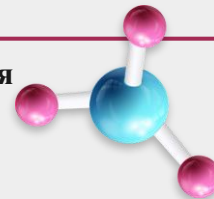




Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования
«РОССИЙСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ ДРУЖБЫ НАРОДОВ»
ИМЕНИ ПАТРИСА ЛУМУМБЫ»
ИНЖЕНЕРНАЯ АКАДЕМИЯ

Базовая кафедра «Нанотехнологии и микросистемная техника»

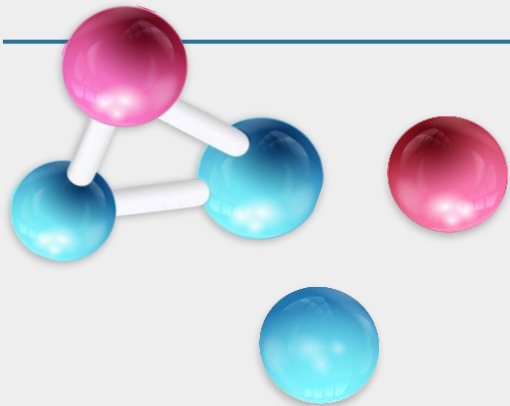


Ab initio исследование точечных дефектов в двумерных дихалькогенидах переходных металлов с Янус-структурой

Руководитель ВКР: *Карцев Алексей Иванович*

Выполнил: *Молина Сиерра Жорлей Деймар*

Актуальность

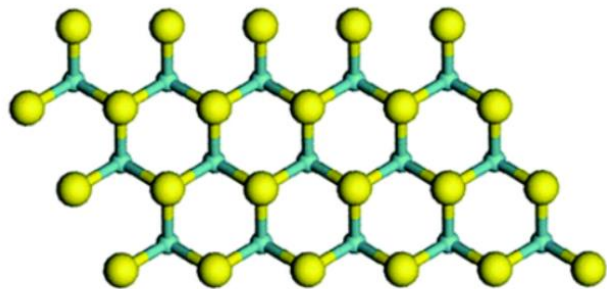


С момента успешного эксфолирования графена группой Гейма возник большой интерес к поиску новых материалов 2D, таких как дихалькогениды переходных металлов (TMD), представленные в виде MX_2

ГДЕ

M — это переходный металл

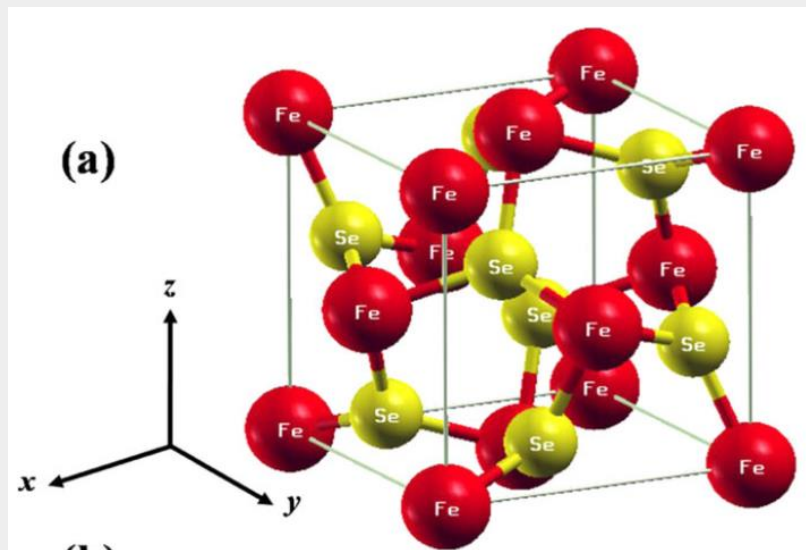
X — это халькогенный элемент.



