختار با افزایش فشار و مثبت بودن آن ثابت شبکه بزرگتر شده است. در کل می‌توان گفت که با افزایش فشار اعمالی بر روی ساختار، ماهیت ترکیب به سمت فلزی میل می‌کند و به فلز تبدیل می‌شود. نتایج محاسبات آنتالپی و تکانه مغناطیسی برحسب فشار نشان می‌دهد که در این ترکیب گذار مغناطیسی دیده نمی‌شود.

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] K. F. Mak, C. Lee, J. Hone, J. Shan, and T. F. Heinz, "Atomically thin MoS₂: a new direct-gap semiconductor," *Physical review letters*, **105** (2010) 136805.
- [2] E. Singh, P. Singh, K. S. Kim, G. Y. Yeom, and H. S. Nalwa, "Flexible molybdenum disulfide (MoS₂) atomic layers for wearable electronics and optoelectronics," *ACS applied materials & interfaces*, **11** (2019) 11061-11105.
- [3] E. S. Kadantsev and P. Hawrylak, "Electronic structure of a single MoS₂ monolayer," *Solid state communications*, **152** (2012) 909-913.
- [4] D. Yang, S. J. Sandoval, W. Divigalpitaya, J. Irwin, and R. Frindt, "Structure of single-molecular-layer MoS₂," *Physical Review B*, **43** (1991) 12053.
- [5] B. Hinnemann, P. G. Moses, J. Bonde, K. P. Jørgensen, J. H. Nielsen, S. Horch, et al., "Biomimetic hydrogen evolution: MoS₂