



Ab initio izračun elektronske strukture jednoslojnog molibden disulfida

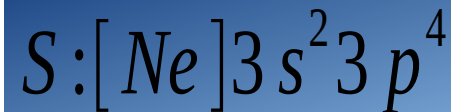
Antonio Štrkalj

Mentor: Vito Despoja

Sadržaj

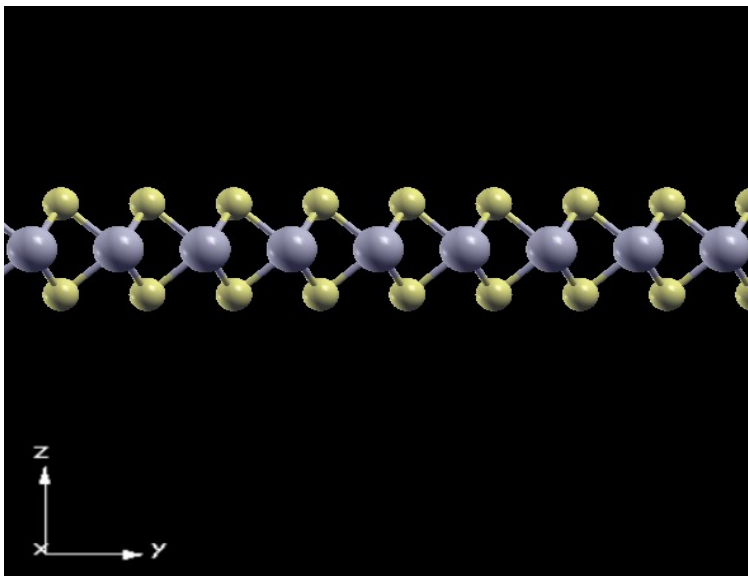
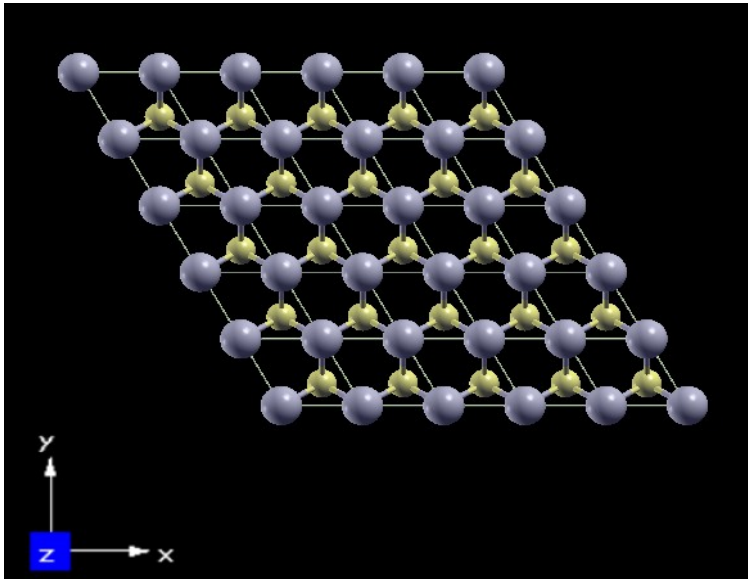
- Uvod
 - Struktura MoS₂
 - Motivacija
 - Teorija funkcionala gustoće (DFT)
- Rezultati
 - Struktura energijskih vrpca
 - Gustoća stanja
 - Parcijalna gustoća stanja
 - JDOS
- Optička svojstva - usporedba rezultata
- Zaključak

Struktura MoS₂



Group →	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
↓ Period																		
1	1 H																	2 He
2	3 Li	4 Be											5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne
3	11 Na	12 Mg											13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar
4	19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr
5	37 Rb	38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe
6	55 Cs	56 Ba	*	72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn
7	87 Fr	88 Ra	**	104 Rf	105 Db	106 Sg	107 Bh	108 Hs	109 Mt	110 Ds	111 Rg	112 Cn	113 Uut	114 Fl	115 Uup	116 Lv	117 Uus	118 Uuo
			*	57 La	58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb	71 Lu
			**	89 Ac	90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No	103 Lr

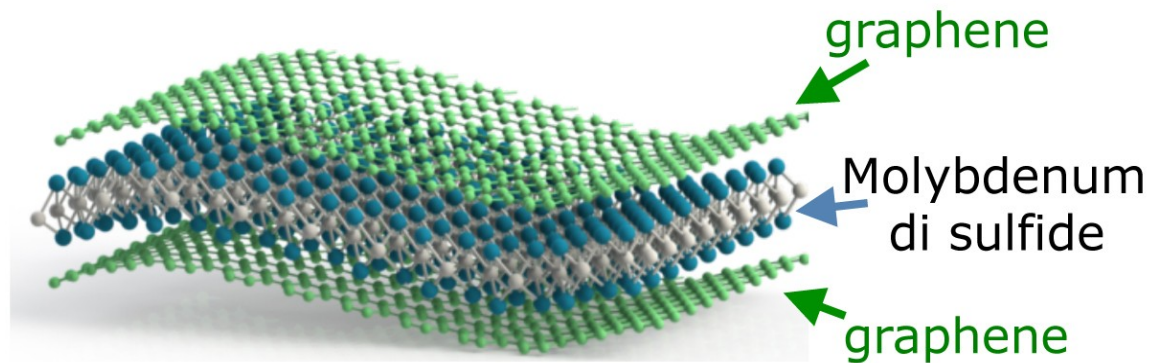
Struktura MoS₂



- Udaljenost između susjednih molibdena je 3.16Å
- Udaljenost između sumpora u različitim ravninama je 3.1493Å
- Na sobnoj temperaturi je poluvodič
- Direktni procjep među vrpčama kod jednoslojnih uzoraka veličine **1.8 eV**
- Svojstva osjetljiva na vanjski tlak, temperaturu, naprezanje
- Postojanje velikih eksitonskih efekata