MX_2

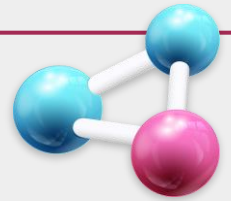
● M = Mo, W ● X = S, Se

Актуальность

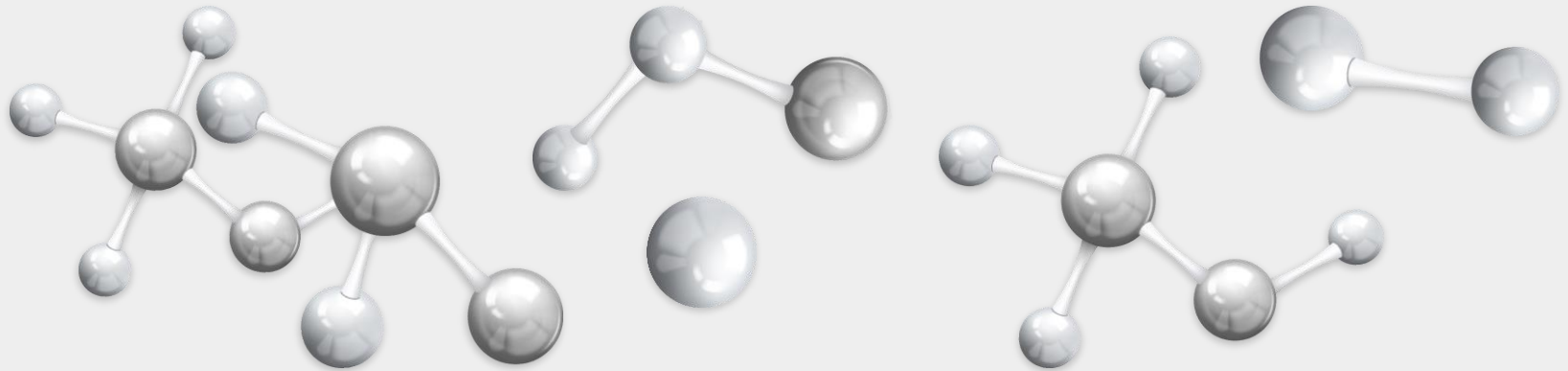


Железо является классическим магнитным элементом, который образует магнитные дихалькогениды переходных металлов. В семействе 2D TMD на основе Fe находится FeSe₂, который был описан как магнитный и структурно стабильный материал, который может найти будущее применение в спинтронике.

– Цель исследования



Заключается в изучении влияния точечных дефектов на электронные и магнитные свойства кристаллической структуры монослоя FeSe_2



Детали вычислений

01

VASP

Применяется для изучения монослоя FeSe₂.

03

GGA Y PBE

Использовался для обмена и корреляции

02

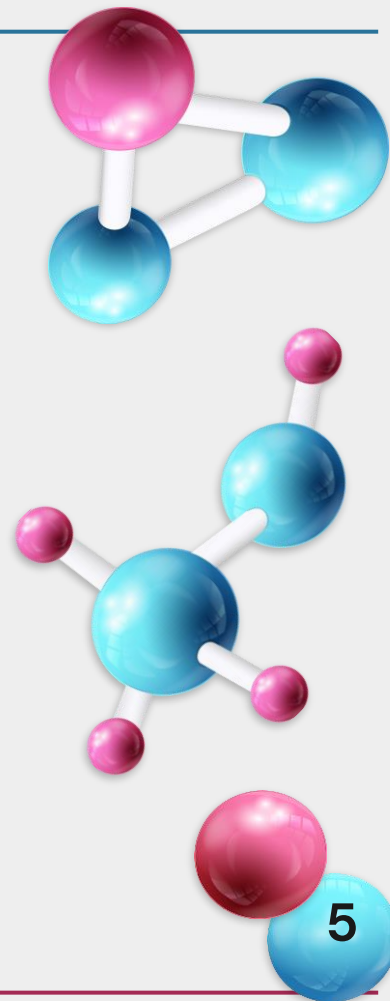
(PAW)

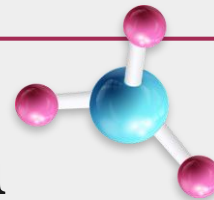
Используются для описания поведения электронов.

04

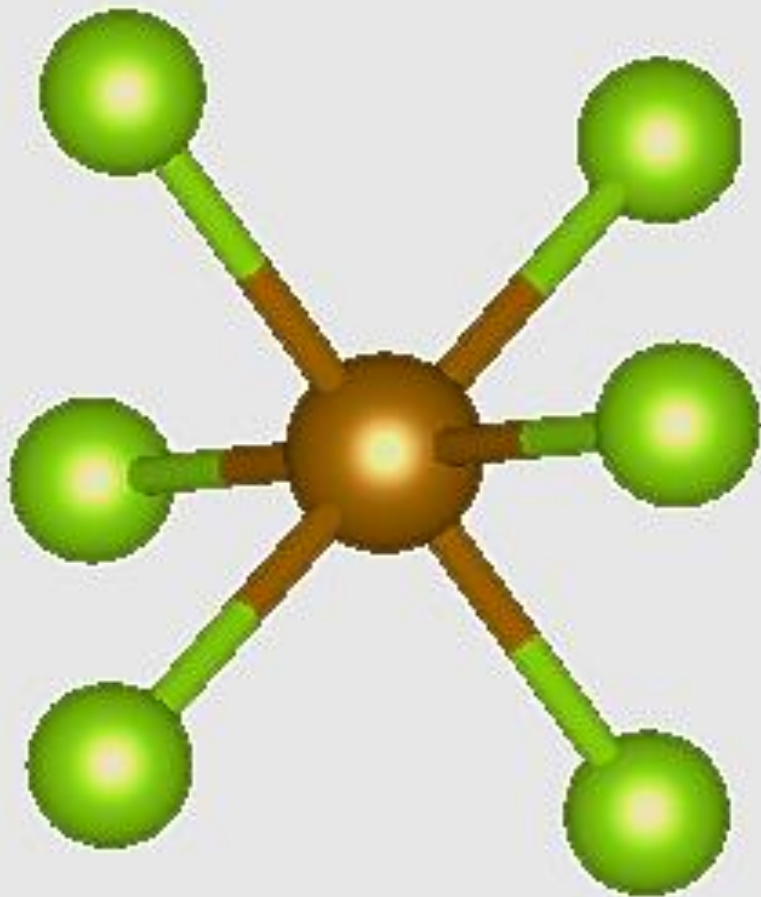
zona de Brillouin (BZ)

$6 \times 6 \times 1$ для элементарной ячейки
 $4 \times 4 \times 1$ для суперячейки и суперячейки с дефектом
вакуумный зазор 22 Å



