

Nb, Fe 单原子掺杂单层 MoSe₂ 电子结构及光学性质的理论研究

周予宁, 李明

(华北理工大学 化学工程学院, 河北 唐山 063210)

摘要:文章基于密度泛函理论,研究了本征及 Nb, Fe 单原子掺杂单层 MoSe₂ 的电子结构及光学性质。计算发现,本征单层 MoSe₂ 和 Nb-MoSe₂ 为直接带隙半导体, Fe-MoSe₂ 为间接带隙结构; Fe-MoSe₂ 较本征单层 MoSe₂ 导电性大大提高,实现了由半导体向半金属的过渡。由态密度分析得出了本征及 Nb, Fe 单原子掺杂单层 MoSe₂ 能量状态主要由 Mo 4d, Se 4p 轨道电子所贡献的结论,并对各原子掺杂体系轨道电子的能量贡献和掺杂类型做了探讨。此外,还详细分析了费米能级附近的自旋态密度、杂质带、磁性之间的联系。光学性质方面,比较了本征单层 MoSe₂ 与各掺杂体系的复介电常数和光吸收系数,在红外光区 Fe-MoSe₂ 的吸收系数高于本征单层 MoSe₂。本征单层 MoSe₂ 的光吸收系数为 $9.69 \times 10^4 \text{ cm}^{-1}$, 是区域最大吸收峰。上述研究表明,通过对单层 MoSe₂ 的 Nb, Fe 掺杂可使电子输运特性得到了增强,为高活性自旋电子和光电子器件设计和研究开辟了新的前景。

关键词:第一性原理; 单层 MoSe₂; 原子掺杂; 能带结构; 态密度; 光学性质

中图分类号: O471.5; O649.1 **文献标志码:** A **文章编号:** 1672-349X(2023)03-0055-08
DOI: 10.16160/j.cnki.tsxyxb.2023.03.010

Theoretical Study on the Electronic Structure and Optical Properties of the Single-layer MoSe₂ with Nb, Fe Single-Atom Doped

ZHOU Yu-ning, LI Ming

(School of Chemical Engineering, North China University of Science and Technology, Tangshan 063210, China)

Abstract: Based on density functional theory (DFT), CASTEP package is applied to study the electronic structure and optical properties of the single-layer MoSe₂, Nb-MoSe₂ and Fe-MoSe₂. It is found through calculation that MoSe₂ and Nb-MoSe₂ are semiconductor materials with direct band gap, Fe-MoSe₂ with indirect one. The conductivity of Fe-MoSe₂ is much higher than that of MoSe₂, and the transition from semiconductor to semi-metal is realized. A conclusion is reached through density of states that the energy state of intrinsic monolayer MoSe₂ is mainly from Mo 4d and Se 4p orbital electrons. The orbital electronic energy contribution and hybridization type are also discussed. In addition, the relationship among the spin states density near the Fermi level, the impurity band and magnetism is analyzed in detail. As for the optical properties, dielectric constant and optical absorption coefficient of intrinsic monolayer MoSe₂ and the dopant systems are compared. In the infrared region, the

作者简介:周予宁(1996—),女,河北秦皇岛人,硕士研究生,研究方向为催化新材料与新技术;
李明(1981—),男,河南三门峡人,副教授,博士,研究方向为计算模拟。

absorption coefficient of Fe-MoSe₂ is higher than MoSe₂, with the maximum absorption coefficient $9.69 \times 10^4 \text{ cm}^{-1}$. The electron transport properties are enhanced by doping Nb, Fe with MoSe₂, which opens up new prospect for the design and research of highly active spintronic and optoelectronic devices.

Key Words: first principles; single-layer MoSe₂; atom doped; band structure; density of states; optical properties

0 引言

石墨烯的出现拉开了二维材料研究的序幕,其独特的物理化学性质吸引了众多学者的关注,但石墨烯零带隙的能带结构限制了它在诸多电子器件中的应用^[1-2]。同为二维材料的过渡金属硫化物 MX₂ (M: 过渡金属; X: 硫属原子) 种类颇多、性能各异,许多材料弥补了石墨烯狄拉克锥所造成的不足,因此更受到学界的关注。MX₂ 材料应用广泛,可应用于光催化、储能、固体润滑、自旋电子、谷电子和光电等领域^[3-7]。