Motivacija

- Lako ljuštenje i dobivanje tankih i jednoslojnih uzoraka
- Primjene u nanoelektronici, spintronici, optoelektronici
- Kao tranzistor troši 100 000 puta manje energije od silicijskih
- Spajanje s grafenom za dobivanje prozirnih solarnih ploča



Teorija funkcionala gustoće (DFT)

- Energija sustava $E[n]$ je funkcional gustoće čestica, minimizacijom dobivamo energiju i gustoću osnovnog stanja
- Točna gustoća se može prikazati kao gustoća pomoćnog sustava ne međudjelujućih čestica
- Jednadžba za pomoćne čestice:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 + U(\vec{r}) + V_H(\vec{r}) \right) \psi_m(\vec{r}) + \int d\vec{r}' V_{xc}(\vec{r}, \vec{r}') \psi_m(\vec{r}') = E_m \psi_m(\vec{r})$$

Teorija funkcionala gustoće (DFT)

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla}^2 + U(\vec{r}) + V_H(\vec{r}) \right) \psi_m(\vec{r}) + \int d\vec{r}' V_{xc}(\vec{r}, \vec{r}') \psi_m(\vec{r}') = E_m \psi_m(\vec{r})$$

$$V_H = \int d\vec{r}' \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{n(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|}$$

$$V_{xc} = V_x + V_c$$
$$E_{xc} = E_x + E_c$$

- Aproksimacija lokalne gustoće:

$$V_x^{LDA} = -const \cdot \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0} n(\vec{r})^{1/3}$$

Teorija funkcionala gustoće (DFT)

- Metoda ravnih valova (Pwscf):

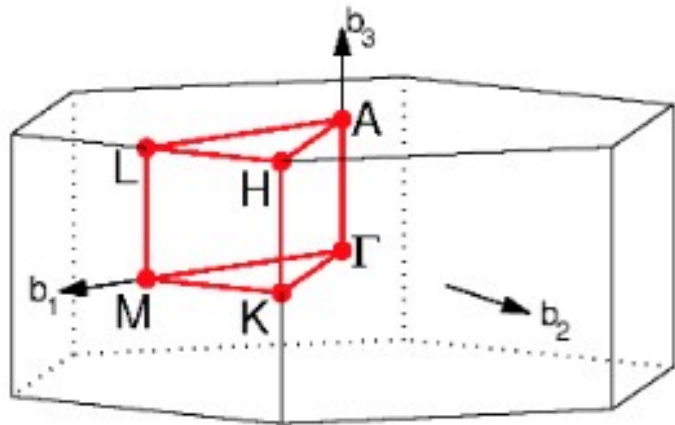
$$\psi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_{\vec{G}} c_{n,\vec{G}}(\vec{k}) e^{i(\vec{k}+\vec{G})\vec{r}}$$

$$n_{n,\vec{k}}(\vec{r}) = |\psi_{n,\vec{k}}(\vec{r})|^2$$

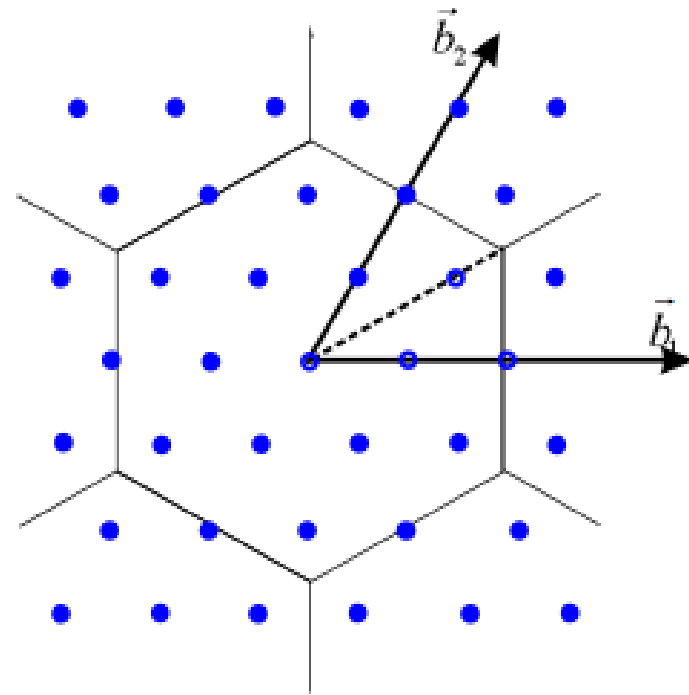
- Ograničenje na vektore G:

$$\frac{\hbar^2 |\vec{k} + \vec{G}|^2}{2m} \leq E_{cut}$$

Recipročni prostor



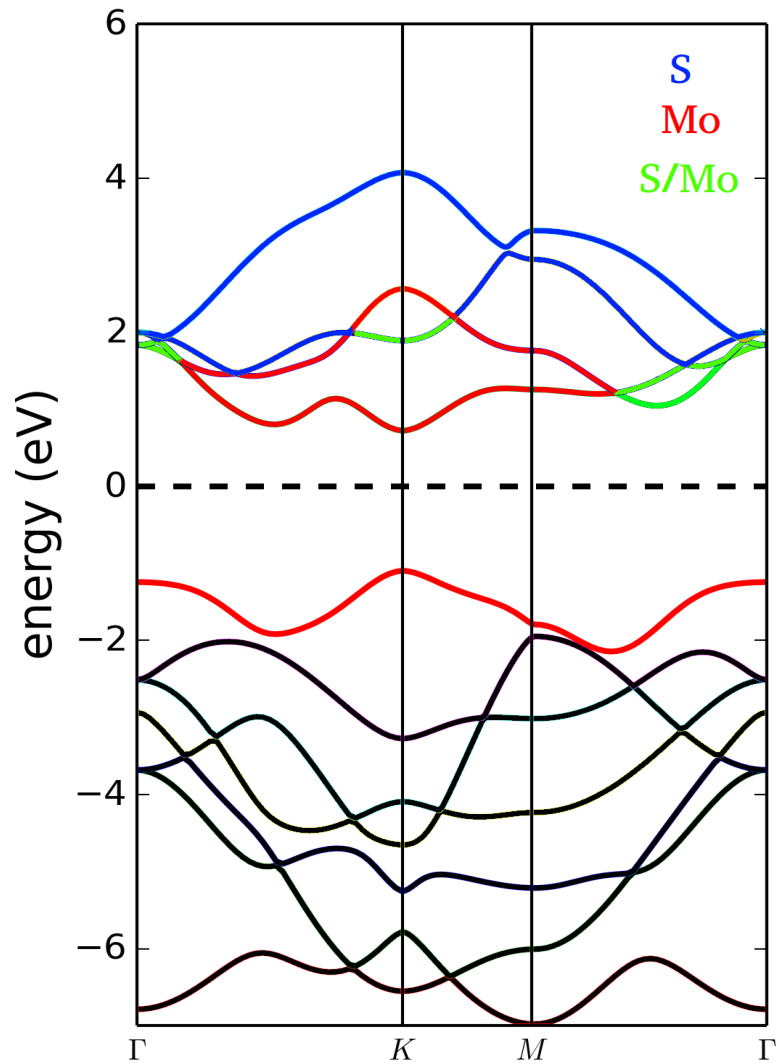
1.B.Z s označenim točkama visoke simetrije



Reducirana 1.B.Z.