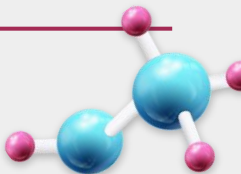


Процедура структурной релаксации

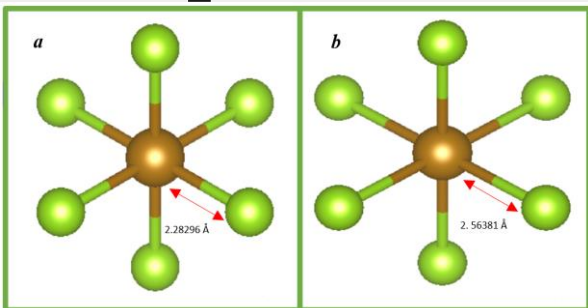


Элементарная ячейка FeSe_2 имеет гексагональную структуру, где атомы железа ковалентно связаны с шестью атомами селена.

Процедура структурной релаксации

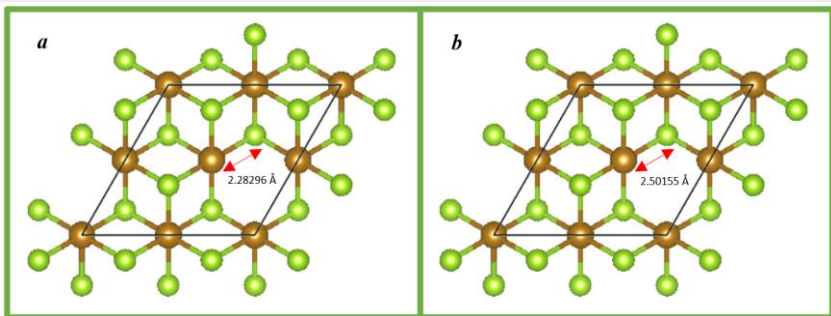


	X (Å)	Y (Å)	Z (Å)
Элементарная ячейка	3.202	3.164	22.719
Расслабление	3.447	3.447	19.606
суперячейки	6.404	6.404	22.719
Расслабление	6.922	6.922	19.446
селен	6.404	6.404	22.719
железо	6.404	6.404	22.719
Расслабление Se	7.054	7.054	18.722
Расслабление Fe	6.510	6.510	19.446



2,28 Å
2,56 Å

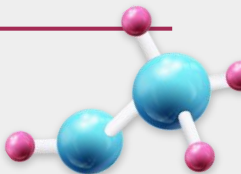
Элементарной ячейки



Суперячейки

2,28 Å --- 2,50 Å ⁷

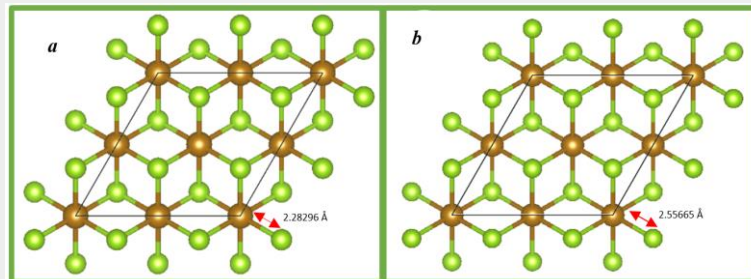
Процедура структурной релаксации



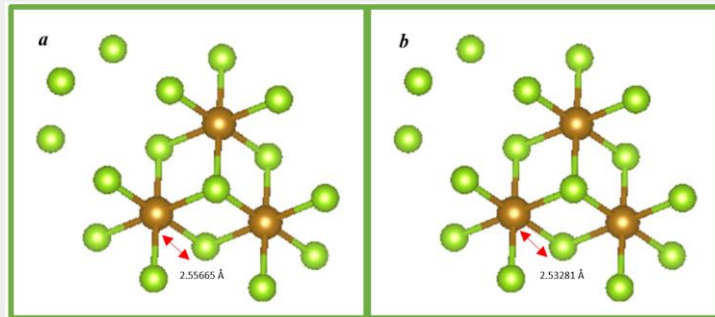
	X (Å)	Y (Å)	Z (Å)
Элементарная ячейка	3.202	3.164	22.719
Расслабление суперячейки	3.447	3.447	19.606
Расслабление селен	6.404	6.404	22.719
железо	6.404	6.404	22.719
Расслабление Se	7.054	7.054	18.722
Расслабление Fe	6.510	6.510	19.446

Суперячейка с дефектом
в атоме Se и Fe

2,28 Å
2,55 Å



2,28 Å
2,55 Å



Магнитный анализ

Структура	Общий магнитный момент (μB)
Элементарная ячейка	4.077
суперячейки	15.911
суперячейки с дефектом Se	14.818
суперячейки с дефектом Fe	12.224