二硒化钼(MoSe₂)是众多二维过渡金属硫化物中的一员,块体 MoSe₂ 为典型的层状结构,层间距为 0.65 nm^[4],单层 MoSe₂ 的结构类似于三明治,层内原子间通过共价键结合,层与层之间通过范德瓦耳斯力相结合^[8-11]。MoSe₂ 及 MoS₂ 有较高的化学稳定性和热稳定性,比表面积较大,具有催化、润滑等作用^[12-15]。块体 MoSe₂ 容易剥离为单层或多层,多层 MoSe₂ 载流子迁移率较高,具有高开关比,在电子和光电子器件方面有广阔的应用前景^[16-17]。块体 MoSe₂ 剥离为单层 MoSe₂ 时,其带隙由原来的间接带隙(1.09 eV)转变为直接带隙(1.57 eV)^[18-20],在费米能级附近有合适的带隙,大大增强了其适用性,特别是在纳米电子传感器件中^[21-22]。

改变材料的晶体结构可以调控其电学和光学性质。在以往的研究中,原子掺杂二维过渡金属硫化物已被成功地用以调整其性能。例如,掺杂 V, Mn 和 Fe 会引起 MoS₂ 晶体结构的磁化,使其成为有前景的固态器件的候选材料^[23];在 MoS₂ 中掺杂 Os 可以有效地增强 H₂ 与 MoS₂ 之间的相互作用,且 Os-MoS₂ 是一种很有前途的衬底,可以有效地在室温下存储

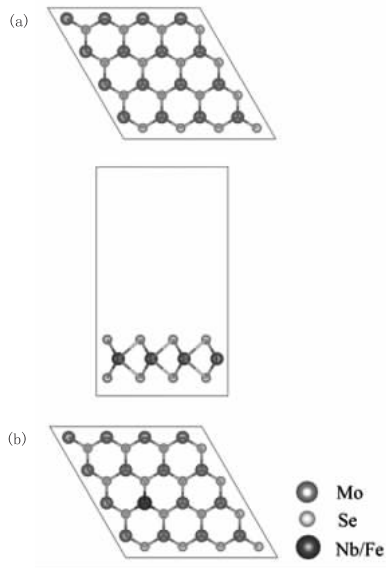
H₂^[24];O 掺杂可以有效改善 MoS₂ 的吸附性能,对 Hg⁰ 的吸附能为负值表明了其对燃煤电厂汞排放控制方面具有较好应用前景^[25]。金属(Pd, Ag, Au 和 Pt)掺杂单层 MoSe₂ 能显著提高其吸附 SO₂ 气体分子的吸附性能、化学活性和敏感性^[26]。单层 MoSe₂ 的 Fe 掺杂是使自旋电子器件实现室温下稳定的有效途径^[27]。通过加入 Zn 能有效激活 Se 的催化活性,提高纯 MoSe₂ 的电导率^[28]。金属掺杂单层 MoSe₂ 具有低成本、高活性,为设计高活性的 MoSe₂ 二维气体传感器提供了便利^[29],也为高活性的 MoSe₂ 自旋电子和光电子器件的设计和研究开辟了新的前景。

1 模型与计算方法

本研究基于密度泛函理论,使用 Materials Studio 软件中的 CASTEP 模块,对 Nb, Fe 单原子掺杂的单层 MoSe₂ 进行第一性原理计算,得到其能量本征值。交换关联泛函使用的是近年来常用的广义梯度近似 GGA 的 PBE 泛函^[6]。平面波的截断能大小为 500 eV,采用 BFGS^[14] 方案进行几何结构优化。能量收敛精度为 $1.0 \times 10^{-5} \text{ eV/atom}$, 原子间作用力 $\leq 0.03 \text{ eV/\AA}$, 原子的最大位移为 0.001 Å。采用超软赝势计算离子实与电子之间的相互作用,为避免周期性结构引起的相互作用,真空层设置为 15 Å^[30],在此基础上对晶胞进行几何结构优化来实现结构稳定。在几何优化和能量计算中采用 Monkhorst-Pack 方案, k 点取样为 $3 \times 3 \times 1$,对布里渊区进行积分计算。

计算所用的 MoSe₂ 属于六方晶系,空间群为 P6₃/mmc,具有稳定的 2H 相的堆叠方式,MoSe₂ 的初始结构由 Findlt 导入。几何优化后的 MoSe₂ 的晶格参数为 $a=b=3.28 \text{ Å}$,与之

前理论计算的 $3.32 \text{ \AA}^{[1,31]}$ 较为吻合。构建单层 $4 \times 4 \times 1$ MoSe₂ 超晶胞,含有 48 个原子,如图 1(a)所示。掺杂的 Nb,Fe 分别替位 MoSe₂ 中的一个 Mo 原子,替换位置如图 1(b)所示。



