

Микро- и нанoeлектроника. Физика конденсированного состояния
Micro- and nanoelectronics. Condensed matter physics

УДК 538.915
<https://doi.org/10.32362/2500-316X-2022-10-3-56-63>



НАУЧНАЯ СТАТЬЯ

Моделирование зонной структуры двумерных твердых растворов $\text{Mo}_x\text{W}_{1-x}\text{S}_{2y}\text{Se}_{2(1-y)}$

Н.Ю. Пименов[@],
С.Д. Лавров,
А.В. Кудрявцев,
А.Ю. Авдигиян

МИРЭА – Российский технологический университет, Москва, 119454 Россия

[@] Автор для переписки, e-mail: nikitapimenov13@gmail.com

Резюме

Цели. Благодаря наличию прямозонного перехода с шириной запрещенной зоны, соответствующей видимой и ближней инфракрасной областям спектра, двумерные дихалькогениды переходных металлов (ДПМ) находят применение в различных оптических приложениях. Однако ограниченный набор существующих ДПМ делает область используемого спектрального диапазона дискретной. Наиболее эффективным способом решения этой проблемы является использование двумерных пленок ДПМ на основе многокомпонентных твердых растворов, в состав которых входят три и более различных химических элемента (в то время, как ДПМ состоят из двух). Варьируя их морфологический состав, можно управлять значением ширины запрещенной зоны, и, таким образом, их оптическим спектром поглощения. Так как ширина запрещенной зоны в таких структурах сильно нелинейна по отношению к их химическому составу, это затрудняет подбор необходимой концентрации для достижения равномерного поглощения. В связи с этим целью данной работы является теоретическое определение зависимости ширины запрещенной зоны четырехкомпонентных двумерных твердых растворов $\text{Mo}_x\text{W}_{1-x}\text{S}_{2y}\text{Se}_{2(1-y)}$ от их морфологического состава.

Методы. Расчеты выполнены в рамках теории функционала плотности с использованием программного пакета *Quantum Espresso*. Двумерные кристаллиты твердых растворов ДПМ были изготовлены из объемных кристаллов ДПМ методикой механической эксфолиации на подложку Si/SiO₂. Экспериментальное исследование фотолюминесцентных характеристик было проведено при помощи фотолюминесцентной микроскопии-спектроскопии.

Результаты. В работе была определена зависимость ширины запрещенной зоны от морфологического состава двумерных твердых растворов $\text{Mo}_x\text{W}_{1-x}\text{S}_{2y}\text{Se}_{2(1-y)}$. Установлено, что при варьировании состава твердых растворов ДПМ ширина запрещенной зоны изменяется от 1.43 до 1.83 эВ. Показано, что полученные теоретические результаты качественно совпадают с экспериментальными данными.

Выводы. Минимальной шириной запрещенной зоны обладают твердые растворы, близкие по своему составу к MoSe_2 , в то время как максимальной – структуры, близкие по своему составу к WS_2 .

Ключевые слова: дихалькогениды переходных металлов, двумерные полупроводники, зонная структура, запрещенная зона, теория функционала плотности

• Поступила: 17.11.2021 • Доработана: 24.02.2022 • Принята к опубликованию: 19.04.2022

Для цитирования: Пименов Н.Ю., Лавров С.Д., Кудрявцев А.В., Авдизиян А.Ю. Моделирование зонной структуры двумерных твёрдых растворов $\text{Mo}_x\text{W}_{1-x}\text{S}_{2y}\text{Se}_{2(1-y)}$. *Russ. Technol. J.* 2022;10(3):56–63. <https://doi.org/10.32362/2500-316X-2022-10-3-56-63>

Прозрачность финансовой деятельности: Авторы не имеют финансовой заинтересованности в представленных материалах или методах.

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

RESEARCH ARTICLE

Modeling of two-dimensional $\text{Mo}_x\text{W}_{1-x}\text{S}_{2y}\text{Se}_{2(1-y)}$ alloy band structure

Nikita Yu. Pimenov[®],
Sergey D. Lavrov,
Andrey V. Kudryavtsev,
Artur Yu. Avdizhiyan

MIREA – Russian Technological University, Moscow, 119454 Russia

[®] Corresponding author, e-mail: nikitapimenov13@gmail.com

Abstract

Objectives. Two-dimensional transition metal dichalcogenides (TMDs) are utilized for various optical applications due to the presence in these materials of a direct band gap corresponding to the visible and near-infrared spectral regions. However, a limited set of existing TMDs makes the region of the used spectral range discrete. The most effective way to solve this problem is to use two-dimensional TMD films based on multicomponent alloys, including three or more different chemical elements (while TMDs consist of two). By varying their morphological composition, one can control the value of the band gap and thus their optical absorption spectrum. However, since the band gap in such structures is highly nonlinear as far as their chemical composition is concerned, it can be challenging to select the required concentration in order to achieve uniform absorption. In this regard, the purpose of this work is to theoretically determine the dependence of the band gap of four-component two-dimensional $\text{Mo}_x\text{W}_{1-x}\text{S}_{2y}\text{Se}_{2(1-y)}$ alloys on their morphological composition.