7,37%

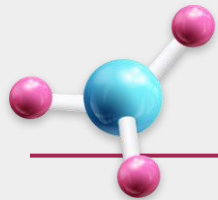
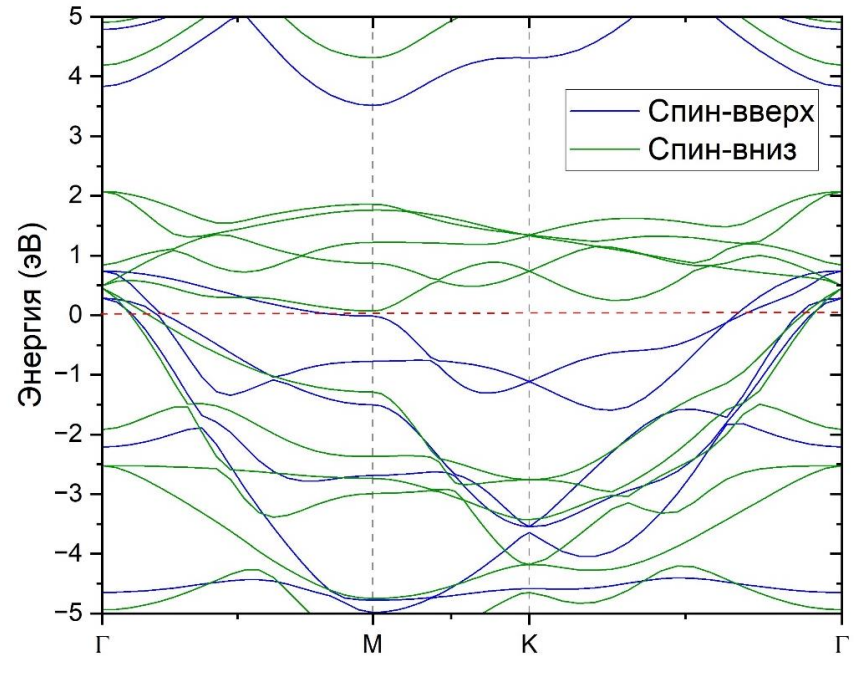
Уменьшение в
суперячейке с
вакансией **Se**

30%

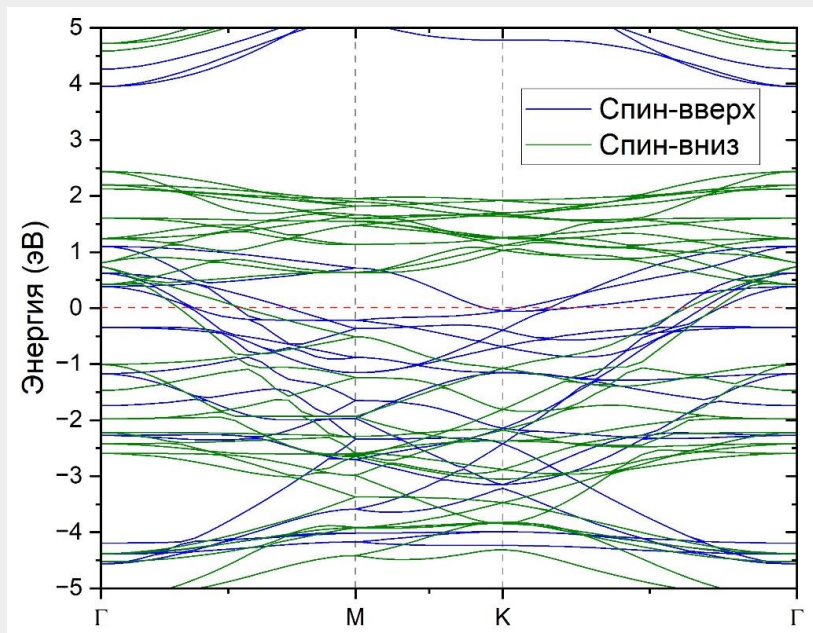
Уменьшение в
суперячейке с
вакансией **Fe**

Зонная структура

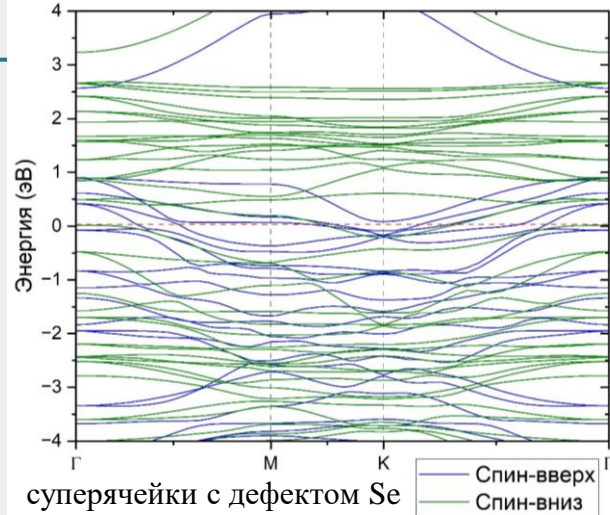
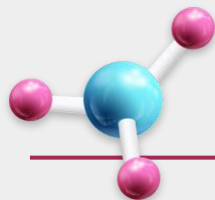
В электронной зонной структуре элементарной ячейки кристаллической структуры FeSe_2 можно наблюдать металлическое поведение, поскольку зоны спина вверх и спина вниз пересекают уровень Ферми.