$\Gamma - K - M - \Gamma$

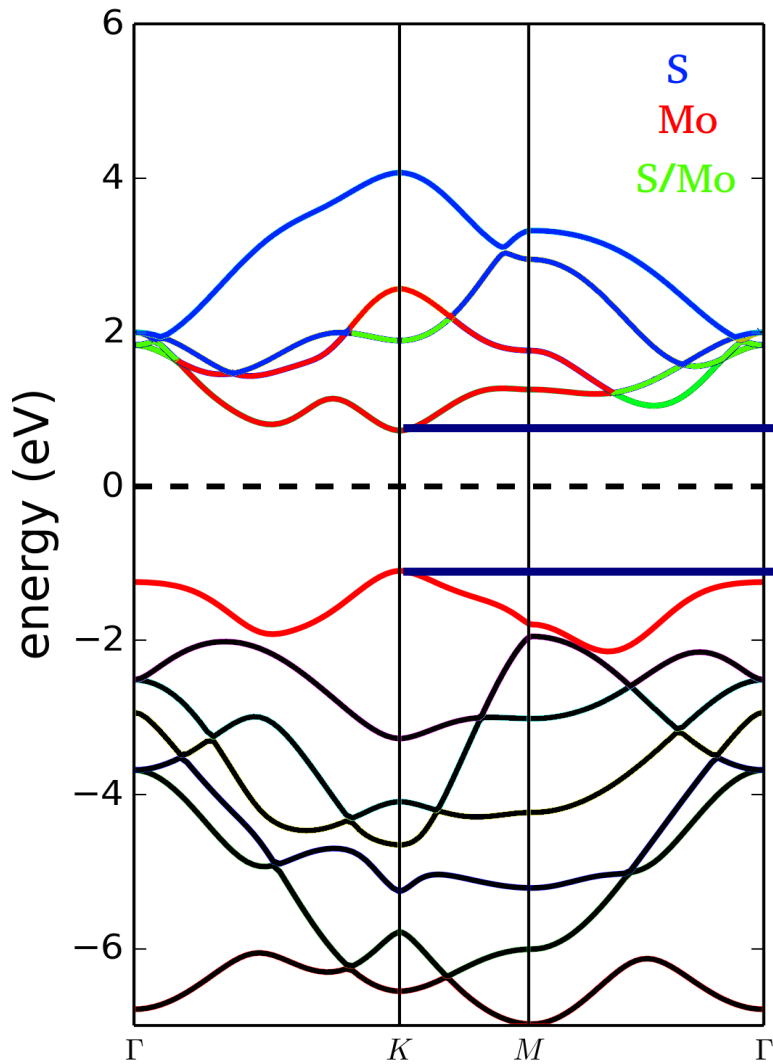
Struktura energijskih vrpca



- E_F se nalazi između vodljive i valentne vrpce

Band struktura jednoslojnog MoS₂

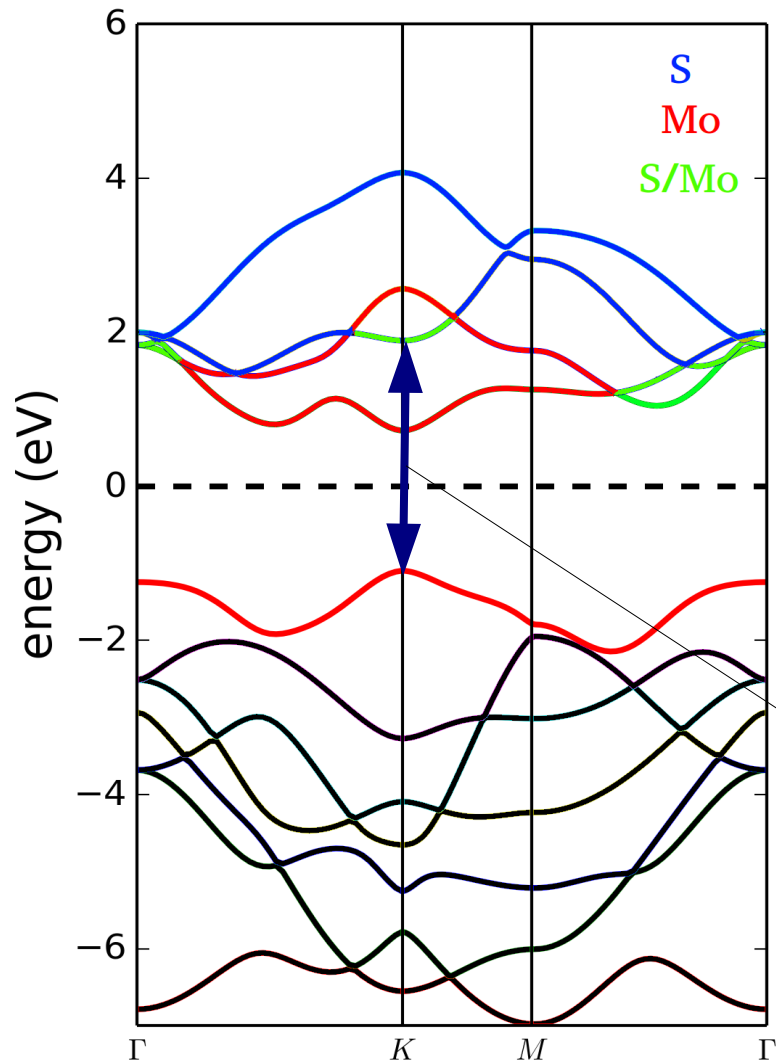
Struktura energijskih vrpca



Band struktura jednoslojnog MoS₂

- E_F se nalazi između vodljive i valentne vrpce
- Energijski procjep veličine **1.814 eV**
↓
eksperiment daje **1.8 eV**