Methods. The calculations were performed within the framework of the density functional theory using the Quantum Espresso software package. Flakes of two-dimensional TMDs alloys were prepared from bulk TMDs crystals by mechanical exfoliation on a Si/SiO₂ substrate. An experimental study of the photoluminescence characteristics was carried out using photoluminescence microscopy-spectroscopy.

Results. In this work, the dependence of the band gap on the morphological composition of two-dimensional $\text{Mo}_x\text{W}_{1-x}\text{S}_{2y}\text{Se}_{2(1-y)}$ alloys was determined. Upon varying the composition of TMDs alloys, it was found that the band gap changes from 1.43 to 1.83 eV. The obtained theoretical results are in qualitative agreement with the experimental data.

Conclusions. The minimum band gap is observed in alloys close to MoSe₂, while alloys close to WS₂ have the maximum band gap value.

Keywords: transition metal dichalcogenides, two-dimensional semiconductors, band structure, band gap, density functional theory

• Submitted: 17.11.2021 • Revised: 24.02.2022 • Accepted: 19.04.2022

For citation: Pimenov N.Yu., Lavrov S.D., Kudryavtsev A.V., Avdizhiyan A.Yu. Modeling of two-dimensional $\text{Mo}_x\text{W}_{1-x}\text{S}_2\text{Se}_{2(1-y)}$ alloy band structure. *Russ. Technol. J.* 2022;10(3):56–63. <https://doi.org/10.32362/2500-316X-2022-10-3-56-63>**Financial disclosure:** The authors have no a financial or property interest in any material or method mentioned.

The authors declare no conflicts of interest.

ВВЕДЕНИЕ

Открытие Новоселовым и Геймом способа получения графена в 2004 г. [1] вызвало огромный интерес к исследованию различных двумерных материалов с уникальными физическими свойствами. Среди таких материалов можно выделить дихалькогениды переходных металлов (ДПМ). ДПМ представляют собой материалы с формулой MX_2 , где М – переходный металл (Mo, W и др.), а X – халькоген (S, Se и др.). Атомы металла и халькогена имеют преимущественно ковалентную связь и образуют гексагональную решетку. Объемные кристаллы обладают слоистой структурой со слабыми Ван-дер-Ваальсовыми взаимодействиями между слоями [2]. В отличие от графена, который является полуметаллом, двумерные ДПМ обладают запрещенной зоной. Ключевой особенностью таких материалов является сильное изменение конфигурации их зонной структуры при изменении толщины: так объемные кристаллы ДПМ являются непрямозонными полупроводниками, а двумерные – прямозонными [3]. Благодаря прямому переходу, высокой подвижности носителей заряда и ряду других свойств [4] двумерные ДПМ находят применение в качестве материалов для создания фотодетекторов [5], фототранзисторов [6], солнечных элементов [7] и других устройств опто- и наноэлектроники [8].

Варьируя количество слоев, состав, деформацию и другие параметры ДПМ можно менять параметры устройств, сделанных на их основе. Прямозонный переход в двумерных ДПМ способствует эффективному поглощению и генерации света, что важно в оптических приложениях. Важной характеристикой, определяющей оптическое поглощение материала, является ширина запрещенной зоны. В двумерных ДПМ ширина запрещенной зоны составляет порядка 1–2 эВ, что соответствует видимой и ближней инфракрасной областям спектра. Так как количество различных ДПМ весьма ограничено, область используемого спектрального диапазона является дискретной. Одним из способов решения данной проблемы является синтез различных структур, состоящих из более чем двух видов атомов. Благодаря схожей атомной структуре различных ДПМ возможно создание твердых растворов на их основе (например, $\text{MoS}_{2x}\text{Se}_{2(1-x)}$ или $\text{Mo}_x\text{W}_{x-1}\text{S}_2$) [9]. Помимо этого, много работ посвящено созданию и исследованию

гетероструктур, состоящих из двух слоев ДПМ различного состава (например, MoS_2/WS_2) [10] и «монослоев Януса» (материалов, имеющих формулу MXY , где М – атом переходного металла, который заключен между двумя однородными слоями различных халькогенов X и Y), таких как MoSSe или WSSe [11].