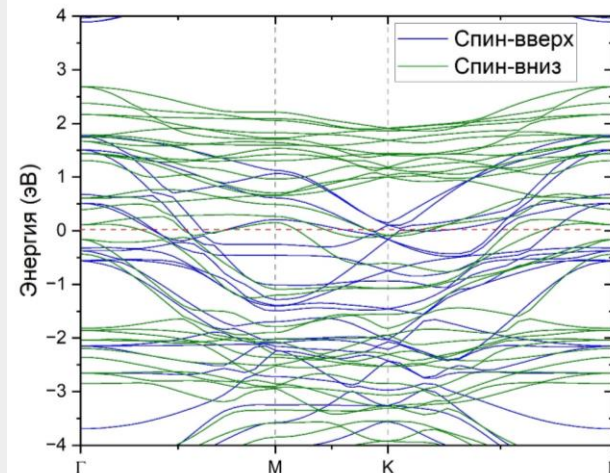
Зонная структура



Зонная структура соответствующая
бездефектной суперячейки



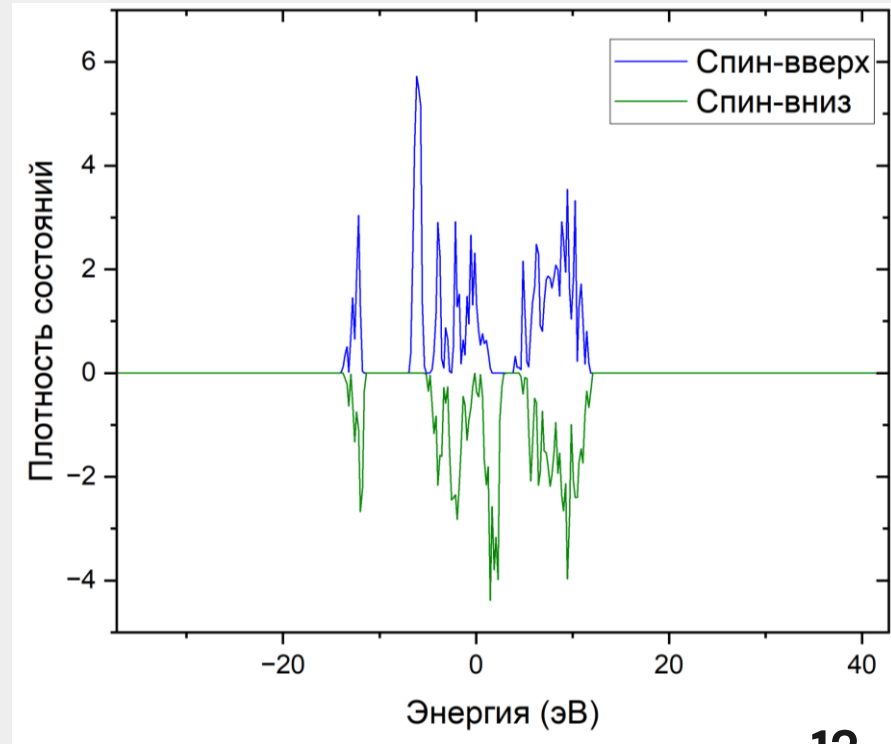
суперячейки с дефектом Se



суперячейки с дефектом Fe

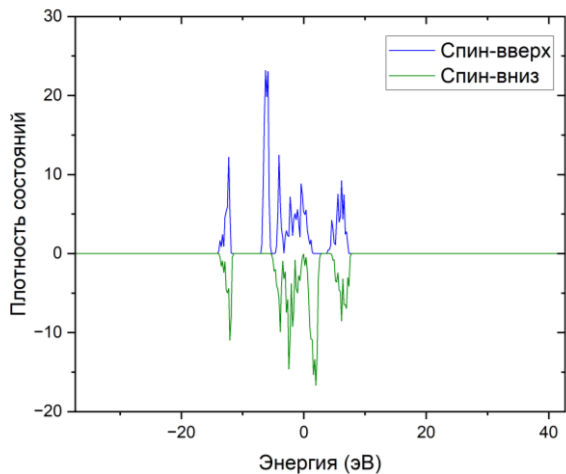
Электронная плотность состояний

В плотности состояний кристаллической структуры элементарной ячейки наблюдалась небольшая разница в энергетических уровнях состояний спина вверх и спина вниз, что указывает на наличие спиновой поляризации и предполагает, что материал обладает магнитными свойствами.

