

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
СУМСЬКИЙ ДЕРЖАВНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
Факультет електроніки та інформаційних технологій
Кафедра наноелектроніки та модифікації поверхні

Кваліфікаційна робота бакалавра
зі спеціальності 153 – «Мікро- та наносистемна техніка»
«ДОСЛІДЖЕННЯ ЕЛЕКТРОННИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ 2D МАТЕРІАЛІВ
ЗА ДОПОМОГОЮ КОМП'ЮТЕРНОГО МОДЕЛЮВАННЯ»

Студент групи ФЕ-71

М.А. Могильних

Науковий керівник,

Доцент

канд. фіз.-мат. наук,

В.М. Борисюк

Консультант з іноземної мови

Ст. викладач

Н.М. Усенко

Суми 2021

РЕФЕРАТ

Мета роботи – Дослідження електронних властивостей 2D матеріалів, таких як графен та дисульфід молібдену за допомогою комп'ютерного моделювання з використанням програмного пакету “Winmostar”

Робота присвячена дослідженню електронних властивостей графену та дисульфиду молібдену з використанням програмного забезпечення “Winmostar” та пакету QUANTUM ESPRESSO. В результаті були отримані залежності, що описують електронні властивості досліджуваних матеріалів.

В даній бакалаврській роботі було проведено наукове дослідження з заданої теми. Для виконання завдання були розглянуті такі матеріали як графен та дисульфід молібдену, побудовані їх просторові структури та отримані такі залежності як: зонна структура, густина станів, частинна густина станів, електронна щільність та розподіл потенціальної енергії.

Робота викладена на 30 сторінках, зокрема містить 14 рисунків, 2 таблиці та список цитованої літератури із 19 джерел.

КЛЮЧОВІ СЛОВА: QUANTUM ESPRESSO, WINMOSTAR, МОДЕЛЮВАННЯ, ГРАФЕН, ДИСУЛЬФІД МОЛІБДЕНУ, ЗОННА СТРУКТУРА.

ЗМІСТ

ВСТУП.....	4
РОЗДІЛ 1 ЛІТЕРАТУРНИЙ ОГЛЯД	5
__1.1.Опис властивостей графену	5
__1.2.Опис властивостей дисульфиду молібдену	8
__1.3. Основи зонної теорії для досліджуваних матеріалів.....	11
РОЗДІЛ 2 МЕТОДИКА ТА ТЕХНІКА ЕКСПЕРЕМЕНТУ	14
__2.1.Опис програмного забезпечення та проведення моделювання.....	14
РОЗДІЛ 3 РЕЗУЛЬТАТИ.....	16
__3.1.Комп'ютерне моделювання електронних властивостей графену	16
__3.2. Комп'ютерне моделювання електронних властивостей дисульфиду молібдену.....	20
ВИСНОВКИ.....	23
СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ	24
Додатки.....	26

ВСТУП

В наш час для розвитку новітніх технологій потрібно винайдення та дослідження нових матеріалів. Раніше для досягнення цієї мети проводились крупні експерименти і їх результати могли бути досить неочікуваними. Наразі існує ряд способів для дослідження матеріалів та опису їх властивостей. Одним з таких методів є комп'ютерне моделювання.

В даній роботі проводиться моделювання електронних властивостей 2D матеріалів таких як графен і дисульфід молібдену. Інтерес до цих матеріалів обумовлений наявністю специфічних властивостей, які в перспективі можуть бути використані у різних сферах діяльності людини.

На основі просторових моделей матеріалів було проведено дослідження їх електронних властивостей і проведено аналіз отриманих результатів.

РОЗДІЛ 1

ЛІТЕРАТУРНИЙ ОГЛЯД

1.1.Опис властивостей графену

Графеном називається двомірна алотропна модифікація вуглецю, що утворюється одноатомним шаром карбону, що з'єднується за допомогою sp^2 зв'язків, у гексагональну кристалічну ґратку. Просторова структура даного матеріалу представлена на рисунку 1.1

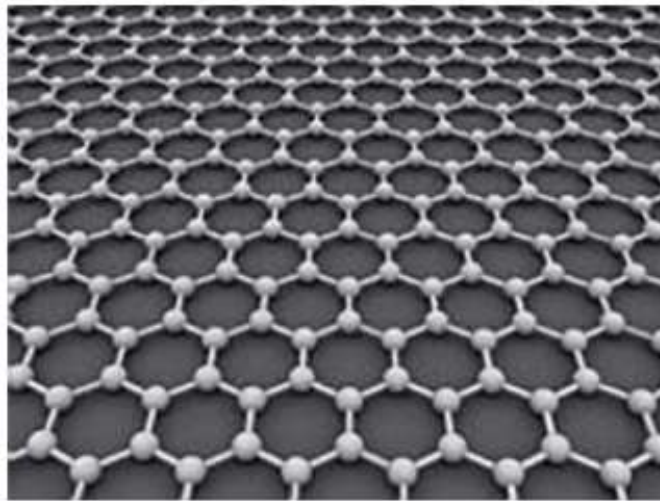


Рисунок 1.1. Просторова структура графену [1]

Інтерес до даної алотропної модифікації вуглецю [2-5] пов'язаний з наявністю в нього набору специфічних властивостей. Графен має досить високу механічну жорсткість, що складає приблизно 1 ТПа, та провідність (приблизно $5 \cdot 10^3 \text{ Вт} \cdot \text{м}^{-1} \cdot \text{К}^{-1}$). Останній показник параметру обумовлює перспективу використання даного матеріалу у сфері електроніки. Але існує ряд проблем, що пов'язані зі специфікою механізму провідності графену. Однією з цих проблем є те, що при відсутності подання на матеріал електричного струму через нього все одно проходить струм. Даний феномен

пов'язаний зі специфікою просторової будови матеріалу та його електронних властивостей, так як енергія забороненої зони дорівнює 0. Для мінімізації даного ефекту команда вчених з Манчестерського університету під керівництвом А. Геймана провела ряд досліджень по деформуванню структури матеріалу, що дозволило отримати напівпровідникові властивості. Окрім цього ведуться додаткові дослідження двох способів отримання в графені забороненої зони відчутної ширини при кімнатній температурі.

Можливе таке вирішення даної задачі - сформувати потенціал, який по-різному діє на дві підґратки графена. Об'єднання двох аркушів графена в двошаровий матеріал призводить до формування чотирьох енергетичних зон, дві з яких стикаються, завдяки чому такий матеріал як і раніше не має забороненої зони. Але на відміну від одношарового графена, носії заряду в двошаровому матеріалі при впливі зовнішнього електричного поля можуть мати масу, що свідчить про можливість "відкриття" забороненої зони і управління її шириною

Вченим Каліфорнійського університету в Берклі під керівництвом Фенг Ванга вдалося показати, що при зміні зовнішньої напруги, прикладеного до двошарового графену, від 0 до 250 мВ [6] можна управляти шириною забороненої зони матеріалу в межах від 0 до 250 мєВ (ширина забороненої зони германію та кремнію становить ~ 740 і 1200 мєВ відповідно).