Использование твердых растворов двумерных ДПМ обусловлено тем, что, меняя морфологический состав, можно довольно точно контролировать ширину запрещенной зоны. Это, в свою очередь, позволяет управлять спектром поглощения на всем диапазоне возможных значений. Нелинейный характер зависимости ширины запрещенной зоны от морфологического состава твердого раствора затрудняет подбор необходимой концентрации для достижения требуемых параметров. В связи с этим возникает необходимость в определении данной зависимости.

В настоящее время существует довольно много работ по исследованию трехкомпонентных структур [12, 13], но более сложные структуры остаются слабо изученными. В связи с этим в рамках данной работы был выполнен теоретический расчет зонной структуры двумерных твердых растворов $\text{Mo}_x\text{W}_{1-x}\text{S}_2\text{Se}_{2(1-y)}$ при $x, y \in 0-1$ и определена зависимость ширины запрещенной зоны от морфологического состава.

МЕТОДЫ

Все расчеты в данной работе были выполнены из первых принципов (*ab initio*) в рамках теории функционала плотности (ТФП) с обменно-корреляционным функционалом Пердью – Бурке – Эйзернхоффа [14] и ультрамягкими псевдопотенциалами. Расчеты были выполнены в программной среде *Quantum Espresso* [15]. Минимальная кинетическая энергия отсечки была выбрана равной 80 Ry. Размерность k -сетки была выбрана равной $8 \times 8 \times 1$. Генерация особых k -точек в первой зоне Бриллюэна выполнена методом Монкхроста – Пака [16]. Элементарная ячейка монослойного ДПМ содержит в себе 1 атом металла и 2 атома халькогена. Для расчетов была сгенерирована суперячейка, размерностью 2×2 элементарных ячеек и включающая в себя 4 атома металла и 8 атомов халькогенов. Структура суперячейки приведена на рис. 1.

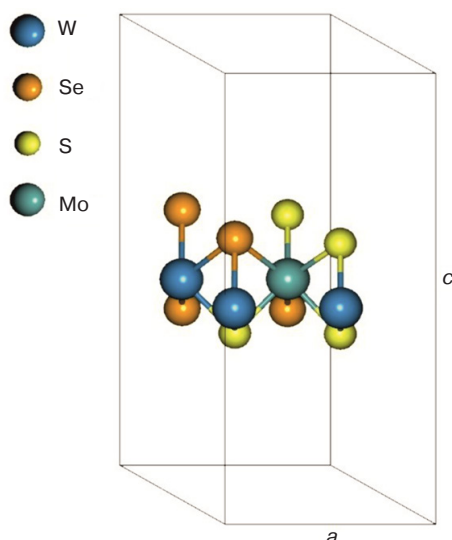


Рис. 1. Структура суперъединицы $\text{Mo}_x\text{W}_{1-x}\text{S}_{2y}\text{Se}_{2(1-y)}$ размерностью 2×2

Для того, чтобы исключить влияние соседних слоев, отношение параметров ячейки c/a было установлено порядка 2.5.

Двумерные кристаллиты твердых растворов ДПМ были изготовлены из объемных кристаллов ДПМ (коммерчески доступные материалы, 6Carbon Technology, Shenzhen, China Шэньчжэнь, Китай)¹ при помощи механической эксфолиации на подложку Si/SiO₂. Исходные образцы представляли собой серию $\text{MoS}_{2x}\text{Se}_{2(x-1)}$ с разной концентрацией халькогена. Параметр x в серии изменялся от 0 до 1 с шагом 0.1–0.2. Толщина созданных двумерных кристаллитов оценивалась при помощи оптической конфокальной микроскопии, что возможно благодаря использованию эффектов интерференции [17].

Экспериментальное исследование фотолуминесцентных характеристик созданных двумерных твердых растворов полупроводников было проведено при помощи фотолуминесцентной микроскопии-спектроскопии. В качестве источника лазерной накачки использовался твердотельный лазер с длиной волны 532 нм. Далее излучение с помощью объектива фокусировалось на образце, закрепленном на сканирующем столике. Плотность мощности оптического излучения накачки составляла приблизительно 15 мВт/мкм². Для детектирования оптического излучения использовался фотоэлектронный умножитель, сопряженный с оптическим монохроматором.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Расчет зонных структур двумерных твердых растворов $\text{Mo}_x\text{W}_{1-x}\text{S}_{2y}\text{Se}_{2(1-y)}$ проводился в несколько

¹ URL: <http://www.6carbon.com/index-en.php>, дата обращения 03.08.2021. [URL: <http://www.6carbon.com/index-en.php>. Accessed August 3, 2021.]