(a) 本征单层 MoSe₂ 俯视图及侧视图

(b) X(Nb,Fe) 掺杂的单层 MoSe₂ 俯视图

图 1 本征及 Nb,Fe 掺杂单层 MoSe₂ 的俯视图和侧视图

2 结果与讨论

2.1 Nb,Fe 掺杂 MoSe₂ 体系的结构参数

表 1 显示了对本征及分别掺杂一个 Nb,Fe 原子的 MoSe₂ 几何优化后的结构参数。由表 1 可知,本征 MoSe₂ 中 Mo-Se 的键长 $d_{\text{Mo-Se}}$ 为 $2.512 \text{ \AA}$,Nb-MoSe₂ 和 Fe-MoSe₂ 局部键长都发生了不同程度的畸变。 $d_{\text{Nb-Se}}$, $d_{\text{Fe-Se}}$ 较本征单层 MoSe₂ 的 $d_{\text{Mo-Se}}$ 相对变化量分别为 1.712% , 5.852% 。通过比较原子共价半径^[32]发现 $\text{Fe} < \text{Mo} < \text{Nb}$,X-Se 的键长发生了同规则变化。掺杂 Fe 之后的键长变化最大,这是由于原子弛豫后失去了三角对称性^[31]。共价半径的不同使局部键长发生改变,导致结构发生变化。结构发生变化会直接影响材料的性能,从而实现材料的改性。

2.2 Nb,Fe 掺杂 MoSe₂ 体系的能带结构及态密度

表 1 列出了本征及 Nb,Fe 掺杂单层

MoSe₂ 的禁带宽度,由表 1 可知,通过计算得到的本征单层 MoSe₂ 的禁带宽度为 1.581 eV ,与以往报道的带隙值 1.57 eV 较为吻合^[18-20],这说明计算参数的选取具有合理性。

表 1 各体系的结构参数

体系	晶胞参数			带隙 /eV	带隙类型
	$d_{\text{X-Se}}$ / $\text{\AA}$	$d_{\text{Se-Se}}$ / $\text{\AA}$	r_{X} / $\text{\AA}$		
本征单层 MoSe ₂	2.512	3.264	$1.362^{[32]}$	1.581	直接
Nb-MoSe ₂	2.555	3.333	$1.429^{[32]}$	1.608	直接
Fe-MoSe ₂	2.365	3.151	$1.241^{[32]}$	0.326	间接

注:X 代表 Mo,Nb,Fe

图 2 为各体系的能带结构,掺杂后的各体系较本征单层 MoSe₂ 均有明显变化,为便于对比,此图选取的能量范围为 $-2 \sim 2 \text{ eV}$ 。本征单层 MoSe₂ 的导带底和价带顶均位于 K 点,所以为直接带隙半导体。Nb-MoSe₂ 的禁带宽度为 1.608 eV ,同本征单层 MoSe₂ 相比带隙有所增加,且仍为直接带隙半导体。直接带隙会减少能量损失,有助于电子跃迁及光吸收^[33]。对比图 2(a)和图 2(b)可知,Nb-MoSe₂ 的导带部分更为局域,价带顶在费米能级之上。Nb-MoSe₂ 体系为 p 型掺杂,这是因为 Nb 的价电子排布为 $4d^4 5s^1$,Mo 的价电子排布为 $4d^5 5s^1$,Nb 填补 Mo 空位之后晶格中会有空穴出现,此时的载流子为空穴。

结合计算数据和图 2(c)得出,Fe-MoSe₂ 的带隙类型为间接带隙,Fe 掺杂单层 MoSe₂ 出现导带向低能区移动的情况并且有杂质带出现,这是由于 Fe-Se 键削弱了相邻的 Mo-Se 键,然后能带边缘的 Mo 的 d 态电子扩散到能带隙中^[34],这在一定程度上降低了电子从价带到导带跃迁所需的能量,从而使其导电性大大提高。Fe 的替位掺杂不属于等电荷掺杂,Fe 的价电子排布为 $3d^6 4s^2$,价电子数与 Mo 的价电子数不同。载流子为电子,所以掺杂类型为 n 型。

图 3 为各体系态密度图,选取 $-15 \sim 5 \text{ eV}$ 的能量范围,包含导带和上、下价带的分布信息。由图 3(a)可知,本征单层 MoSe₂ 的上价带和导带的能量状态主要由 Mo 4d,Se 4p 轨道电