Треба зазначити, що для отримання такого результату було прийнято два важливих кроки. По-перше, був виготовлений двозатворного польовий транзистор, що дало змогу незалежно управляти шириною забороненої зони і електричним впливом легуючого матеріалу. Нанопольовий транзистор був виконаний на кремнієвій підкладці, яка служила його нижнім затвором. Шар двоокису кремнію малої товщини відділяв підкладку-затвор від двошарового графену, поверх якого був нанесений шар прозорого окису алюмінію. Другим затвором була платина, вирощена на плівці окису алюмінію.

Друге рішення, яке дало змогу зареєструвати появу забороненої зони і управляти її шириною, полягало у відмові від вимірювання електричного опору графена. Замість цього за допомогою пучка синхротронного ІК-випромінювання реєструвалася оптична пропускна здатність графена. Варіюючи напруги затворів, вчені фіксували зміну поглинається графеном випромінювання. Максимум поглинання в кожному спектрі відповідав ширині забороненої зони для заданої напруги затвора.

Іншою проблемою застосування графену є його нестабільність. Цей ефект пов'язаний з тим що при великій кількості атомів лист матеріалу починає згортатись. З вищеописаного зрозуміло, що досягання відносно великих розмірів графенового листа можливо лише у випадку наявності підкладки або магнітного утримання матеріалу.

Зонна структура графену була описана ще у 1947 році у статті Уоллеса, присвяченій опису зонної теорії графіту [7]. В цій роботі графен не розглядався як окремий матеріал, а було проведено розрахунок зон для одного шару графіту, що по факту і є графеном. Вперше цей матеріал був отриманий вченими А. Гейманом та К. Новосьоловим у лабораторних умовах, що і призвело до збільшення кількості цитувань праці Уоллеса. Стаття про отримання нового матеріалу була опублікована у 2004 році, а у 2010 році вчені були номіновані на нобелівську премію.

Перші листи графену були отримані методикою розшарування графіту. Зараз вже мають місце інші методи отримання даного матеріалу. Одним з найпопулярніших є метод хімічного осадження з парової фази. При цьому процесі відбувається термодинамічне розкладання вуглецю на поверхні металів, таких як нікель або купрум при температурі близько 1000°C з наступним різким охолодженням в атмосфері аргону. Після цього підкладка видаляється шляхом травлення в одномолярному розчині FeCl_3 . Після цього відділений від підкладки графеновий лист піднімається на поверхню розчину.

Пізніше низкою інших дослідників [8-11] була вивчена можливість існування інших 2D наноалотропов вуглецю, як з sp^2 -, так і з sp^3 -гібридизацією атомних орбіталей. В останньому випадку всі чотири орбіталі валентних електронів вуглецю є гібридними SP-орбіталями і розташовуються в одній площині, беручи участь в утворенні σ -зв'язків з сусідніми атомами. Такі структури не володіють електропровідністю і повинні являти собою діелектрики або широкозонні напівпровідники.

В перспективі графен може бути використаним у таких сферах:

- Заміщення кремнію у мікросхемах. Теоретично можливим є такий факт що чіпи на графені будуть мати більшу продуктивність, стабільність роботи, призведуть до зменшення споживання електроенергії, та зменшення теплових втрат.
- Графенові проводи можуть прийти на зміну мідних в авіації та космонавтиці через їх меншу вагу та кращі електричні характеристики
- Може бути використаний для створення гнучких сенсорних дисплеїв та сонячних елементів, про дану властивість було описано вище
- Може бути використаний в хімії в якості сенсора для виявлення молекул речовин

1.2 Опис властивостей дисульфіду молібдену

Дисульфід молібдену являє собою неорганічну бінарну сполуку чотиривалентного молібдену і двовалентної сірки. Просторова структура цього матеріалу має гексагональну форму, що утворюється площинами атомів сульфуру, які знаходяться по обидві сторони від гексагональної площини атомів молібдену і укладаються одна на одну, з сильними ковалентними зв'язками між атомами сірки та молібдену, але слабкими Ван-

дер-ваальсовими зв'язками, що утримують шари разом. Це дозволяє механічно розділяти їх, утворюючи 2-мірні листи MoS₂ (Рисунок 1.2.)

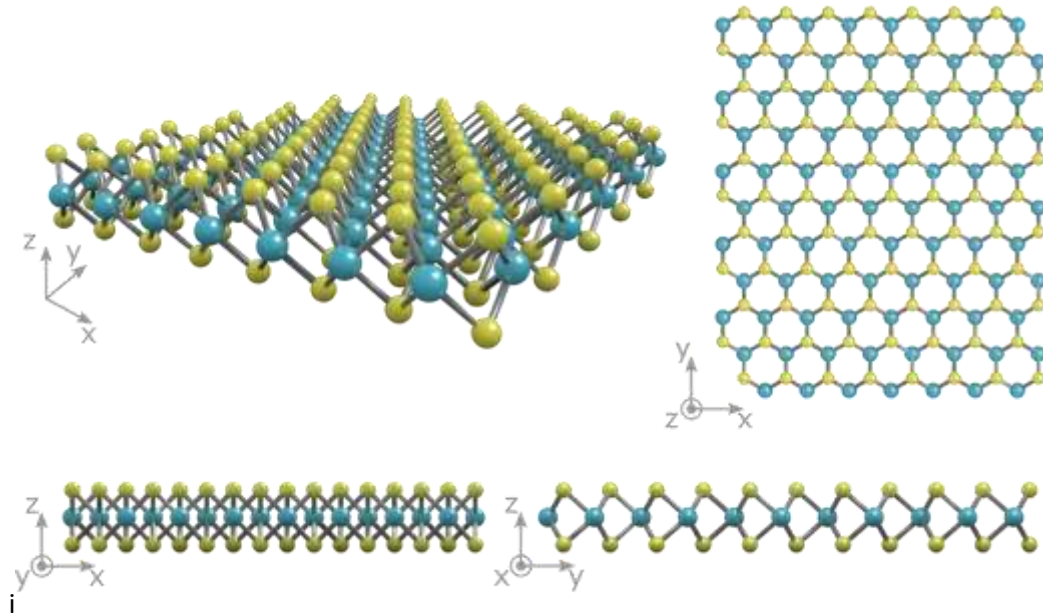


Рисунок 1.2 Просторова структура дисульфиду молібдену [12]

В цій роботі розглядається графеноподібний одношаровий лист дисульфиду молібдену. Інтерес до цього матеріалу обумовлений схожістю його властивостей з властивостями графену, але в свою чергу ця сполука є напівпровідником з шириною забороненої зони приблизно 1.8 eV та не проводить струм без зовнішнього впливу, на відміну від графену.

Видалення міжшарових взаємодій і обмеження електронів в одній площині призводить до утворення прямої забороненої зони з підвищеною енергією $\sim 1,89$ eV (видимий червоний колір). Один моношар дисульфиду молібдену може поглинати 10% падаючого світла з енергією вище забороненої зони. У порівнянні з об'ємним кристалом спостерігається 1000-кратне збільшення інтенсивності фотолюмінесценції, але вона залишається відносно слабкою-з виходом квантової фотолюмінесценції близько 0,4% . Однак це може бути

значно збільшено (до більш ніж 95%) за рахунок видалення дефектів, відповідальних за безвипромінювальну рекомбінацію .