этапов. Сначала был проведен расчет двухкомпонентных ДПМ – MoS_2 , WS_2 , MoSe_2 и WSe_2 с использованием соответствующих элементарных ячеек. После чего было проведено сравнение полученных результатов с расчетами, выполненными ранее по схожей методике. На втором этапе был проведен расчет трехкомпонентных ДПМ – $\text{Mo}_x\text{W}_{1-x}\text{S}_2$, $\text{Mo}_x\text{W}_{1-x}\text{Se}_2$, $\text{MoS}_{2y}\text{Se}_{2(1-y)}$ и $\text{WS}_{2y}\text{Se}_{2(1-y)}$ различного морфологического состава. На заключительном этапе был сделан расчет четырехкомпонентных ДПМ $\text{Mo}_x\text{W}_{1-x}\text{S}_{2y}\text{Se}_{2(1-y)}$ и построен общий график зависимости ширины запрещенной зоны от морфологического состава исследуемых структур.

Рассчитанные на первом этапе зонные структуры двумерных MoS_2 , MoSe_2 , WS_2 и WSe_2 представлены на рис. 2.

Во всех рассчитанных структурах наблюдается прямозонный переход в К точке зоны Бриллюэна. Ширина E_g запрещенной зоны, параметр a элементарной ячейки, полученные в ходе расчетов, и результаты по схожей методике [18] приведены в таблице.

Таблица. Результаты теоретического расчета двухкомпонентных ДПМ

ДПМ	$a_{\text{теор}}, \text{\AA}$	$a, \text{\AA}$ [18]	$E_g \text{ теор}, \text{эВ}$	$E_g, \text{эВ}$ [18]
MoS_2	3.18	3.18	1.69	1.68
MoSe_2	3.32	3.32	1.44	1.45
WS_2	3.19	3.18	1.79	1.82
WSe_2	3.33	3.32	1.55	1.55

Расчет трехкомпонентных твердых растворов ДПМ был проведен для двух случаев: когда меняется концентрация атомов переходных металлов и при изменении концентрации атомов халькогенов. На рис. 3 представлены зависимости ширины E_g запрещенной зоны и параметра a суперъединицы для двумерных твердых растворов $\text{Mo}_x\text{W}_{1-x}\text{S}_2$ и $\text{Mo}_x\text{W}_{1-x}\text{Se}_2$ от изменения концентрации переходных металлов в их составе.

В обоих случаях характерно уменьшение ширины запрещенной зоны при преобладании Mo. Также заметно, что для твердых растворов $\text{Mo}_x\text{W}_{1-x}\text{S}_2$ характерна большая ширина запрещенной зоны, чем для $\text{Mo}_x\text{W}_{1-x}\text{Se}_2$, в среднем на 0.3 эВ. Параметр суперъединицы меняется незначительно (в пределах нескольких сотых \AA) и в среднем равен 6.36 \AA и 6.64 \AA для $\text{Mo}_x\text{W}_{1-x}\text{S}_2$ и $\text{Mo}_x\text{W}_{1-x}\text{Se}_2$ соответственно.

Аналогичные результаты расчетов для зависимостей $\text{MoS}_{2y}\text{Se}_{2(1-y)}$ и $\text{WS}_{2y}\text{Se}_{2(1-y)}$, в которых меняется отношение халькогенов, приведены на рис. 4.

С увеличением концентрации S в составе характерен рост ширины запрещенной зоны для обоих твердых растворов. При этом параметр суперъединицы