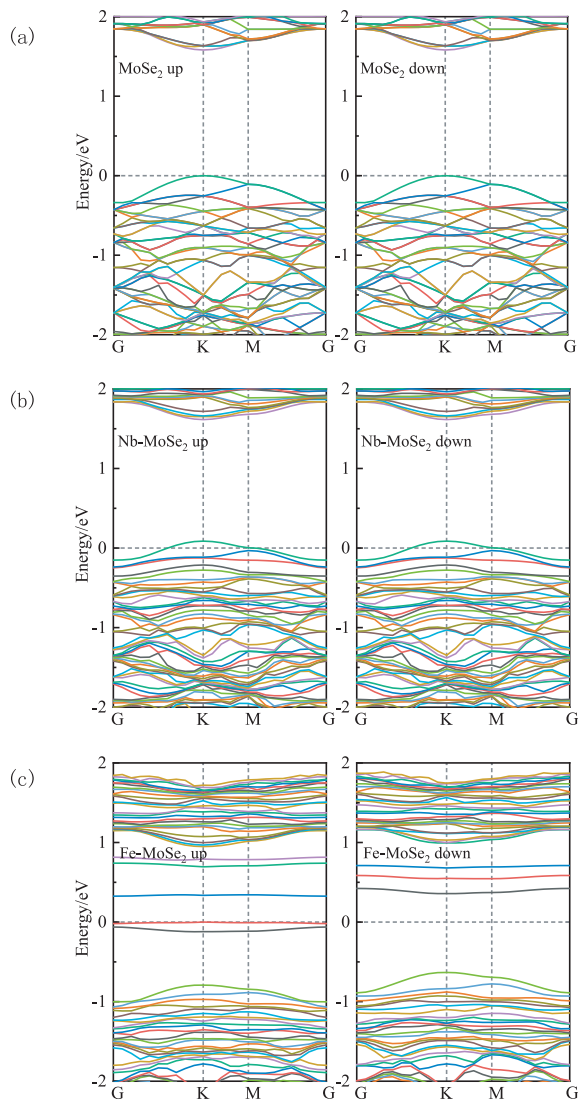


图 2 本征及 Nb, Fe 掺杂单层 MoSe₂ 的能带结构

子所贡献,并且 Mo 4d, Se 4p 轨道电子在上价带和导带区域均有较大的重叠,这说明存在较强的极化,从而再次验证了 Mo 原子与 Se 原子之间是以共价键方式结合的。Nb, Fe 单原子掺杂单层 MoSe₂ 上价带和导带区域的能量状态也主要由 Mo 4d, Se 4p 轨道电子所贡献。Nb-MoSe₂ 体系主要是由 Nb 4d 轨道电子的贡献使带隙有所增加。

将图 3(c) — (d) 结合起来分析可知, Fe-MoSe₂ 体系的导带部分整体左移,跨过费米能级并且在费米能级附近有较大态密度,与能带结构图(图 2(c))中的较为平缓的杂质带(Flat