Моношари дисульфиду молібдену є гнучкими, і було показано, що тонкоплівкові FET зберігають свої електронні властивості при вигині до радіуса кривизни 0,75 мм. Вони мають жорсткість, порівнянну зі сталлю, і більш високу міцність на розтяг, ніж гнучкі пластмаси (такі як поліімід(PI) і полідиметилсилоксан (PDMS)), що робить їх особливо придатними для гнучкої електроніки.

В свою чергу при енергії близько $35 \text{ Вт} \cdot \text{м}^{-1} \cdot \text{К}^{-1}$ теплопровідність моношарів дисульфиду молібдену в 100 разів нижче, ніж у графена.

На даний час ведуться дослідження по створенню транзисторів на основі дисульфиду молібдену.[13] У 2011 році дослідники з Федеральної політехнічної школи Лозанни повідомили про створення транзистора на основі моношарового дисульфиду молібдену з рухливістю носіїв близько $200 \text{ см}^2\text{В}^{-1}\text{С}^{-1}$ при кімнатній температурі. В якості діелектричного шару використовувався діоксид гафнію. Цієї рухливості виявилось достатньо для створення найпростіших інтегральних схем транзисторної логіки[14]. Схема досліджуваного транзистору представлена на рисунку 1.3.

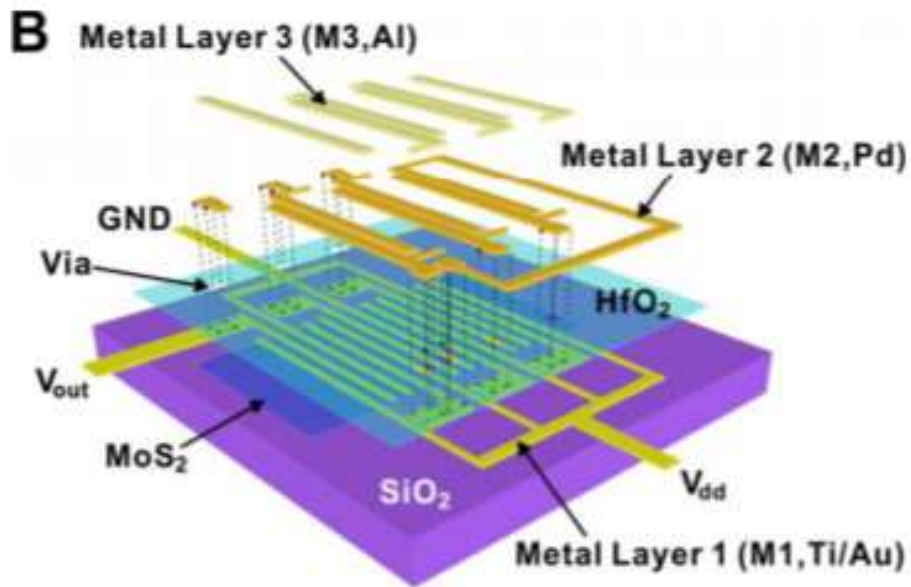


Рисунок 1.3. Транзистор на основі дисульфїду молібдену [14]

На основі гетеропереходу германій дисульфїд молібдену був реалізований тунельний транзистор, зворотна підпорогова крутизна у якого менше (в два рази) теоретичної для польових транзисторів в сучасних інтегральних мікросхемах. Даний параметр, який при кімнатній температурі дорівнює 60 мВ/декаду, визначає швидкість перемикання транзистора і енергоспоживання, можливість працювати при менших напругах на затворі і стоку-витоку[15].

У 2019 році в Технічному університеті гір. Відня були отримані зразки польових транзисторів з каналом з двовимірною MoS_2 , ізольованим тонким шаром кристалічного фториду кальцію (CaF_2) від грає роль затвора кремнієвої пластини (англ. backgate-конфігурація).

1.3. Основи зонної теорії для досліджуваних матеріалів.

В фізиці твердого тіла існує класифікація за типом провідності матеріалів. Розмежування на метали напівпровідники та діелектрики проводиться за значенням енергії забороненої зони. В загальному випадку провідниками

називаються матеріали, енергія зони заборони яких дорівнює 0 або прямує до нього. Напівпровідники – матеріали з шириною зони заборони меншою або рівною 3,2 еВ. Специфікою напівпровідників є те, що при досить низьких температурах (Близько 0 К), вони змінюють свій тип провідності і проявляють діелектричні властивості. Діелектрики – матеріали з шириною зони заборони більшою за 3,2 еВ. Схематично ця класифікація представлена на рисунку 1.4.

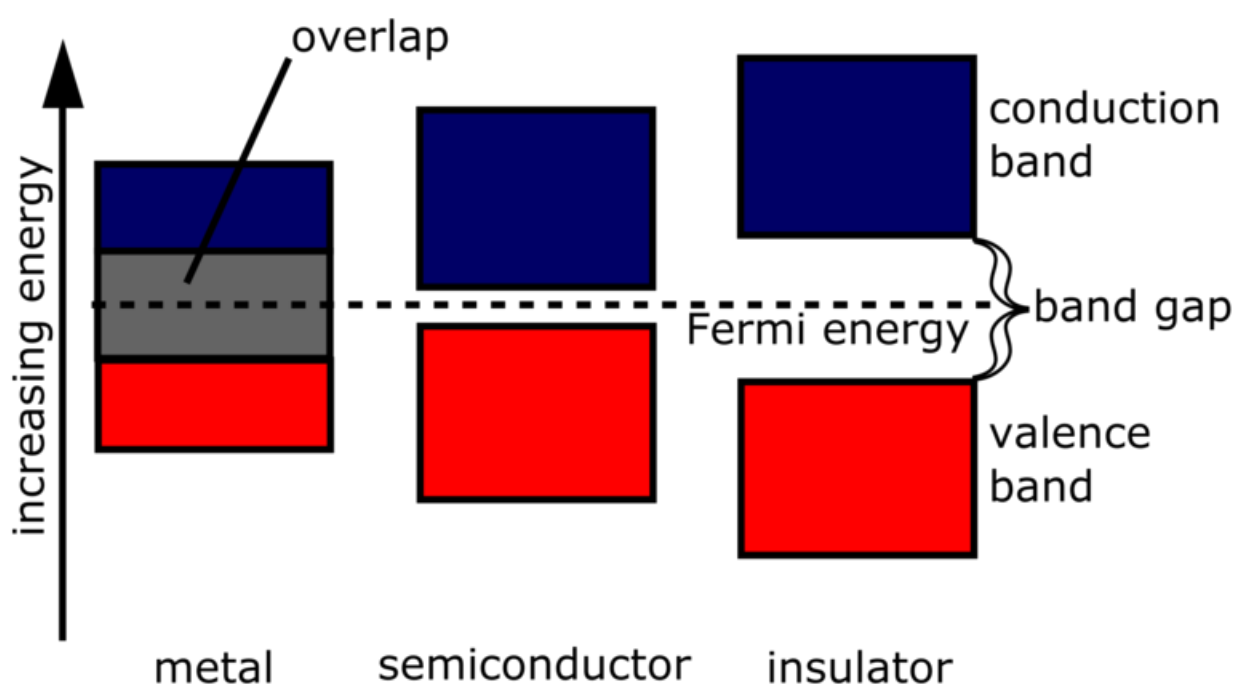


Рисунок 1.4. Зона структура матеріалів [16]

Як вже було описано вище графен може проявляти два види провідності, як провідникову так і напівпровідникову, в залежності від деформації матеріалу. Тобто зміна просторової структури матеріалу призводить до викривлення зон і появи зони заборони, що і призводить до появи напівпровідникових властивостей. В свою чергу носіями електричного заряду в графені можуть виступати як електрони так і дірки, в залежності від полярності прикладеної до матеріалу напруги.