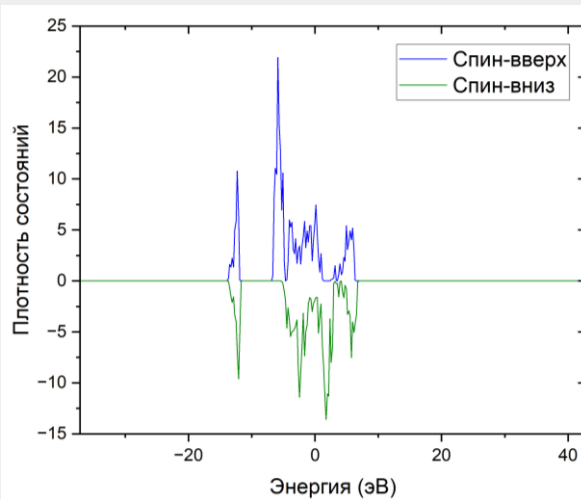


Электронная плотность состояний

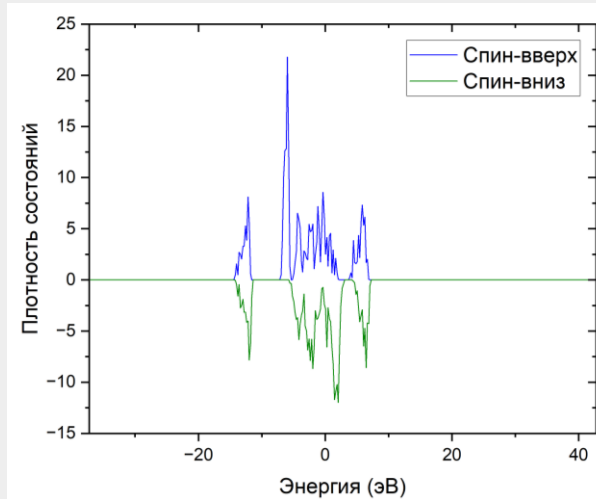
13



Плотность состояния
соответствующая бездефектной
элементарной ячейки

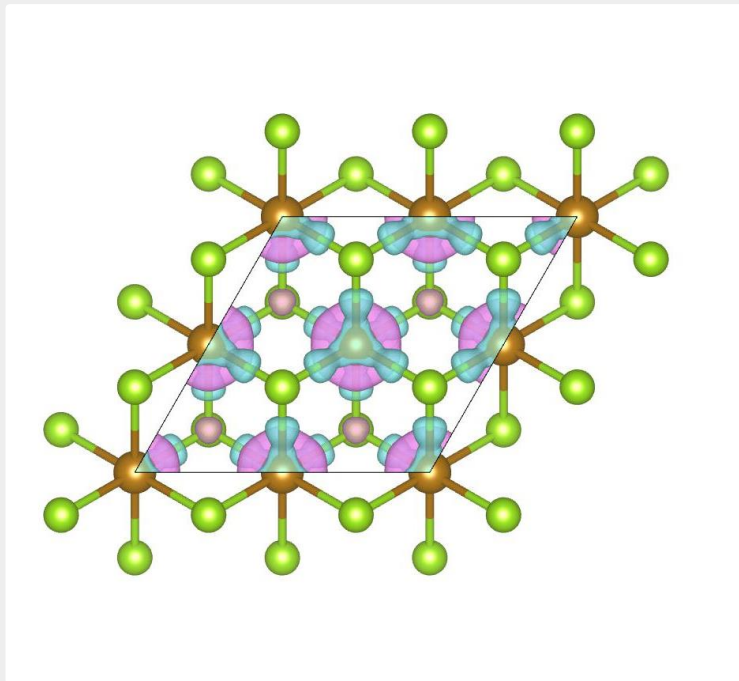
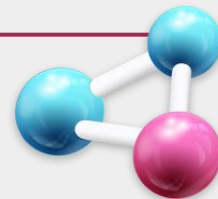


Плотность электронных
состояний соответствующая
суперячейки с дефектом в атоме
Se



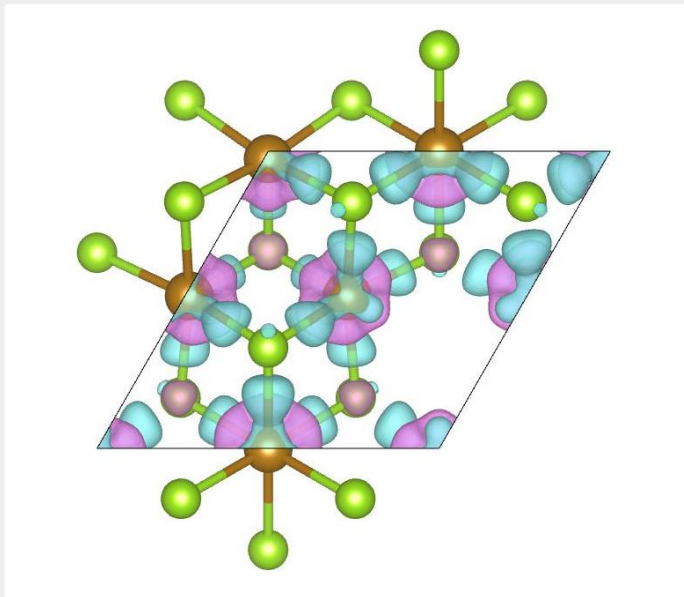
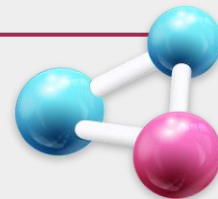
Плотность электронных
состояний соответствующая
суперячейки с дефектом в атоме
Fe