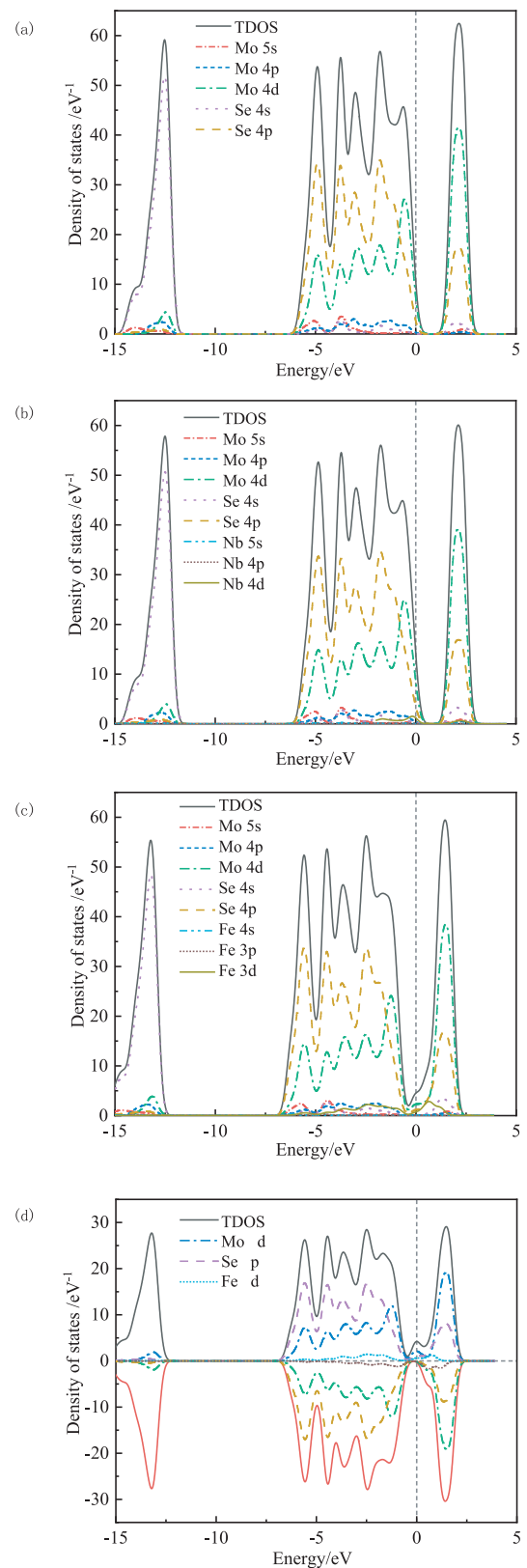


图 3 本征及 Nb, Fe 掺杂单层 MoSe₂ 的态密度及 Fe-MoSe₂ 的自旋态密度

band)相对应。Fe-MoSe₂ 的费米能级附近出现了较小的峰,该峰主要由 Fe 3d, Mo 4d, Se 4p 轨道电子所贡献。由于 Fe 的掺杂使体系的带隙较本征单层 MoSe₂ 大幅度减少,材料属性实现由半导体向半金属过渡。

由图 2(a)–(b)可以看出,本征单层 MoSe₂ 和 Nb-MoSe₂ 的自旋向上能带结构图和自旋向下能带结构图均一致,这说明本征单层 MoSe₂ 和 Nb-MoSe₂ 体系没有磁性。但图 2(c) Fe-MoSe₂ 自旋能带结构图中导带、价带和杂质带均不一致,说明有明显的自旋极化现象,有局域磁矩产生。图 3(d)中 Fe-MoSe₂ 在 $-7 \sim 2.5$ eV 能量范围内自旋向上能带结构图和自旋向下能带结构图出现了不对称的情况,在费米能级附近不对称程度较大,说明此体系有磁性出现。

如图 2(c)所示,掺杂 Fe 使体系的能带结构图中出现了平缓的能带(Flat band),这类能带能量随动量变化不明显。态密度的一般表达式为:

$$N(E) = \frac{V}{(2\pi)^3} \int \frac{dS}{|\nabla_k E|}。$$

式中, $|\nabla_k E|$ 表示沿法线方向的能量改变量,与态密度成反比关系。也就是说能量改变量越小态密度越大,即能带图中能带越平态密度越大。所谓平缓的能带(Flat band)指的是在某一个 k -空间区域,系统的能量 $E(k)$ 随波矢 k 的变化非常小或几乎无变化。图 3(d)中费米能级附近态密度的峰就是 Flat band 所贡献,费米面刚好停留在峰内时会自发地出现自旋简并度的破坏。在以往的研究中提出了一种由平缓的能带产生磁性可能性的观点^[35],这一观点与本研究上述计算所得到的 Fe-MoSe₂ 有磁性的观点相一致,从而再次证明了 Fe 掺杂可使体系产生磁性。

2.3 光学性质

2.3.1 复介电常数

介电常数在用于反映固体材料对电磁波的吸收能力时要用复数来描述,表达式为 $\epsilon(\omega) = \epsilon_1(\omega) + i\epsilon_2(\omega)$,可以用 ϵ_1 和 ϵ_2 来描述固体材料的光学性质。推导出复折射率与复介电常数之间

的关系后,再利用克喇末-克朗尼格(Kramers-Krönig)关系,由 $\epsilon_2(\omega)$ 计算出 $\epsilon_1(\omega)$ 。

图 4(a)–(b)分别表示本征单层 MoSe₂, Nb-MoSe₂ 和 Fe-MoSe₂ 复介电常数的实部 $\epsilon_1(\omega)$ 图和虚部 $\epsilon_2(\omega)$ 图。实部表征材料的宏观极化程度,代表能量储存,虚部表征吸收损耗^[36]。静态介电常数 $\epsilon(0)$ 是光子能量为 0 eV 时的介电函数实部的值。图 4(a)中的本征及各掺杂体系的静态介电常数分别为 4.5, 4.6, 5.5。Fe-MoSe₂ 在 $0 \sim 1.2$ eV 范围内的复介电常数实部值高于 MoSe₂, 说明其能量储存高于 MoSe₂。从图中还可看出,在光子能量为 1.7 eV 时的 MoSe₂ 实部峰附近,各掺杂体系的复介电常数实部值出现了不同程度的下降现象。在 $3.3 \sim 7$ eV 范围内复介电常数的实部为负值,光子在这个能量范围内不能通过,这与电磁波的阻尼有关。