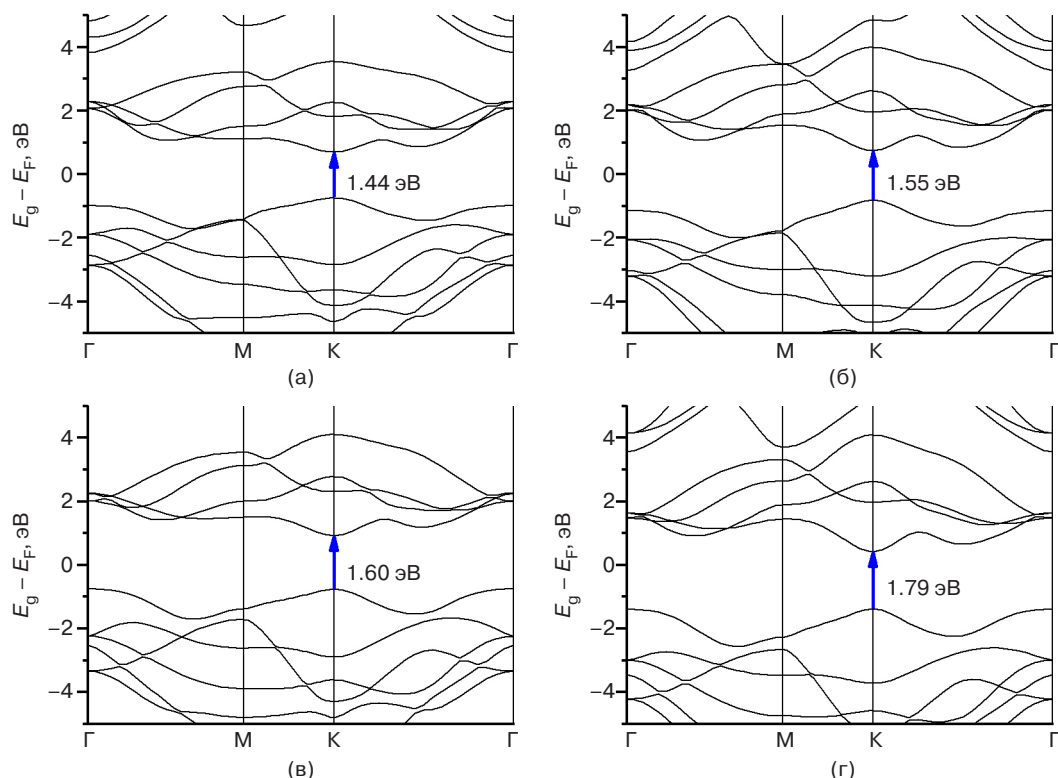


Рис. 2. Рассчитанные зонные структуры (а) MoSe_2 , (б) WSe_2 , (в) MoS_2 и (г) WSe_2 . Γ , M, K – характерные точки зоны Бриллюэна

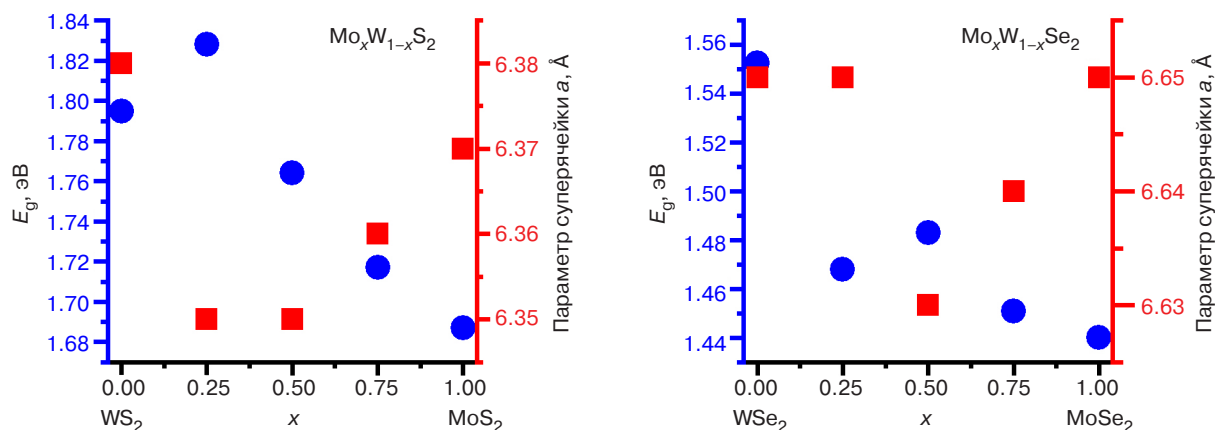


Рис. 3. Зависимость ширины запрещенной зоны (круг) и параметра суперрешетки (квадрат) от соотношения переходных металлов для $\text{Mo}_x\text{W}_{1-x}\text{S}_2$ и $\text{Mo}_x\text{W}_{1-x}\text{Se}_2$, где x – относительная концентрация атомов Mo в составе