Кристалічна структура графена складається з двох еквівалентних подрешеток, що призводить до утворення двох енергетичних зон і двох "конічних" точок на рівні нульового заряду носіїв, в яких валентна зона і зона провідності стикаються. В результаті носії заряду в графені поведуться як фотони, або безмасові квазічастинки з постійною "ефективною" швидкістю світла (швидкістю Фермі) $v_F \approx 10^6$ м / с, які при низьких значеннях енергії описуються релятивістським рівнянням Дірака

В свою чергу зонна структура одношарового дисульфіду молібдену вже має плоску заборонену зону, енергія якої приблизно дорівнює 1.8 еВ. Через це даний матеріал проявляє тільки напівпровідникові властивості і не має проблематики високої провідності.

РОЗДІЛ 2

МЕТОДИКА ТА ТЕХНІКА ЕКСПЕРЕМЕНТУ

2.1 Опис програмного забезпечення та проведення моделювання

Для моделювання електронних властивостей графену та дисульфиду молібдену використовувалось програмне забезпечення “Winmostar” яке надає можливість створювати моделі матеріалів і отримувати розрахунки на їх основі за допомогою таких інструментів, як GAMESS, NWChem, LAMMPS, Quantum ESPRESSO і FDMNES.

Використання цього програмного пакету обумовлено його зручністю, зрозумілістю інтерфейсу та доступністю. Окрім цього користувачам надається досить повна документація щодо можливостей програми. Для використання цього продукту є можливість оформити безкоштовну ліцензію для студентів вищих навчальних закладів. [17]

Для отримання результатів було використано такий інструмент як Quantum ESPRESSO, що застосовується для розрахунку електронних структур та моделювання матеріалів на основі теорії функціоналу потенціалу, базисних наборів плоских хвиль (PWscf) та псевдопотенціалів.

Pwscf аббревіатура, що розшифровується як Plane-Wave Self-Consistent Field. Даний програмний набір використовується для розрахунку електронних властивостей матеріалів з використанням теорії збурень функціоналу щільності та теорії функціоналу щільності. Забезпечується розрахунок використанням базисних нескінченних плоских хвиль та псевдопотенціалів.

Функціональні можливості Quantum ESPRESSO є досить великими. Основні з них представлені нижче:

- Розрахунки основного стану

- Структурна оптимізація, молекулярна динаміка, поверхні потенційної енергії.
- Електрохімія і спеціальні граничні умови
- Спектроскопічні властивості
- Квантовий транспорт

Поширюється Quantum ESPRESSO вільно під ліцензією GNU General Public License та має відкритий вхідних код. Останнє дає можливість підлаштування програмного пакету під потрібний вид дослідження та подальшу модернізацію вже існуючого функціоналу. [18-19].

Моделювання електронних властивостей для графену та дисульфиду молібдену проводилось за наступним планом:

- 1) Побудова моделі матеріалу
- 2) Проведення розрахунку за допомогою програмного пакету Quantum ESPRESSO
- 3) Побудова зонної структури
- 4) Побудова залежності для густини станів
- 5) Побудова залежності для частинної густини станів густини станів
- 6) Побудова 3D моделі електронної густини
- 7) Побудова залежності для потенційної енергії

На першому кроці за допомогою інструментів програмного забезпечення “Winmostar” було створено моделі просторових структур для графену та дисульфиду молібдену. Параметри для цих матеріалів (а саме координати розташування атомів у просторовій моделі) представлені у доданку А.

Кроки 2-7 проводились за допомогою програмного пакету Quantum ESPRESSO та інструментів “Winmostar”

РОЗДІЛ 3

РЕЗУЛЬТАТИ

3.1 Комп'ютерне моделювання електронних властивостей графену

Як було зазначено у другому розділі першим кроком для аналізу даних було побудовано тривимірну просторову модель матеріалу, яка представлена на рисунку 2.1

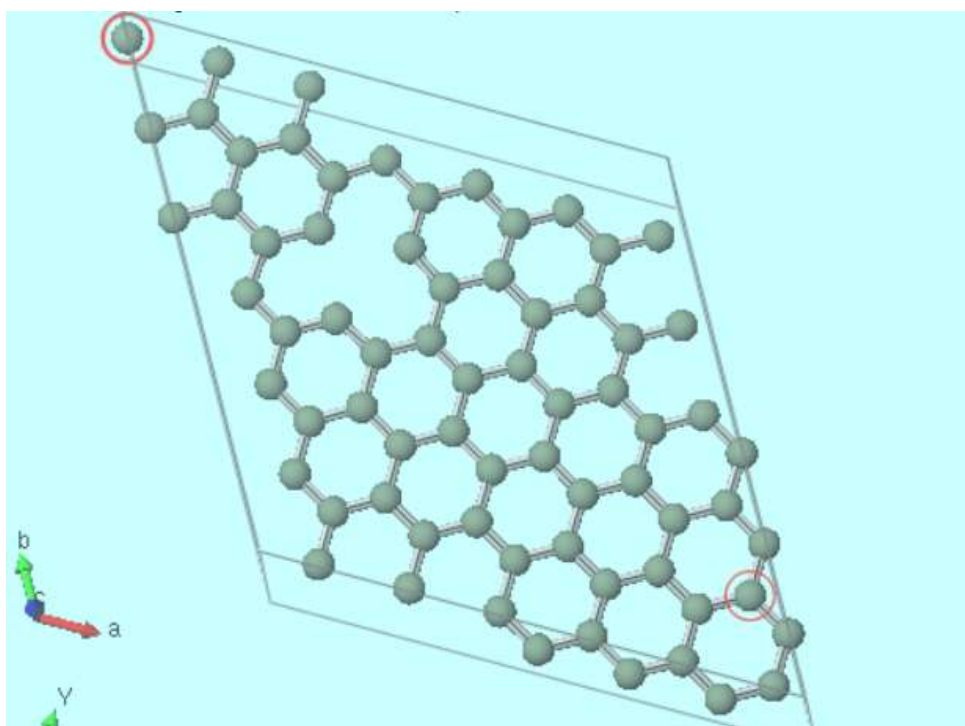


Рисунок 3.1 Просторова структура графену

Після проведення розрахунків за допомогою програмного пакету Quantum ESPRESSO було отримано залежності та моделі представлені на рисунках 3.2-3.6