Плотность заряда соответствует суперячейке

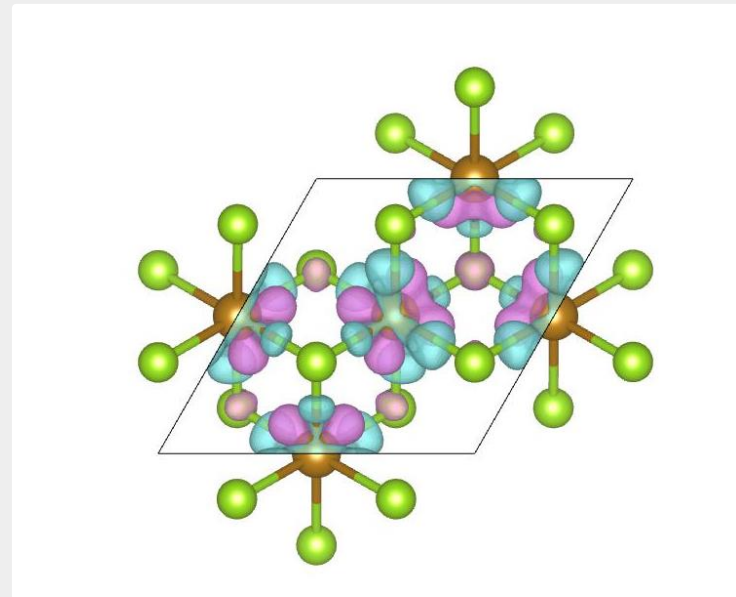


Исследование плотности заряда суперячейки монослоя FeSe_2 показывает, что некоторые атомы Se имеют истощение заряда, в то время как атомы Fe проявляют как накопление, так и истощение заряда в структуре.

Плотность заряда соответствует суперячейке с дефектом



дефект в атоме Se

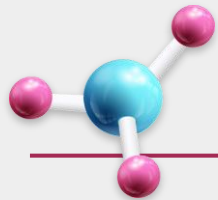
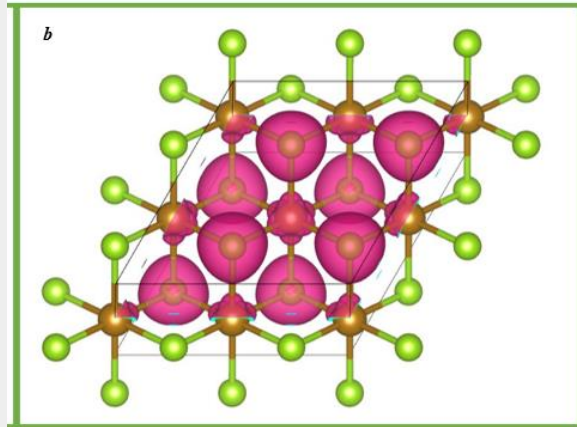
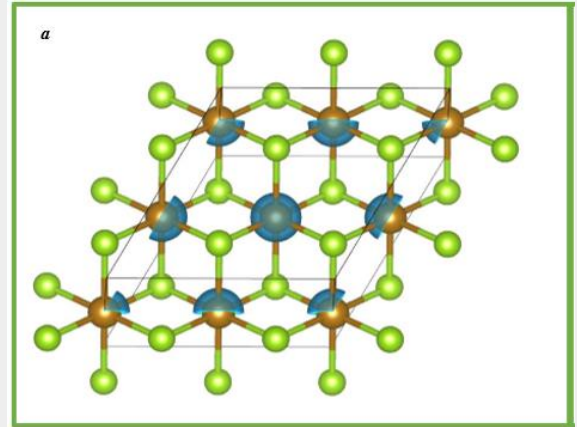


дефект в атоме Fe

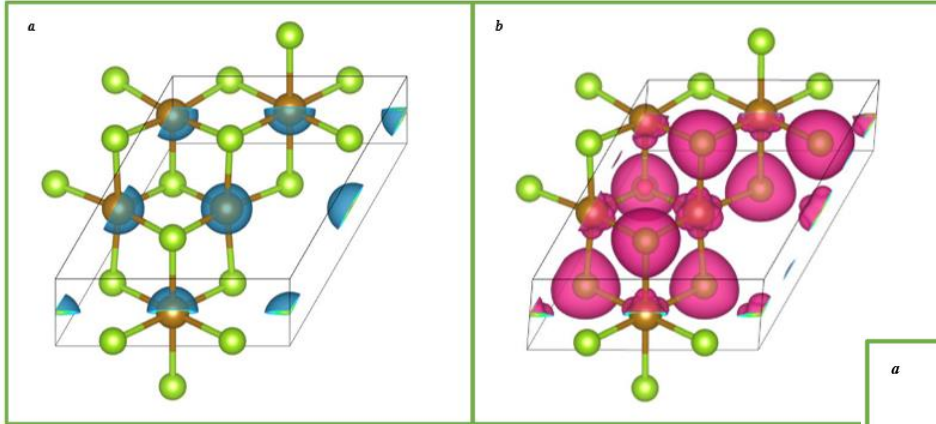


Спиновая плотность

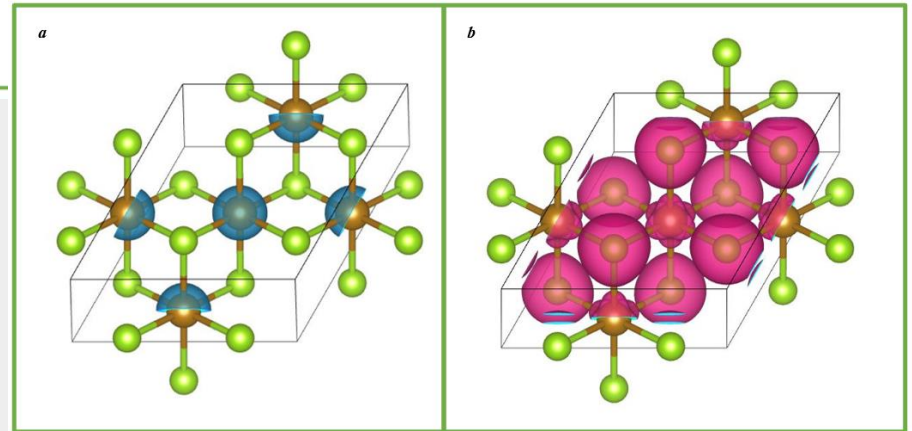
В плотности спина суперячейки монослоя FeSe_2 наблюдается, что большая часть плотности спина вверх сосредоточена на атомах Fe, в то время как плотность спина вниз распределена между атомами Se и Fe.