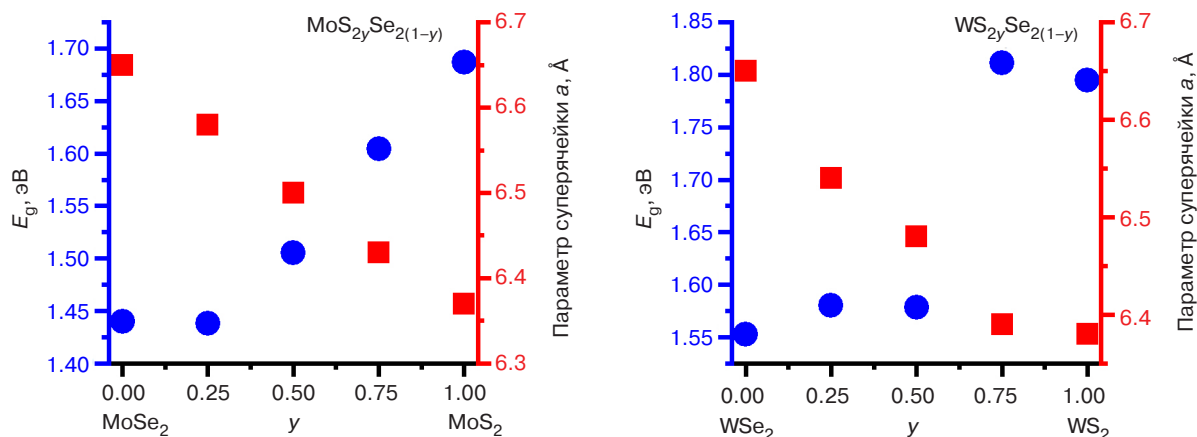


Рис. 4. Зависимость ширины запрещенной зоны (круг) и параметра суперрешетки (квадрат) от соотношения халькогенов для $\text{MoS}_2\text{Se}_{2(1-y)}$ и $\text{WS}_2\text{Se}_{2(1-y)}$, где y – относительная концентрация атомов S в составе

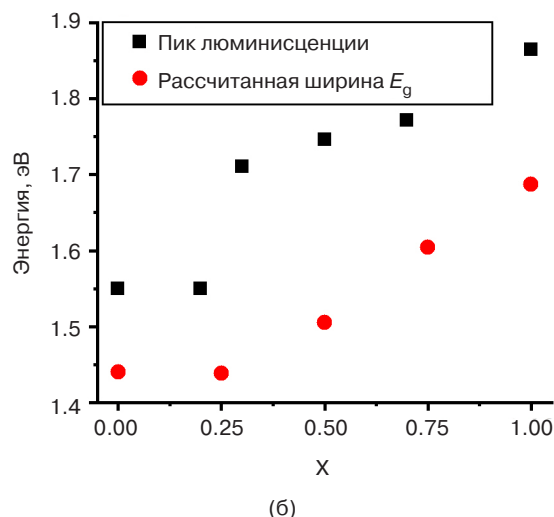
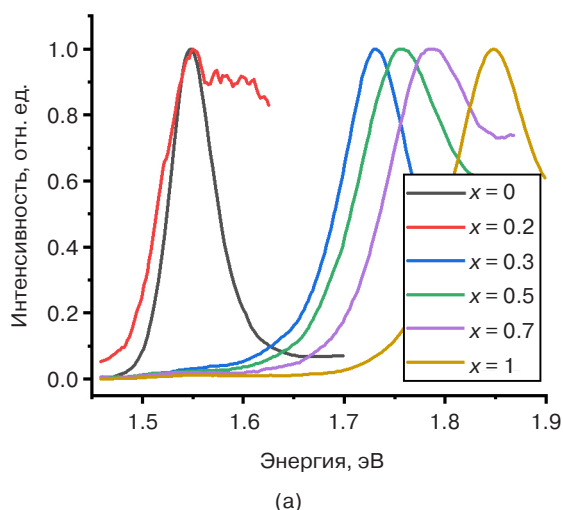


Рис. 5. (а) Спектры люминесценции твердых растворов двумерных кристаллитов ДПМ $\text{MoS}_{2-x}\text{Se}_{2(x-1)}$; (б) сравнение теоретически рассчитанной ширины запрещенной зоны $\text{MoS}_{2-x}\text{Se}_{2(x-1)}$ и положения максимума их пика люминесценции. X – значение x в $\text{MoS}_{2-x}\text{Se}_{2(x-1)}$

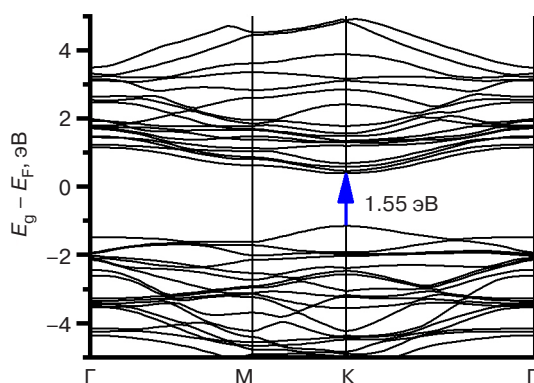


Рис. 6. Рассчитанная зонная структура твердого раствора $\text{Mo}_{0.25}\text{W}_{0.75}\text{S}_{0.5}\text{Se}_{1.5}$