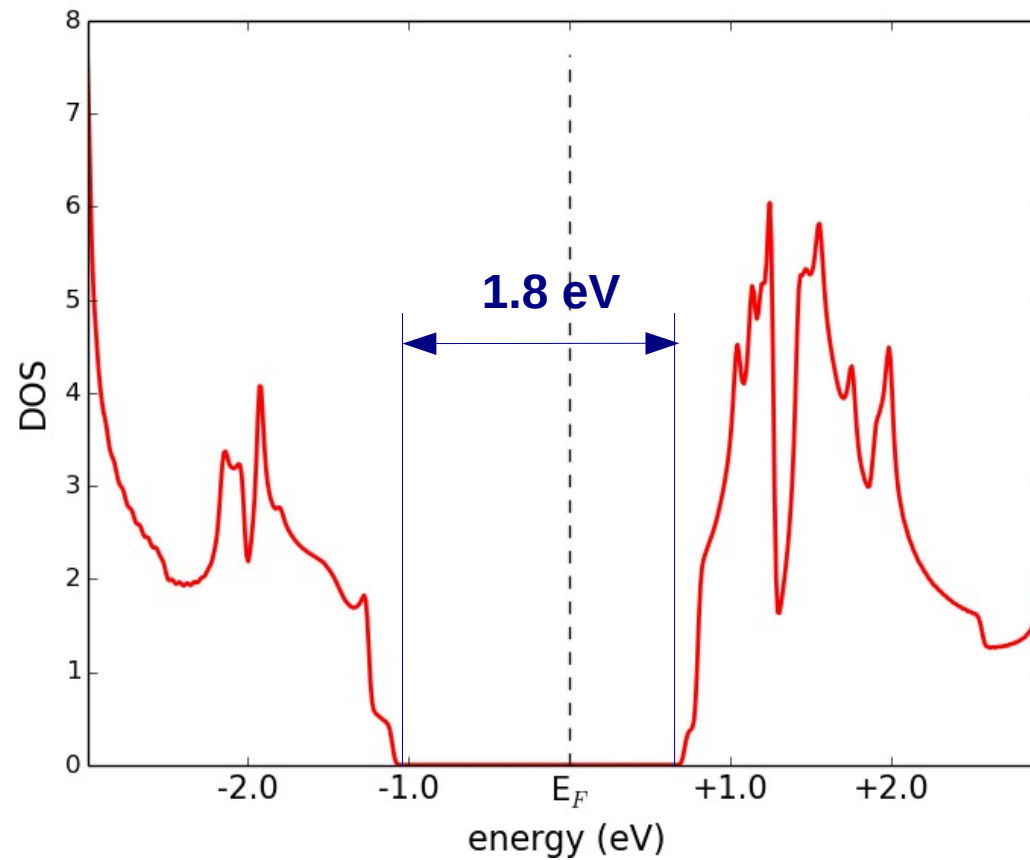
Struktura energijskih vrpca



Band struktura jednoslojnog MoS₂

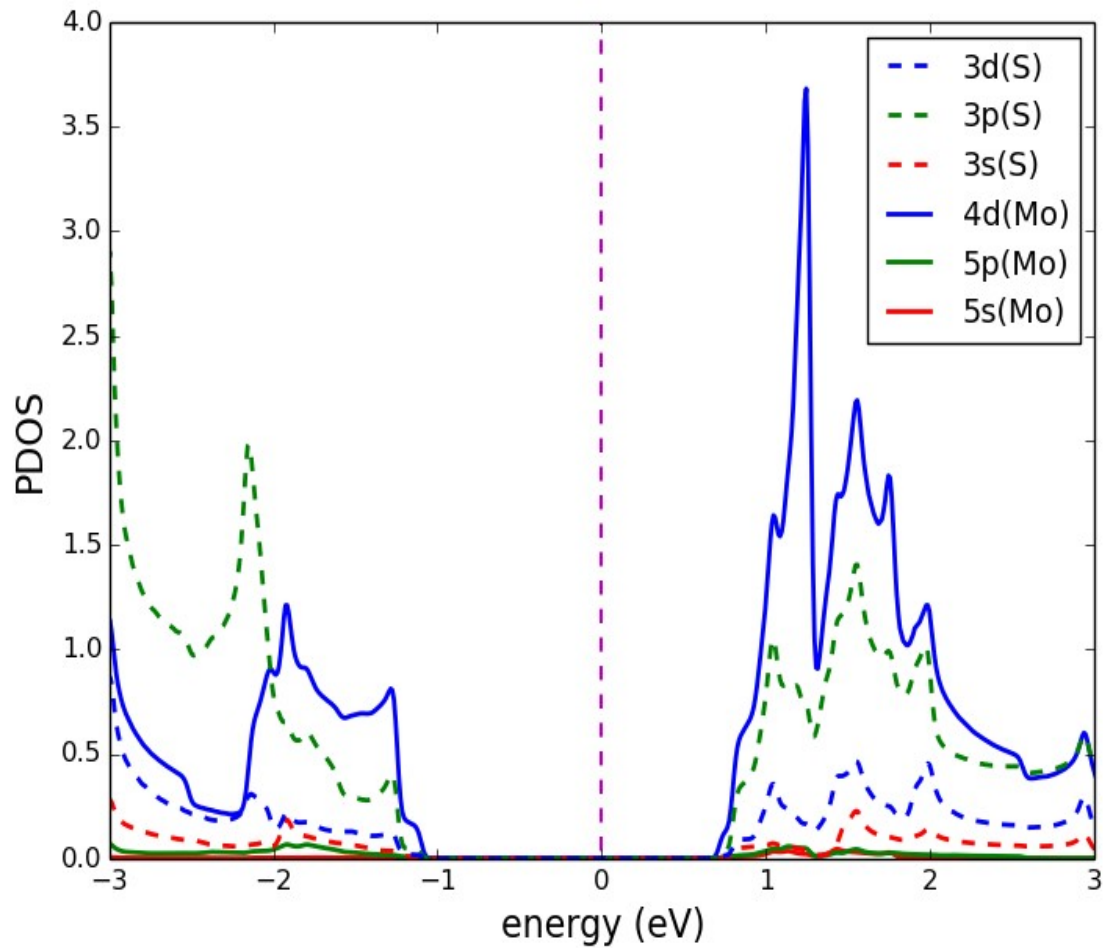
- E_F se nalazi između vodljive i valentne vrpce
- Energijski procjep veličine **1.814 eV**
↓
eksperiment daje **1.8 eV**
- Razmak između zadnje popunjene molibdenove i prve prazne sumporove vrpce je **3.3 eV**

Gustoća stanja



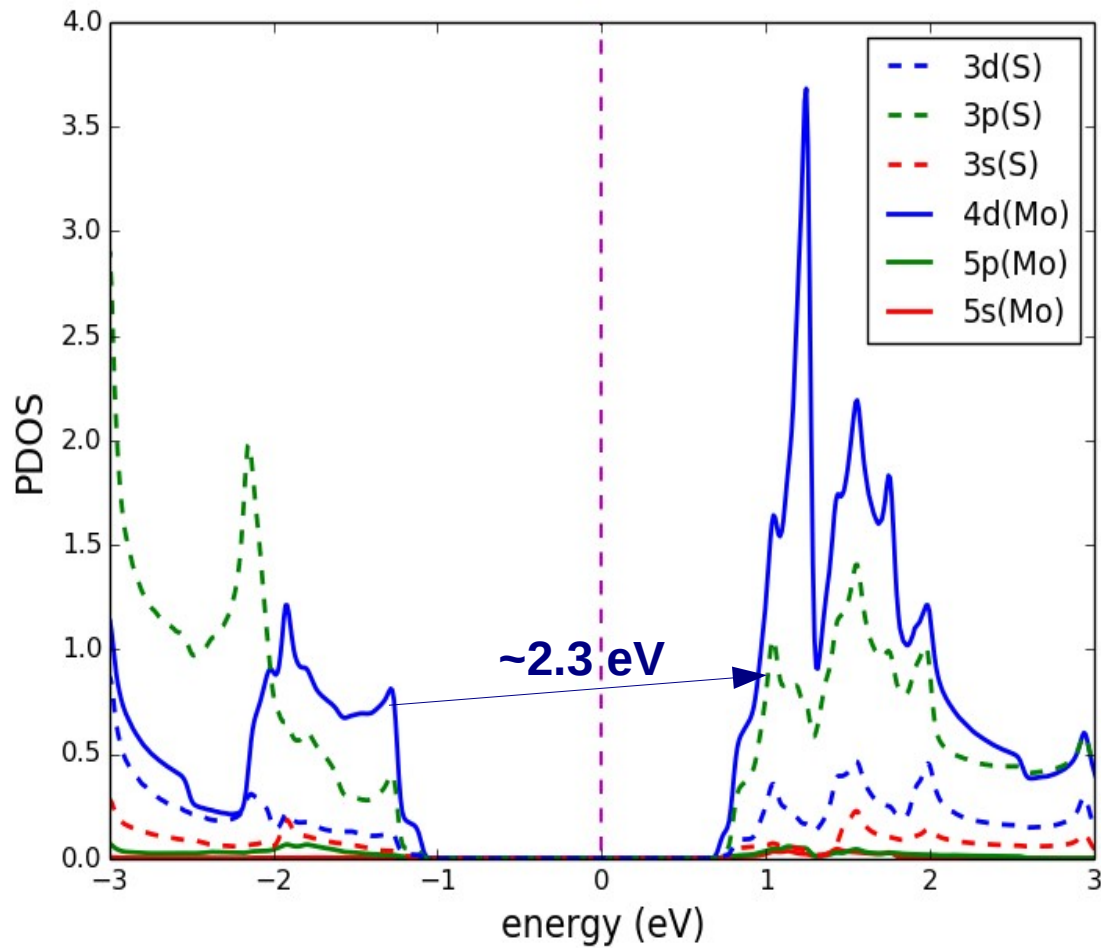
$$g(E) = \frac{1}{N_k} \sum_{n, \vec{k} \in 1.B.Z.} \delta(E - E_{n, \vec{k}})$$

