

## Комбинационное рассеяние в монослое MoS<sub>2</sub> на кварцевой подложке.

### Расчет из первых принципов.

Н.Л. Мацко<sup>1</sup>, Д.А. Шохонов<sup>1</sup>, В.А. Осипов<sup>1</sup>

<sup>1</sup>ОИЯИ, Дубна, Россия.  
*matsko@theor.jinr.ru*

Дисульфид молибдена MoS<sub>2</sub> - перспективный представитель класса дихалькогенидов переходных металлов. Высокая подвижность носителей, высокие поверхностная активность и коэффициент адсорбции, изменение величины запрещенной щели с количеством слоев и т.д. делают гетероструктуры MoS<sub>2</sub> многообещающими в оптоэлектронике. Комбинационное рассеяние (КР) - эффективный инструмент, позволяющий получить информацию о динамике ионной системы и структуре исследуемого объекта. КР широко используется при изучении гетероструктур MoS<sub>2</sub> на различных подложках, полученных как отслаиванием, так и с помощью хим. осаждения из паровой фазы (CVD). При этом взаимодействие с подложкой влияет на колебательные спектры атомов MoS<sub>2</sub>, что, в свою очередь, проявляется в спектрах КР исследуемой гетероструктуры. Теоретическое описание механизмов, лежащих в основе результирующей картины, может оказать существенную помощь в анализе полученных спектров КР. Среди доступных численных методов расчеты на основе DFT дают наиболее точные результаты.

Целью работы является DFT анализ интерфейса между монослоем MoS<sub>2</sub> и кварцевой подложкой SiO<sub>2</sub> и его влияние на вид КР. Рассматриваются возможные варианты структурирования поверхности, возникающие, в том числе, при различных условиях синтеза. Исследованы три типа поверхности SiO<sub>2</sub> и, соответственно, три типа интерфейса MoS<sub>2</sub>/SiO<sub>2</sub>. Первый - интерфейс с "плотной" поверхностью кварца. Это можно рассматривать как идеальную ситуацию, когда пленка MoS<sub>2</sub> переносится на подложку SiO<sub>2</sub>/Si отслаиванием. Другой тип интерфейса - при наличии ковалентных связей между атомами кислорода в SiO<sub>2</sub> и атомами серы в MoS<sub>2</sub>, что может быть реализовано в процессе CVD. И, наконец, третий вариант - "шершавая" поверхность, поверхность с дефектами, когда не реализуется ни первый, ни второй варианты интерфейса. Такая поверхность будет характеризоваться наличием атомов кислорода, "торчащих" из поверхности кварца и связанных только с одним атомом кремния. Рассмотренные интерфейсы не исчерпывают все возможные варианты, но позволяют выявить основные особенности комбинационного рассеяния света в монослое MoS<sub>2</sub> на кварцевой подложке.