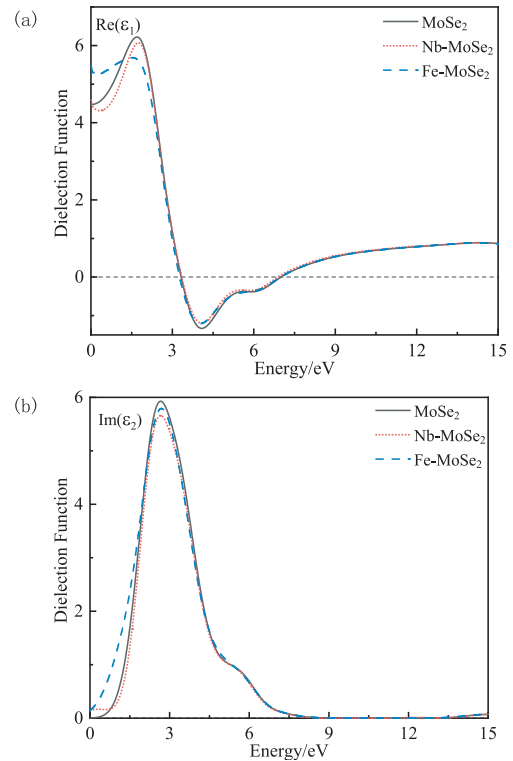


图4 本征及 Nb,Fe 掺杂单层 MoSe₂ 的复介电常数实部图和虚部图

图 4(b)中 Fe-MoSe₂ 复介电常数的虚部在 $0 \sim 2$ eV 范围高于本征单层 MoSe₂。Nb-MoSe₂ 在 $0 \sim 0.7$ eV 范围高于本征单层 MoSe₂, 在

0.7 ~ 2 eV 范围低于本征单层 MoSe_2 。所有体系峰值的光子能量均在 2.6 eV 左右,掺杂体系的复介电常数虚部峰均低于本征单层 MoSe_2 ,说明其能量损失较本征有所降低^[37]。虚部峰是由电子从价带到导带的带间跃迁造成的,主要来自 Mo 4d 和 Se 4p 间的电子跃迁,各原子掺杂对带间跃迁也有一定作用。

2.3.2 光吸收系数

图 5 为本征及 Nb, Fe 掺杂单层 MoSe_2 的光吸收系数与能量的关系,反映了各体系对光的吸收能力。图中包含了红外光区、可见光区和部分紫外光区。在红外光区和部分可见光区, Fe-MoSe_2 的光吸收系数均高于本征单层 MoSe_2 , Fe 掺杂提高了其对红外光的响应性,有望应用到红外探测器等一些光电子器件的设计与研究中。在 0 ~ 4 eV 范围内所有体系对光的吸收线性增加,并且各体系吸收峰均在 4 eV 附近,位于紫外光区,本征单层 MoSe_2 最大的光吸收系数为 $9.69 \times 10^4 \text{ cm}^{-1}$,为区间最大吸收峰。与本征单层 MoSe_2 对比, Fe-MoSe_2 的吸收峰出现了红移现象。在 4.9 ~ 5.6 eV 范围 Fe-MoSe_2 对光的吸收能力高于本征单层 MoSe_2 。在 6 eV 之后,所有体系对光的吸收皆大幅下降。

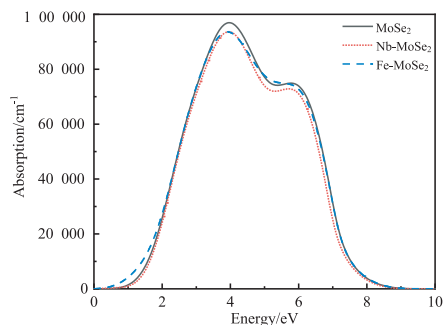


图 5 本征及 Nb, Fe 掺杂单层 MoSe_2 的光吸收系数

3 结论

本文基于密度泛函理论,使用 CASTEP 模块,采用局域密度近似的方法分别计算了本征及 Nb, Fe 单原子掺杂单层 MoSe_2 的晶格常数、能带结构、态密度及光学性质。

(1) 掺杂的 Nb, Fe 原子分别代替一个 Mo

原子后,由于共价半径的不同,局部键长发生改变,导致结构发生改变,各体系性能也随之发生变化。

(2) Nb- MoSe_2 保持了同本征单层 MoSe_2 同样的直接带隙结构, Fe- MoSe_2 为间接带隙结构。自旋态密度图显示 Fe- MoSe_2 有磁性产生,导电性大大提高,为半金属性体系。Nb- MoSe_2 属于 p 型掺杂, Fe- MoSe_2 属于 n 型掺杂。态密度图可得本征及各原子掺杂的单层 MoSe_2 的能量状态主要由 Mo 4d, Se 4p 轨道电子所贡献。