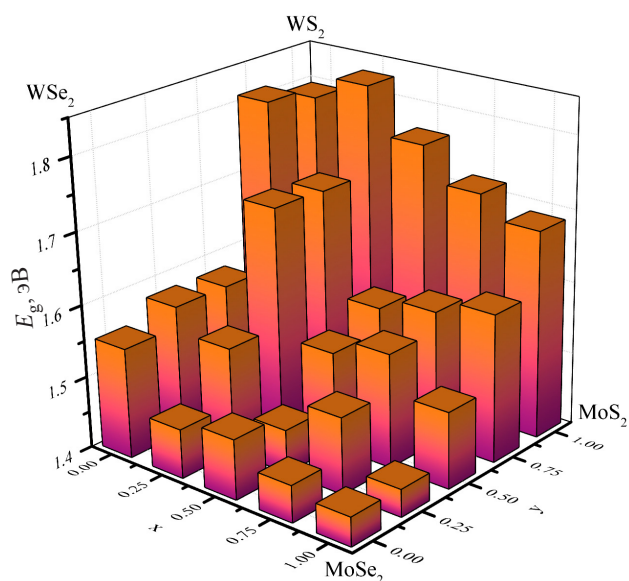


Рис. 7. Зависимость ширины запрещенной зоны от морфологического состава двумерных твердых растворов $\text{Mo}_x\text{W}_{1-x}\text{S}_2\text{Se}_{2(1-y)}$, где x – относительная концентрация атомов Mo, а y – относительная концентрация атомов S в составе

уменьшается при преобладании S в составе (примерно на 0.3 Å при переходе от Se к S).

Для экспериментальной проверки полученных теоретических результатов были получены спектры люминесценции созданных при помощи механической эксфолиации двумерных твердых растворов ДПМ. Полученные спектры люминесценции представлены на рис. 5а. Видно, что все спектры обладают характерным максимумом в диапазоне от 1.55 до 1.85 эВ. Положения максимумов для каждого из исследованных составов нанесены вместе с полученными теоретическими результатами ширины запрещенной зоны на рис. 5б. Из представленных результатов видно, что теоретические и экспериментальные значения при всех концентрациях ДПМ отличаются на фиксированное значение, равное приблизительно 0.2 эВ. Это связано с тем, что ТФП систематически недооценивает ширину запрещенной зоны, в результате чего данные, полученные в результате расчетов, несколько меньше, чем экспериментальные [19].

Последним этапом был расчет четырехкомпонентных твердых растворов $\text{Mo}_x\text{W}_{1-x}\text{S}_2\text{Se}_{2(1-y)}$ различного состава. По полученным зонным структурам были определены значения ширины запрещенной зоны. Пример рассчитанной зонной структуры для твердого раствора $\text{Mo}_{0.25}\text{W}_{0.75}\text{S}_{0.5}\text{Se}_{1.5}$ приведен на рис. 6.

Во всех рассчитанных четырехкомпонентных твердых растворах $\text{Mo}_x\text{W}_{1-x}\text{S}_2\text{Se}_{2(1-y)}$, как и в двухкомпонентных, наблюдается прямозонный переход в К точке зоны Бриллюэна. На рис. 7 приведена зависимость ширины запрещенной зоны от морфологического состава твердых растворов $\text{Mo}_x\text{W}_{1-x}\text{S}_2\text{Se}_{2(1-y)}$ для x, y ∈ 0–1.

Результаты показывают, что в двумерных твердых растворах $\text{Mo}_x\text{W}_{1-x}\text{S}_2\text{Se}_{2(1-y)}$ различного морфологического состава можно варьировать ширину

запрещенной зоны в пределах порядка от 1.83 эВ до 1.43 эВ. При этом минимальные значения запрещенной зоны имеют структуры, близкие по своему морфологическому составу к монослою MoSe_2 , а максимальные – к монослою WS_2 .