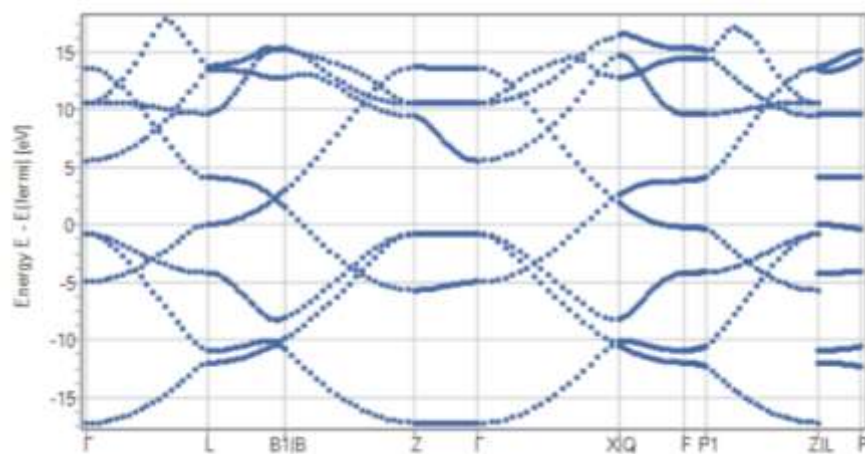


Рисунок 3.2. Зонна структура графену

Зонна структура показує розподіл енергетичних зон матеріалу. Дану залежність для графену можна побачити на рисунку 3.2. У випадку недеформованого матеріалу, який розглядається в цій роботі, можна судити про його металічні властивості. А саме про відсутність забороненої зони, яка ярко виражена у напівпровідниках та діелектриках

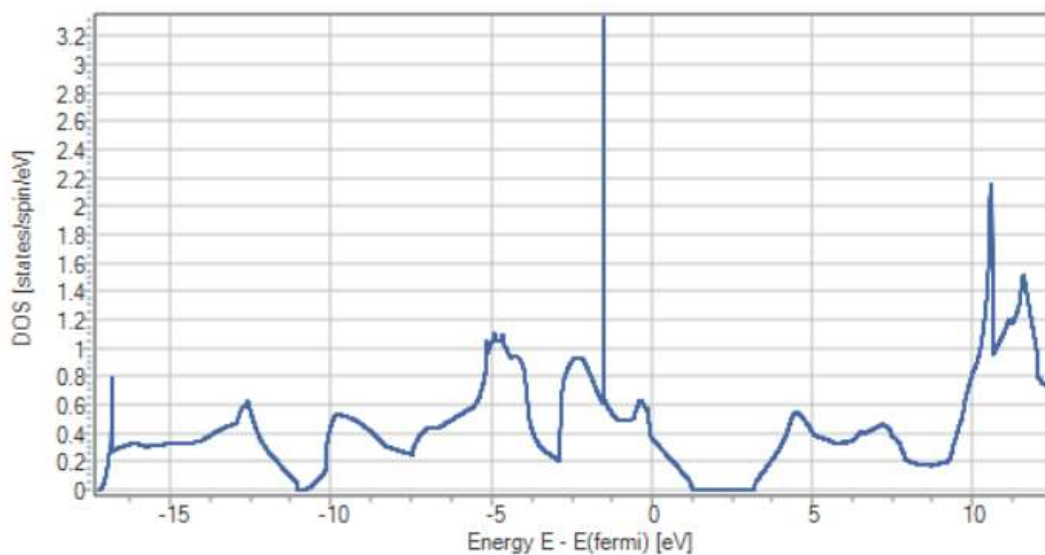


Рисунок 3.3. Густина станів графену

У хімії твердого тіла густиною станів є відношенням кількості енергетичних станів до значення енергетичного проміжку. В англійській літературі дана величина має таке позначення, як DOS. На рисунку 3.3 зображено розподіл за енергіями цієї величини у графені.

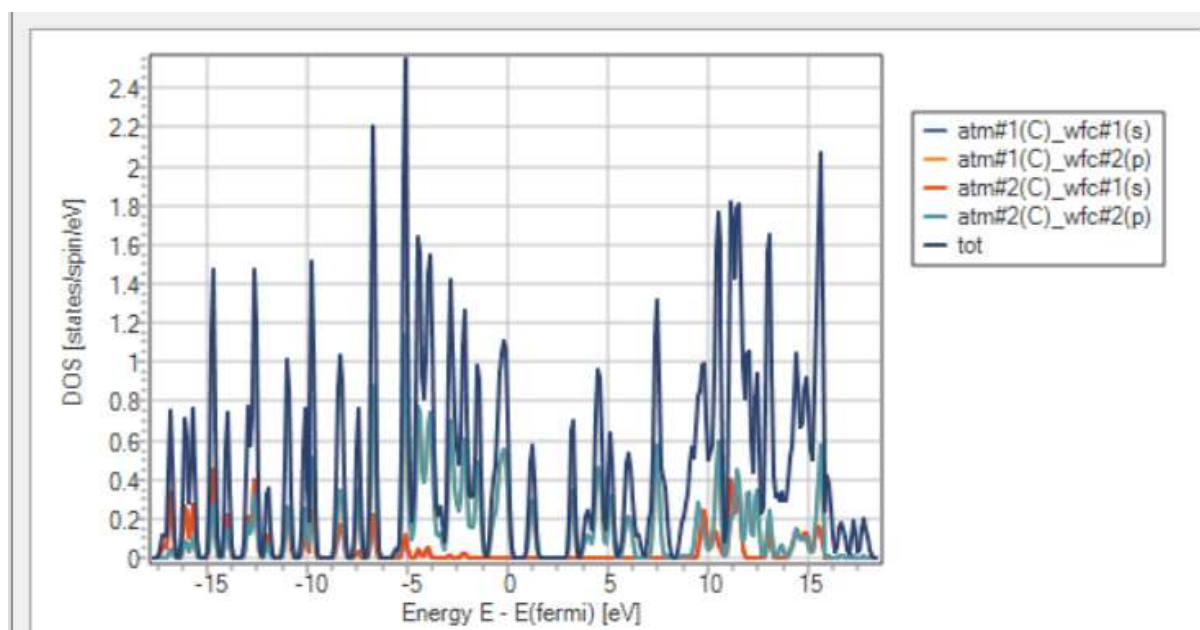


Рисунок 3.4. Частинна густина станів графену

Частинна густина станів (The projected/partial density of states (PDOS)) – це залежність, що показує внесок кожного окремого атому у загальну густина станів і являє собою відносну величину. Для графену ця залежність показана на рисунку 3.4