(3) 光学性质方面, Fe- MoSe_2 在 0 ~ 1.2 eV 范围复介电常数实部值高于 MoSe_2 ,表明在这一范围内其能量储存高于 MoSe_2 。各掺杂体系的复介电常数虚部峰均低于本征单层 MoSe_2 。比较本征单层 MoSe_2 与各掺杂体系光吸收系数,本征单层 MoSe_2 最大光吸收系数为 $9.69 \times 10^4 \text{ cm}^{-1}$,是区域最大吸收峰,所有体系吸收峰皆位于紫外光区。此外,在红外光区及部分可见光区 Fe- MoSe_2 的光吸收系数高于本征单层 MoSe_2 ,为红外探测器等一些光电子器件的设计和研究提供了新思路。

参考文献:

- [1] BHATTACHARYYA S, SINGH A K. Semiconductor-metal transition in semiconducting bilayer sheets of transition-metal dichalcogenides [J]. Physical Review B, 2012, 86(7): 075454.
- [2] PHAM K D, NGUYEN C V, PHUNG H T T, et al. Strain and electric field tunable electronic properties of type-II band alignment in van der Waals GaSe/ MoSe_2 heterostructure [J]. Chemical Physics, 2019, 521: 92 - 99.
- [3] ABDULSALAM M, RUGUT E, JOUBERT D P. Mechanical, thermal and thermoelectric properties of MX_2 (M = Zr, Hf; X = S, Se) [J]. Materials Today Communications, 2020, 25: 101434.
- [4] DAI T J, CHEN Y Q, ZHOU Z Y, et al.

- Two-dimensional MoSe₂/graphene heterostructure thin film with wafer-scale continuity via van der Waals epitaxy [J]. Chemical Physics Letters, 2020, 755: 137762.
- [5] FAN J, SONG J, CHENG Y, et al. Pressure-dependent interfacial charge transfer excitons in WSe₂-MoSe₂ heterostructures in near infrared region [J]. Results in Physics, 2021, 24: 104110.
- [6] HU S Y, LIANG C H, TIONG K K, et al. Preparation and characterization of large niobium-doped MoSe₂ single crystals [J]. Journal of Crystal Growth, 2005, 285: 408 – 414.
- [7] IRANZO D A, NANOT S, DIAS E J C, et al. Probing the ultimate plasmon confinement limits with a van der Waals heterostructure [J]. Science, 2018, 360: 291 – 295.
- [8] 开淑艳, 刘小虎, 陈明. 二硒化钼合成与应用的研究进展 [J]. 哈尔滨理工大学学报, 2016, 1(1): 22 – 26.
- [9] ZHANG H, ZHAO X, GAO Y H, et al. Electronic and magnetic properties of MoSe₂ armchair nanoribbons controlled by the different edge structures [J]. Superlattices and Microstructures, 2018, 115: 30 – 39.
- [10] CAO Y, FATEMI V, DEMIR A, et al. Correlated insulator behaviour at half-filling in magic-angle graphene superlattices [J]. Nature, 2018, 556: 80 – 84.
- [11] NOVOSELOV K S, MISHCHENKO A, CARVALHO A, et al. 2D materials and van der Waals heterostructure [J]. Science, 2016, 353(6298): 9439 – 1 – 9439 – 11.
- [12] HUANG S, ZHANG Q, LIU S, et al. Tuning electronic and magnetic properties in monolayer MoSe₂ by metal adsorption [J]. Chemical Physics Letters, 2017, 687: 54 – 59.
- [13] KAMRUZZAMAN M, ZAPIEN J A, RAHMAN M, et al. Effects of p-type (Ag, Cu) dopant on the electronic, optical and photocatalytic properties of MoS₂, and impact on Au/Mo_{100-x-y}Ag_xCu_yS₂ performance [J]. Journal of Alloys and Compounds, 2021, 863: 158366.
- [14] LI H, HUANG S, ZHANG Q, et al. Nonmetal doping induced electronic and magnetic properties in MoSe₂ monolayer [J]. Chemical Physics Letters, 2018, 692: 69 – 74.
- [15] 曾甜, 尤运城, 王旭峰, 等. 二维硫化钼基原子晶体材料的化学气相沉积法制备及其器件 [J]. 化学进展, 2016, 28(4): 459 – 470.
- [16] TOWNSEND N J, AMIT I, CRACIUN M F, et al. Sub 20 meV Schottky barriers in metal/MoTe₂ junctions [J]. 2D Materials, 2018, 5: 025023.
- [17] LIU H, HUSSAIN S, ALI A, et al. A vertical WSe₂-MoSe₂ p-n heterostructure with tunable gate rectification [J]. RSC Advances, 2018, 8: 25514 – 25518.
- [18] MA S, SU L, JIN L, et al. A first-principles insight into Pd-doped MoSe₂ monolayer: a toxic gas scavenger [J]. Physics Letters A, 2019, 383(30): 125868.
- [19] ZHAO X, WANG M M, NIU W C, et al. Tunable band alignments and optical properties in vertical heterojunctions of SnS₂ and MoSe₂ [J]. Solid State Communications, 2021, 323: 114103.
- [20] PATEL A B, CHAUHAN P, MACHHI H K, et al. Transferrable thin film of ultrasonically exfoliated MoSe₂ nanocrystals for efficient visible-light photodetector [J]. Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures, 2020, 119: 114019.
- [21] LATE D J, DONEUX T, BOUGOUMA M. Single-layer MoSe₂ based NH₃ gas sensor [J]. Applied Physics Letters, 2014, 105(23): 233103.