Parcijalna gustoća stanja



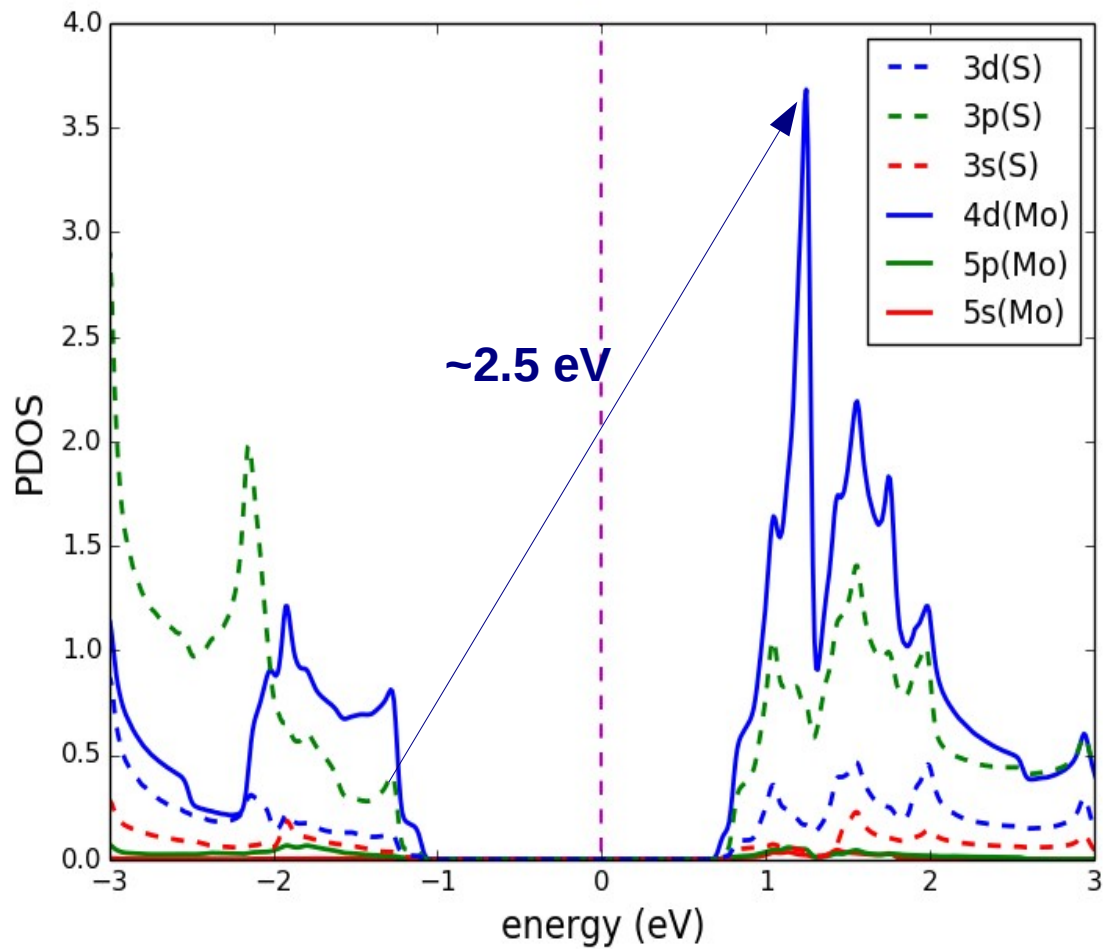
Gustoća stanja po atomskim orbitalama

Parcijalna gustoća stanja



Gustoća stanja po atomskim orbitalama

Parcijalna gustoća stanja



Gustoća stanja po atomskim orbitalama

Optička apsorpcija

- Fermijevo zlatno pravilo:

$$W_{\vec{k}} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle n, \vec{k} | H' | m, \vec{k} \rangle|^2 (f_{n, \vec{k}} - f_{m, \vec{k}}) \delta(E_{n, \vec{k}} - E_{m, \vec{k}} - \omega) ; \quad f_{n, \vec{k}} = \frac{1}{e^{(E_{n, \vec{k}} - E_F)/k_B T} + 1}$$

- Elektromagnetska perturbacija:

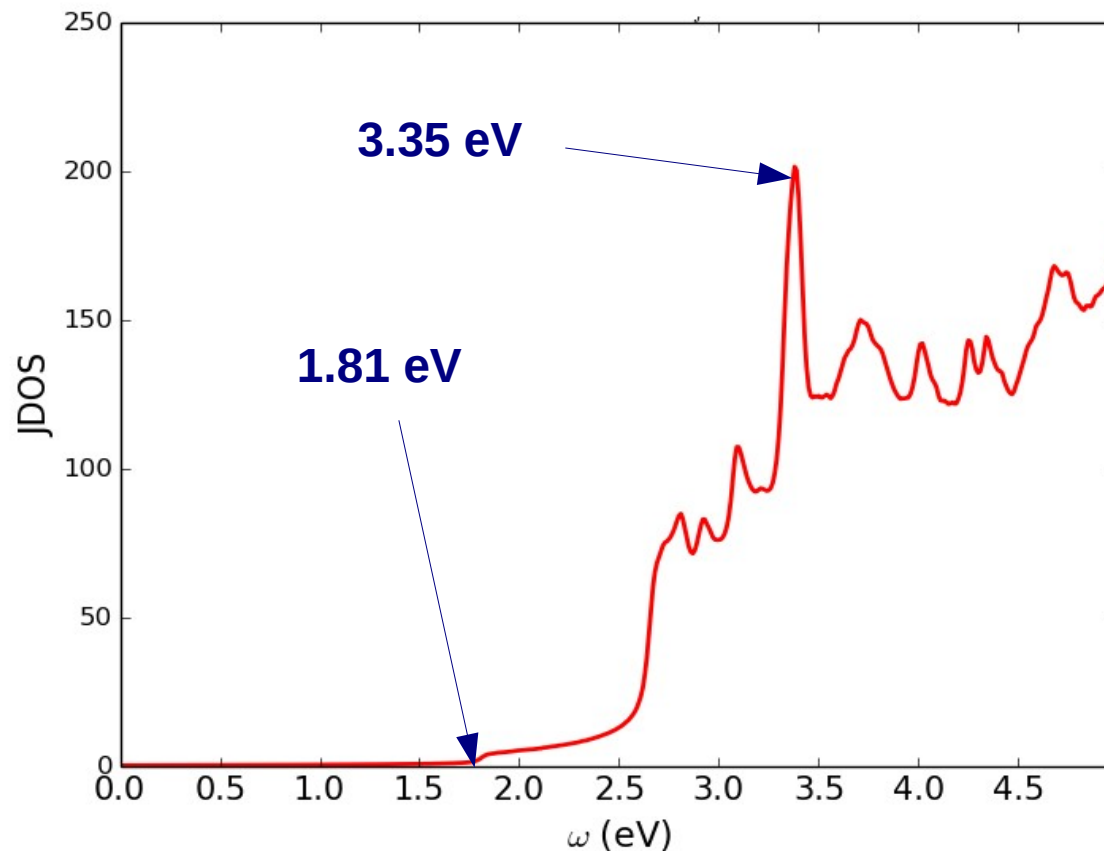
$$H' = - \frac{e \vec{A} \cdot \vec{p}}{mc}$$