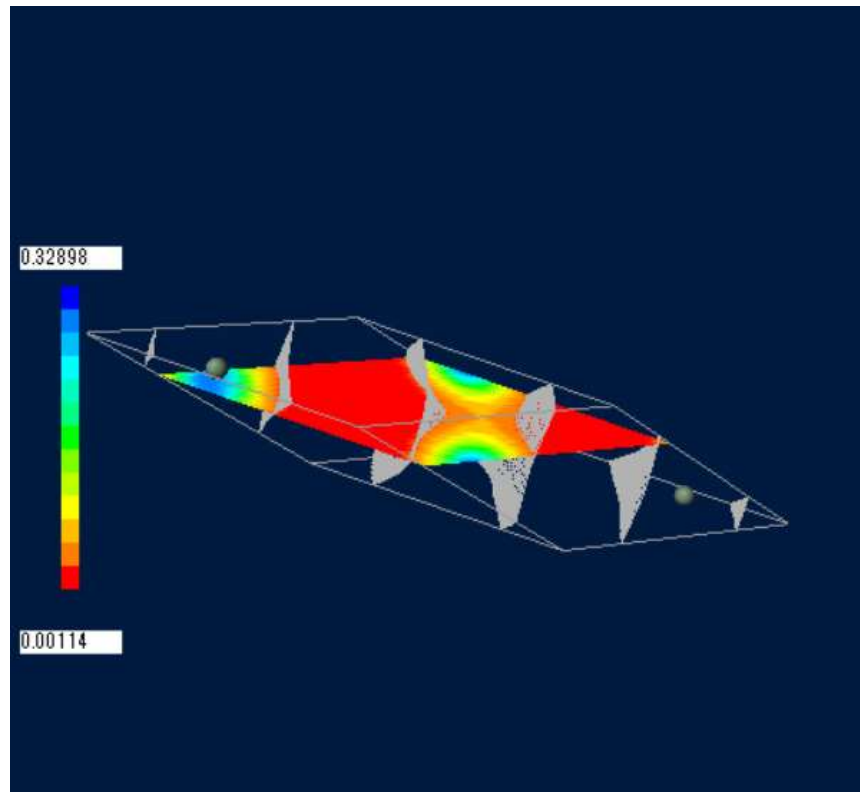


Рисунок 3.5. Електронна щільність графену.

Залежність електронної щільності показує розподіл електронів у просторі навколо атомів. На рисунку 2.5 даний показник змінюється від мінімального значення 0,00114 до 0,32898.

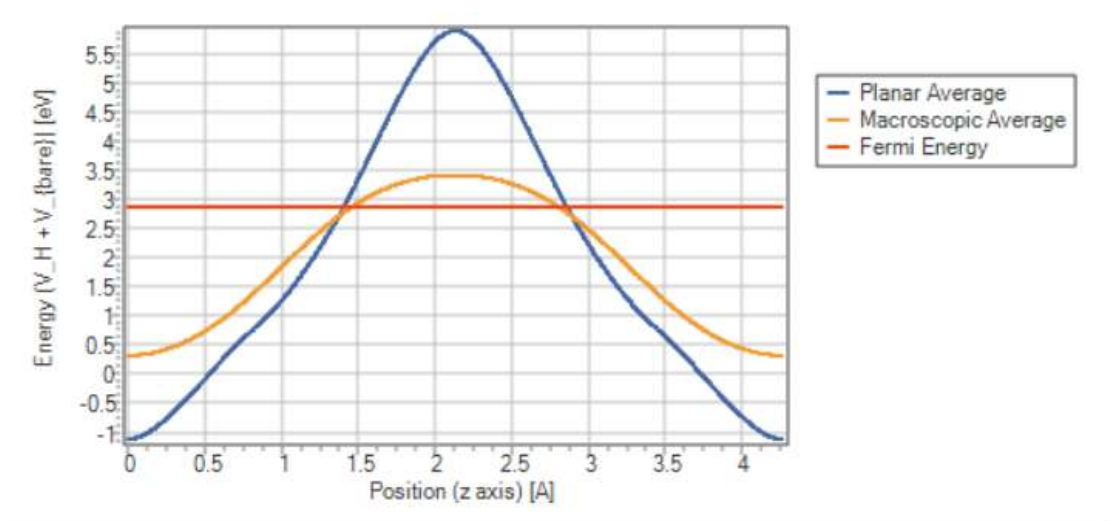


Рисунок 3.6. Розподіл потенціальної енергії графену

Розподіл потенціальної енергії, представлений на рисунку 2.6 наглядно демонструє енергетичний розподіл відносно значення енергії фермі для досліджуваного матеріалу.

3.2. Комп'ютерне моделювання електронних властивостей дисульфиду молібдену

Як і при моделюванні графену першим кроком є побудова просторової структури матеріалу, що представлена на рисунку 2.7.

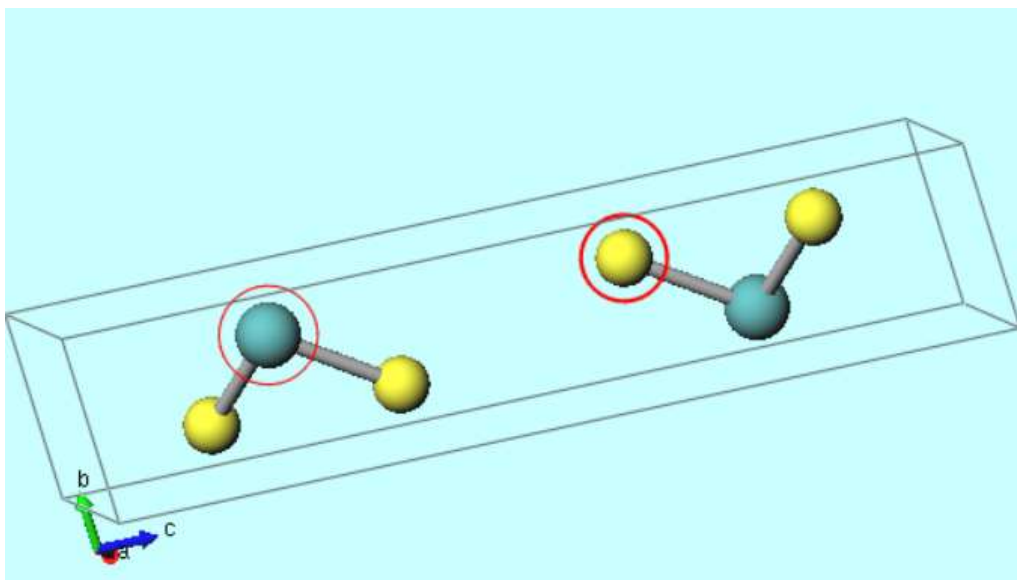


Рисунок 3.7. Просторова структура дисульфиду молібдену.