- [22] YUE Q, SHAO Z, CHANG S, et al. Adsorption of gas molecules on monolayer MoS_2 and effect of applied electric field[J]. *Nanoscale Research Letters*, 2013,8(1):425.
- [23] OBODO K O, OUMA C N M, OBODO J T, et al. First principles study of single and multi-site transition metal dopant ions in MoS_2 monolayer[J]. *Computational Condensed Matter*, 2019,21:e00419.
- [24] YANG S L, LIU Y N, LEI G, et al. A DFT study on the hydrogen storage performance of MoS_2 monolayers doped with group 8B transition metals[J]. *International Journal of Hydrogen Energy*, 2021, 46:24233 – 24246.
- [25] WANG Y, NI J M, CHEN P, et al. First-principles study of X (O, Se, Te)-doped monolayer MoS_2 for Hg^0 adsorption[J]. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, 2021,127:114504.
- [26] REN J, XUE Y, WANG L. SO_2 gas adsorption on the transition metal (Pd, Ag, Au and Pt)-doped monolayer MoSe_2 : a first-principles study[J]. *Chemical Physics Letters*, 2019,733:136631.
- [27] TIAN Y, ZHU Z P, GE Z Z, et al. Electronic and magnetic properties of 3d transition metal doped MoSe_2 monolayer[J]. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, 2020,116:113745.
- [28] QIAN J, WANG T, XIA B, et al. Zn-doped MoSe_2 nanosheets as high-performance electrocatalysts for hydrogen evolution reaction in acid media[J]. *Electrochimica Acta*, 2019,296:701 – 708.
- [29] 雷天民, 吴胜宝, 张玉明, 等. La, Ce, Nd 掺杂对单层 MoS_2 电子结构的影响[J]. *物理学报*, 2014(6):245 – 252.
- [30] ZHU Y Y, ZHANG J M. The structural, magnetic and electronic properties of p-type and n-type doped monolayer WS_2 systems[J]. *Superlattices and Microstructures*, 2017,112:619 – 627.
- [31] LIN Z, FU B, AN Y K. Effects of defects and anions on the geometry, electronic structures and exchange interaction of Fe-doped 2H- MoSe_2 monolayer[J]. *Applied Surface Science*, 2020, 528:146960.
- [32] 张彩云. 金属原子半径的计算[J]. *延边大学学报(自然科学版)*, 1995,21(2):73 – 75.
- [33] LI X, ZHANG S, WANG X J, et al. A two-dimensional MoS_2/SnS heterostructure for promising photocatalytic performance: first-principles investigations[J]. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, 2021,126:114453.
- [34] LI N, LIU Z T, HU S L, et al. Structural and electronic properties of effective p-type doping WS_2 monolayers: a computational study[J]. *Solid State Communications*, 2018,269:58 – 63.
- [35] ARITA R, KUROKI K, AOKI H, et al. Ferromagnetism in a Hubbard model for an atomic quantum wire: a realization of flat-band magnetism from even-membered rings[J]. *Physical Review B*, 1998, 57(12):R6854 – R6857.
- [36] ALMAYYALI A O M, KADHIM B B, JAPPOR H R. Retracted: tunable electronic and optical properties of 2D $\text{PtS}_2/\text{MoS}_2$ van der Waals heterostructure[J]. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, 2020,118:113866.
- [37] ALMAYYALI A O M, KADHIM B B, JAPPOR H R. Stacking impact on the optical and electronic properties of two-dimensional $\text{MoSe}_2/\text{PtS}_2$ heterostructures formed by PtS_2 and MoSe_2 monolayers[J]. *Chemical Physics*, 2020,532:110679.

(责任编辑:冯兆娜)