- JDOS:

$$g_J(\omega) = \sum_{n, m, \vec{k}} (f_{n, \vec{k}} - f_{m, \vec{k}}) \delta(E_{n, \vec{k}} - E_{m, \vec{k}} - \omega)$$

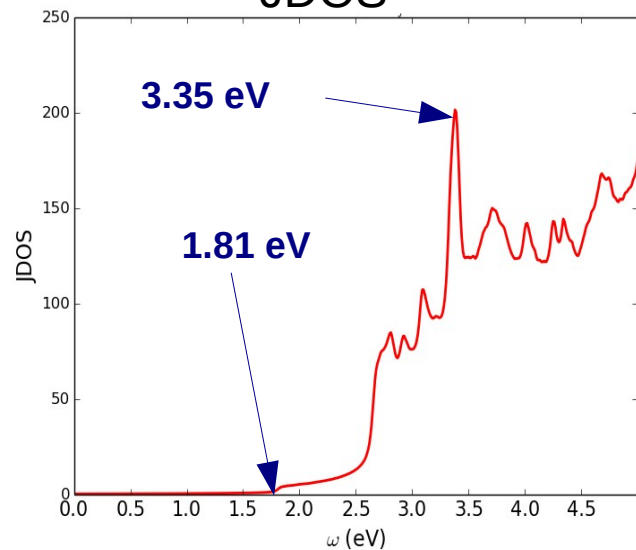
Optička svojstva - JDOS

$$\delta(x-x_0) \rightarrow \frac{1}{\pi} \frac{\frac{\Gamma}{2}}{(x-x_0)^2 + \left(\frac{\Gamma}{2}\right)^2}; \quad \Gamma - \textit{gušenje}$$