Після проведення розрахунків за допомогою програмного пакету Quantum ESPRESSO було отримано залежності та моделі представлені на рисунках 3.8-3.9

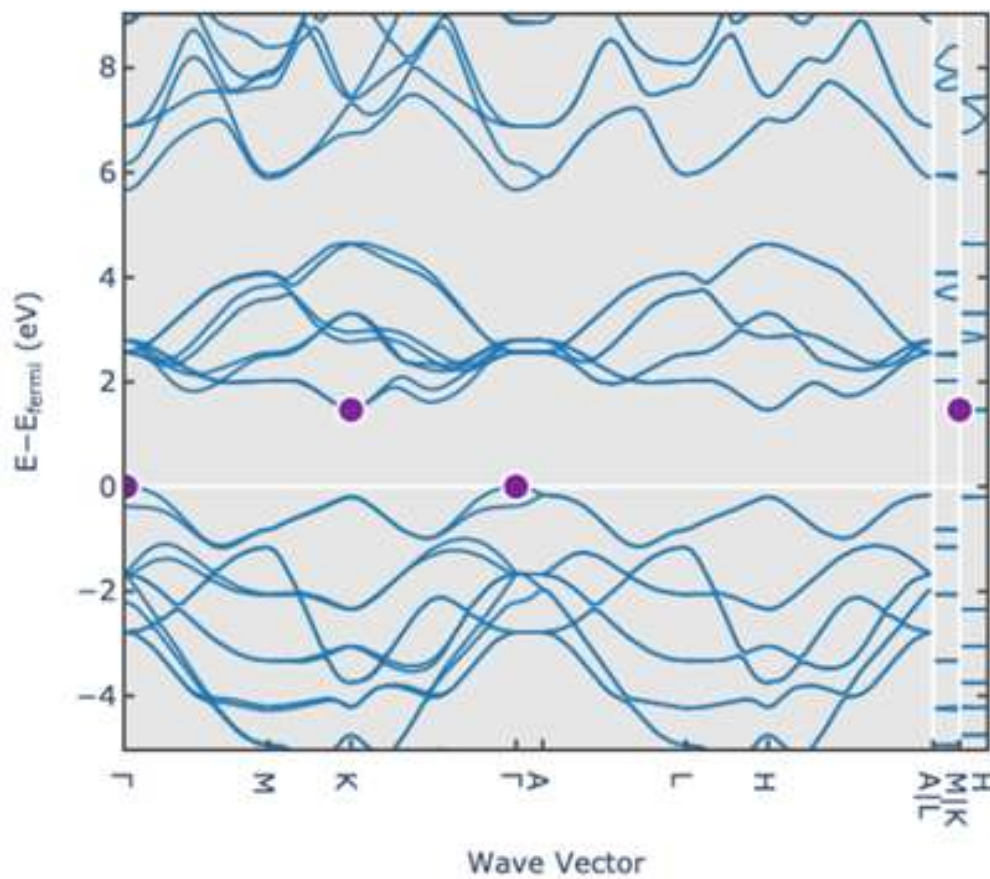


Рисунок 3.8. Зонна структура дисульфиду молібдену

Як можна побачити з зонної структури дисульфиду молібдену, досліджуваний матеріал проявляє напівпровідникові властивості

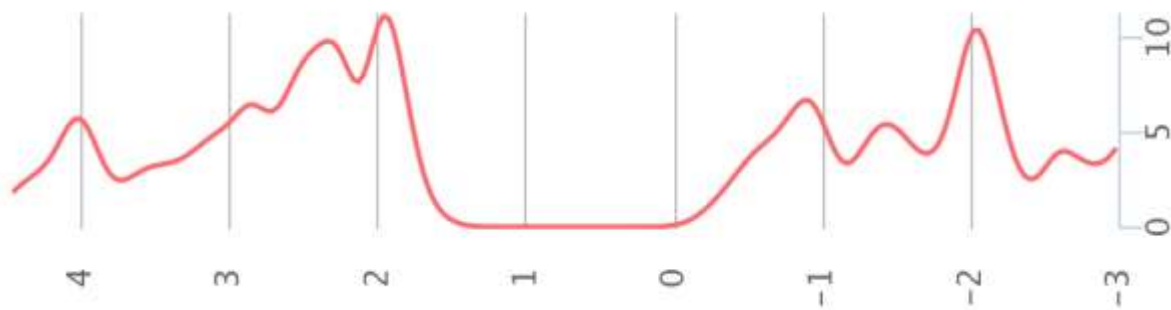


Рисунок 3.9. Густина станів дисульфиду молібдену

На рисунку 3.10 зображена залежність частинної густини станів для дисульфиду молібдену. На цьому графіку зеленим кольором позначено внесок до загальної густини станів молібдену, а фіолетовим – сірки.

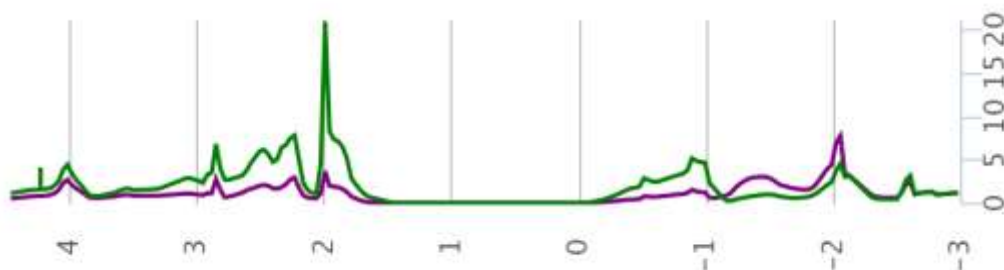


Рисунок 3.10. Частинна густина станів дисульфиду молібдену

ВИСНОВКИ

В даній роботі було проведено моделювання електронних властивостей 2D матеріалів, таких як графен та дисульфід молібдену. Для графену були отримані такі залежності як: Зонна структура, Густина станів, Частинна густина станів, Електронна щільність та Електронна щільність. На основі отриманих результатів можна судити про тип провідності матеріалу (в даному випадку провідникову), розподіл електронів навколо атомів матеріалу, густину станів та внесок атомів карбону до загальної густини станів.

Для дисульфиду молібдену були отримані наступні залежності: Зонна структура, Густина станів та Частинна густина станів. Як можна побачити з цих залежностей матеріал має напівпровідниковий тип провідності та найбільший внесок до загальної густини станів вносить молібден.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. Углерод во всем своем многообразии Подгорный Д.А., Учебное пособие, Челябинск 2014
2. Malekian, F., Ghafourian, H., Zare, K., Sharif, A. A., & Zamani, Y. (2019). Recent progress in gas separation using functionalized graphene nanopores and nanoporous graphene oxide membranes. *The European Physical Journal Plus*, 134(5). doi:10.1140/epjp/i2019-12612-4
3. 2. Shuang, F., & Aifantis, K. E. (2020). Dislocation-Graphene Interactions in Cu/Graphene Composites and Effect of Boundary Condition. *Carbon*. doi:10.1016/j.carbon.2020.09.043
4. 3. Javvaji, B., He, B., & Zhuang, X. (2018). The generation of piezoelectricity and flexoelectricity in graphene by breaking the materials symmetries. *Nanotechnology*, 29(22), 225702. doi:10.1088/1361-6528/aab5ad
5. 4. Shiau, L. L., Goh, S. C. K., Wang, X., Zhu, M., Tan, C. S., Liu, Z., & Tay, B. K. (2019). Graphene–Metal Nanoparticles for Enhancing Thermoelectric Power Factor. *IEEE Transactions on Nanotechnology*, 18, 1114–1118. doi:10.1109/tnano.2019.2948077
6. Tunable Graphene Bandgap Opens the Way to Nanoelectronics and Nanophotonics.– ScienceDaily, June 15, 2009. <http://www.sciencedaily.com/releases/2009/06/090610133453.htm>
7. Nature, June 11, 2009
7. P.R. Wallace “The Band Theory of Graphite“, *Phys.Rev.* 71, 622 (1947)
8. Браже, Р. А. Компьютерное моделирование физических свойств супракристаллов / Р. А. Браже, А. А. Каренин // Известия высших учебных заведений. Поволжский регион. Физико- математические науки. – 2011. – Т. 18. – № 2. – С. 105–112.
9. Enyashin, A. N. Graphene allotropes / A. N. Enyashin, A. L. Ivanovskii // *Phys. Status Solidi (b)*. – 2011. – V. 8. – P. 1879–1883.