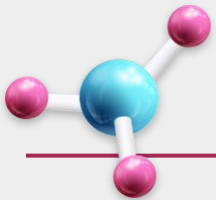
Спиновая плотность



Спиновая плотность
суперячейки с дефектом
в атоме **Se**

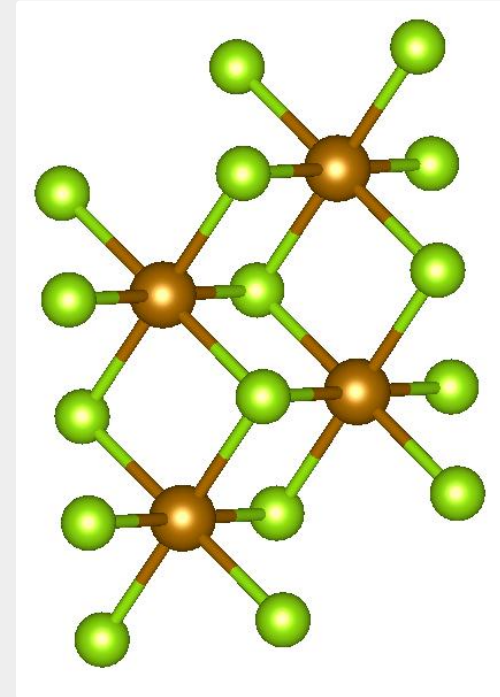


Спиновая плотность
суперячейки с дефектом
в атоме **Fe**



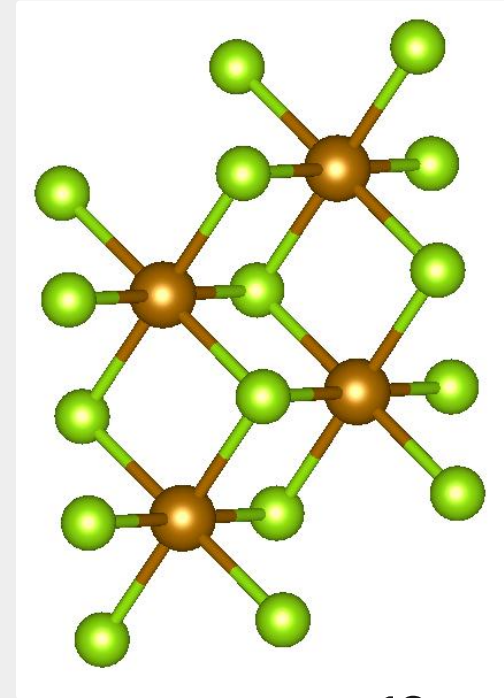
ЗАКЛЮЧЕНИЕ

1. Результаты выявили увеличение длины прямой связи и параметра решетки во всех исследованных структурах.
2. Наличие дефектов отрицательно сказывается на магнитных свойствах материала.
3. Создание дефектов в атомах Fe и Se в кристаллической структуре приводит к увеличению зонной структуры и, следовательно, к увеличению количества доступных энергетических уровней.

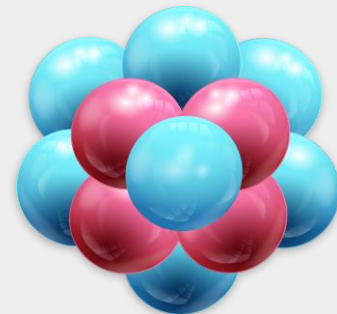
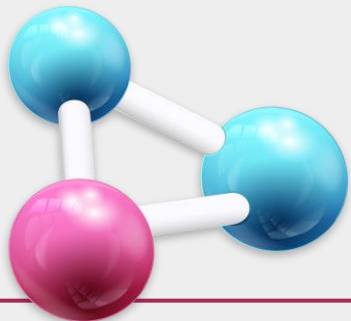
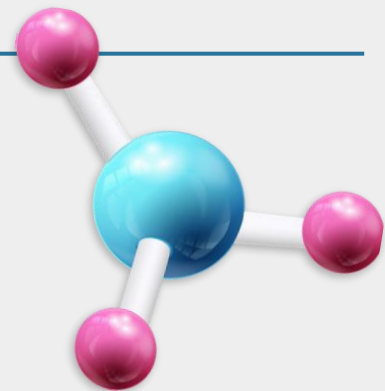


ЗАКЛЮЧЕНИЕ

- 4. Введение вакансий Se и Fe вызвало изменения в плотности электронных состояний, с увеличением для обоих спинов в случае вакансии Se и небольшим уменьшением плотности электронных состояний для спина вверх и спина вниз в случае вакансии Fe.
- 5. Наличие вакансий в суперячейке вызывает изменения в пространственном распределении плотности заряда и спиновой плотности структуры.



*Спасибо за
внимание*



Российский университет
дружбы народов