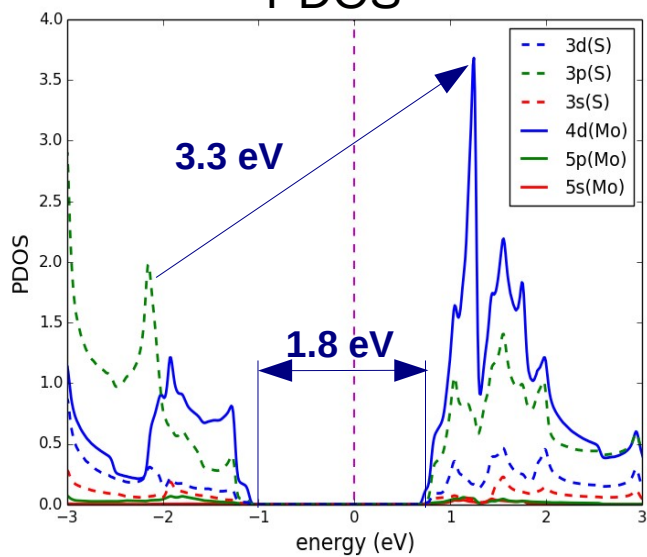


Optička svojstva – usporedba rezultata

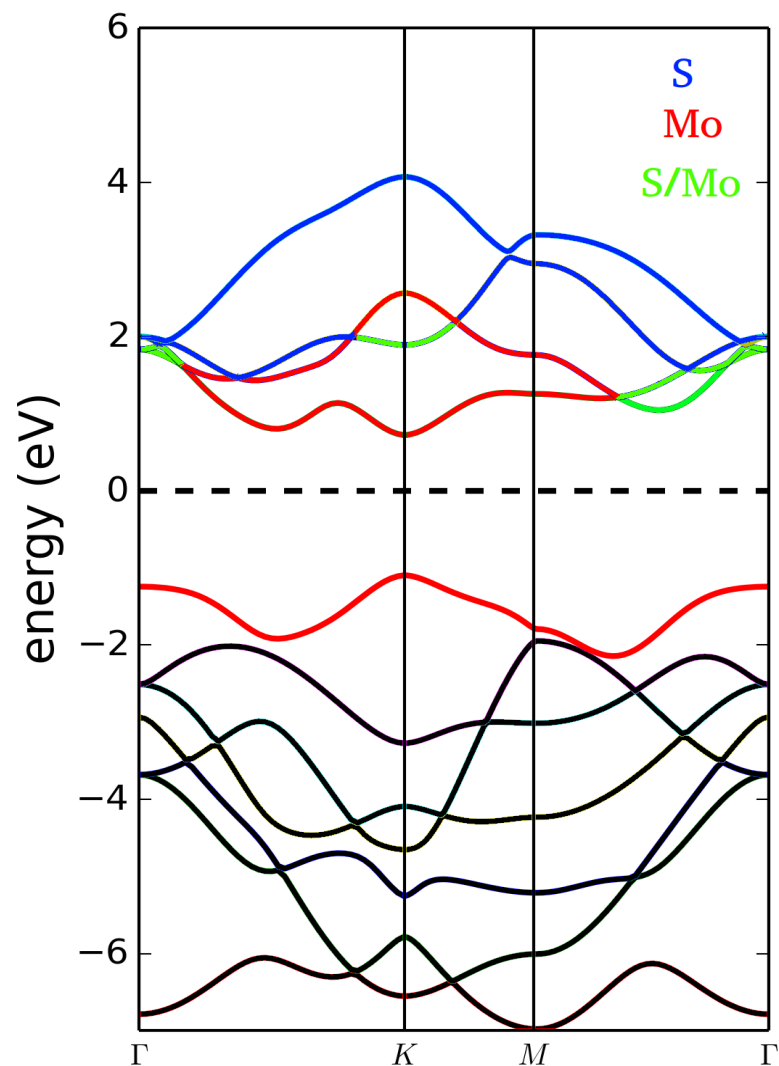
JDOS



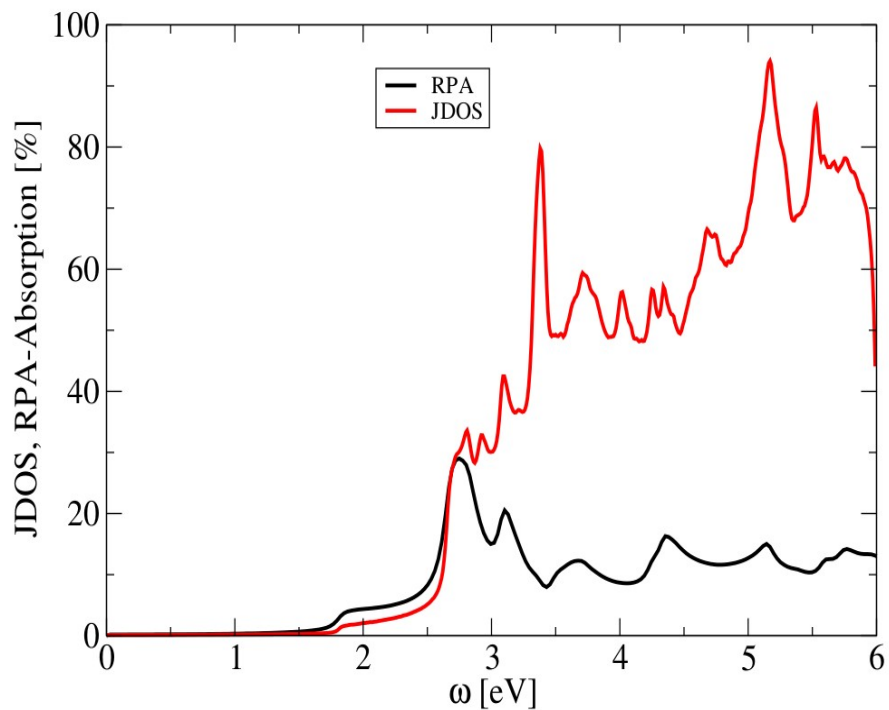
PDOS



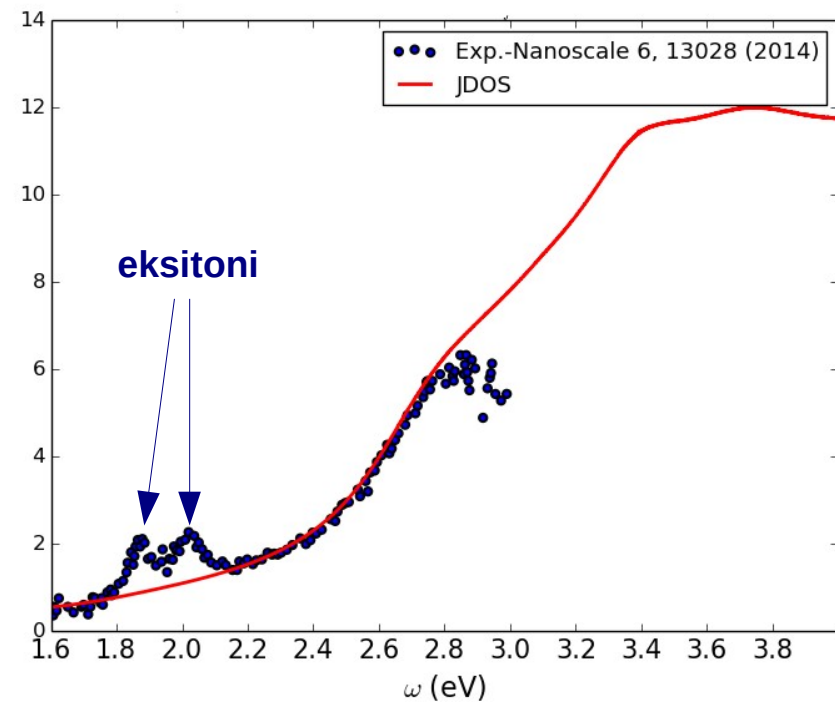
Struktura energijskih vrpca



Optička apsorpcija – usporedba s RPA i eksperimentom



$\Gamma = 50 \text{ meV}$



$\Gamma = 400 \text{ meV}$

Zaključak

- Energijski procjep između vrpca u odličnom slaganju sa eksperimentalnim rezultatom
- Analiza energijskih vrpca i gustoća stanja daju konzistentne rezultate
- Matrični elementi elektromagnetske interakcije nisu pretjerano značajni za energije fotona vidljive svjetlosti – poklapanje JDOS-a i RPA dobivene apsorpcije
- Dobro slaganje dobivene apsorpcije sa eksperimentom



Hvala na pažnji!