10. Беленков, Е. А. Классификация структурных разновидностей углерода / Е. А. Беленков, В. А. Грешняков // ФТТ. – 2013. – Т. 55. – № 8. – С. 1640–1650.
11. Подливаев, А. И. Кинетическая устойчивость октаграфена / А. И. Подливаев, Л. А. Опенов // ФТТ. – 2013. – Т. 55. – № 12. – С. 2464–2467.
12. Atomically Thin MoS₂: A New Direct-Gap Semiconductor, Mak et al., Phys. Rev. Lett., 105, 136805 (2010)
13. Radisavljevic B. et. al. Single-layer MoS₂ transistors // Nature Nanotechnology. — 2011. — Т. 6. — С. 147—150. — doi:10.1038/nnano.2010.279. — Bibcode: 2011NatNa...6..147R. — PMID 21278752
14. Wang, H., Yu, L., Lee, Y.-H., Shi, Y., Hsu, A., Chin, M. L., ... Palacios, T. (2012). Integrated Circuits Based on Bilayer MoS₂ Transistors. Nano Letters, 12(9), 4674–4680. doi:10.1021/nl302015v
15. Sarkar, D., Xie, X., Liu, W., Cao, W., Kang, J., Gong, Y., ... Banerjee, K. (2015). A subthermionic tunnel field-effect transistor with an atomically thin channel. Nature, 526(7571), 91–95. doi:10.1038/nature15387
16. Wikimedia Commons. (September 26, 2015). Band Gap Comparison [Online]. Available: https://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/thumb/0/0b/Band_gap_comparison.svg/2000px-Band_gap_comparison.svg.png
17. <https://winmostar.com/en/>
18. P. Giannozzi. «QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials» / P. Giannozzi; S. Baroni; N. Bonini; M. Calandra; A. Smogunov // Journal of Physics Condensed Matter, 2017
19. Sharon Ann. «Understanding Solid State Physics» / Holgate, Sharon Ann // CRC Press, p.177–178, 2009.

ДОДАТКИ

Додаток А

Координати, які були використані для побудови просторових моделей матеріалів

Таблиця А.1. Координати для побудови графенового листа

№	Матеріал	Координата X	Координата Y	Координата Z
1	C	2,4506	2,8415	3,7050
2	C	8,5709	9,2770	3,7181
3	C	11,0680	0,7021	3,7207
4	C	3,6821	0,7220	3,7050
5	C	12,3039	2,8572	3,7181
6	C	6,0905	9,2682	3,7207
7	C	1,2180	2,1317	3,6865
8	C	8,5518	10,7007	3,6959
9	C	19,6175	12,8253	3,7009
10	C	2,4551	0,0026	3,6865
11	C	13,5314	2,1312	3,6959
12	C	20,8565	10,6931	3,7009
13	C	8,6153	2,1439	3,7100

14	C	4,9106	4,2809	3,7052
15	C	8,6051	6,4296	3,7087
16	C	6,1287	6,4234	3,7100
17	C	6,1508	2,1466	3,7052
18	C	9,8470	4,2924	3,7087
19	C	3,6769	4,9814	3,7508
20	C	9,8334	7,1465	3,7523
21	C	8,6196	0,7211	3,7526
22	C	6,1485	0,7297	3,7508
23	C	11,0780	5,0046	3,7523
24	C	4,8946	7,1316	3,7526
25	C	2,4553	4,2594	3,7562
26	C	9,8147	8,5701	3,7606
27	C	17,1522	12,8232	3,7615
28	C	4,9164	0,0241	3,7562
29	C	12,3056	4,2834	3,7606
30	C	19,6339	8,5522	3,7615
31	C	15,9982	4,9557	3,8090
32	C	11,0446	9,2914	3,8079

33	C	17,1465	11,3829	3,8015
34	C	12,2272	11,4453	3,8090
35	C	13,5421	4,9942	3,8079
36	C	18,3798	9,2604	3,8015
37	C	16,0021	6,3791	3,8644
38	C	12,3105	8,5879	3,8628
39	C	15,8959	10,6538	3,8465
40	C	13,4658	10,7439	3,8644
41	C	13,5569	6,4429	3,8628
42	C	17,1271	8,5350	3,8465
43	C	14,7609	2,8405	3,7153
44	C	9,7769	11,4178	3,7153
45	C	19,6199	11,4006	3,7226
46	C	14,7633	4,2653	3,7829
47	C	11,0159	10,7144	3,7829
48	C	17,3812	10,6808	3,7789
49	C	14,8092	7,0586	308979
50	C	13,4655	9,3711	3,8979
51	C	15,8979	9,2378	3,8671

52	C	11,0699	2,1359	3,7096
53	C	3,6854	2,1415	3,6934
54	C	7,3371	8,5599	3,7096
55	C	9,8472	2,8594	3,7043
56	C	4,9142	2,855	3,6950
57	C	7,3603	7,1394	3,7043
58	C	7,3820	2,8609	3,6929
59	C	6,1408	4,9968	3,6929
60	C	8,6109	5,0035	3,6930
61	C	7,3778	4,2870	3,6807
62	C	3,6636	6,4130	3,7862
63	C	11,0852	6,4413	3,7867
64	C	7,3857	0,0074	3,7862
65	C	17,2216	7,1054	3,8425
66	C	12,3077	7,1517	3,8484
67	C	14,7007	11,4438	3,8425
68	C	7,3119	11,4077	3,6721
69	C	13,5316	0,7039	3,6721
70	C	1,2197	0,7087	3,6614

71	C	22,0825	12,8316	3,6577
----	---	---------	---------	--------

Таблиця А.2. Координати для побудови структури дисульфїду молїбдену

№	Матеріал	Координата X	Координата Y	Координата Z
1	Mo	0,0000	1,8419	3,7198
2	Mo	1,5952	0,9210	11,1593
3	S	1,5952	0,9210	5,2846
4	S	0,0000	1,8419	12,7241
5	S	1,5952	0,9210	2,1549
6	S	0,0000	1,8419	9,5944