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В ходе работы был проведен теоретический расчет зонной структуры монослойных твердых растворов $\text{Mo}_x\text{W}_{1-x}\text{S}_2\text{ySe}_{2(1-y)}$. Определено, что все рассчитанные структуры являются прямозонными полупроводниками с переходом в К точке зоны Бриллюэна. Показано, что параметр суперъядейки слабо зависит от изменения концентрации переходных металлов (Mo и W) и в большей степени определяется концентрацией халькогенов (уменьшается при переходе от Se к S). В двумерных твердых растворах $\text{Mo}_x\text{W}_{1-x}\text{S}_2\text{ySe}_{2(1-y)}$ можно получать структуры с шириной запрещенной зоны в пределах от 1.43 эВ (для твердых растворов близких по составу к MoSe_2) до 1.83 эВ (для твердых растворов близких по составу к WS_2). Сравнение результатов теоретического расчета с экспериментальными данными показало качественное совпадение зависимостей. При этом важно учитывать, что ТФП систематически

недооценивает ширину запрещенной зоны примерно на 0.2 эВ. Дальнейшее улучшение полученных результатов подразумевает увеличение размерности суперъядейки, что позволит получить значения запрещенной зоны для большего набора структур $\text{Mo}_x\text{W}_{1-x}\text{S}_2\text{ySe}_{2(1-y)}$ различного морфологического состава.

БЛАГОДАРНОСТИ

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант № 19-72-10165). Экспериментальные исследования были выполнены с использованием оборудования Центра коллективного пользования РТУ МИРЭА.

Вклад авторов

Н.Ю. Пименов и **А.В. Кудрявцев** – теоретический расчет зонной структуры исследуемых твердых растворов.

С.Д. Лавров и **А.Ю. Авдизиян** – экспериментальное исследование фотолюминесцентных характеристик твердых растворов.

Authors' contributions

N.Yu. Pimenov and **A.V. Kudryavtsev** – zone structure simulation of the alloys under study.

S.D. Lavrov and **A.Yu. Avdizhiyan** – experimental study of photoluminescent characteristics of alloys.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ / REFERENCES

1. Novoselov K.S., Geim A.K., Morozov S.V., Jiang D., Zhang Y., Dubonos S.V., Grigorieva I.V., Firsov A.A. Electric field effect in atomically thin carbon films. *Science*. 2004;306(5696):666–669. <https://doi.org/10.1126/science.1102896>
2. Чернозатонский Л.А., Артюх А.А. Квазидвумерные дихалькогениды переходных металлов: структура, синтез, свойства и применение. *Успехи физических наук*. 2018;188(1): 3–30. <https://doi.org/10.3367/UFNr.2017.02.038065> [Chernozatonskii L.A., Artyukh A.A. Quasi-two-dimensional transition metal dichalcogenides: structure, synthesis, properties, and applications. *Phys.-Usp.* 2018;61(1):2–28. <https://doi.org/10.3367/UFNr.2017.02.038065>]
3. Yun W.S., Han S.W., Hong S.C., Kim I.G., Lee J.D. Thickness and strain effects on electronic structures of transition metal dichalcogenides: 2H-MX₂ semiconductors (M = Mo, W; X = S, Se, Te). *Phys. Rev. B*. 2012;85(3):033305. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.85.033305>
4. Huo N., Yang Y., Wu Y.-N., Zhang X.-G., Pantelides S.T., Konstantatos G. High carrier mobility in monolayer CVD-grown MoS_2 through phonon suppression. *Nanoscale*. 2018;10(31):15071–15077. <https://doi.org/10.1039/C8NR04416C>
5. Taffelli A., Dirè S., Quaranta A., Pancheri L. MoS_2 based photodetectors: a review. *Sensors*. 2021;21(8):2758. <https://doi.org/10.3390/s21082758>
6. Shin G. H., Park C., Lee H.J., Jin H.J., Choi S.-Y. Ultrasensitive phototransistor based on WSe_2 - MoS_2 van der Waals heterojunction. *Nano Lett.* 2020;20(8): 5741–5748. <https://doi.org/10.1021/acs.nanolett.0c01460>
7. Wang T., Zheng F., Tang G., Cao J., You P., Zhao J., Yan F. 2D WSe_2 flakes for synergistic modulation of grain growth and charge transfer in tin-based perovskite solar cells. *Adv. Sci.* 2021;8(11):2004315. <https://doi.org/10.1002/advs.202004315>
8. Choi W., Choudhary N., Han G.H., Park J., Akinwande D., Lee Y.H. Recent development of two-dimensional transition metal dichalcogenides and their applications. *Mater. Today*. 2017;20(3):116–130. <https://doi.org/10.1016/j.mattod.2016.10.002>
9. Su S.-H., Hsu W.-T., Hsu C.-L., Chen C.-H., Chiu M.-H., Lin Y.-C., Chang W.-H., Suenaga K., He J.-H., Li L.-J. Controllable synthesis of band-gap-tunable and monolayer transition-metal dichalcogenide alloys. *Front. Energy Res.* 2014;2:27. <https://doi.org/10.3389/fenrg.2014.00027>
10. Li M.-Y., Chen C.-H., Shi Y., Li L.-J. Heterostructures based on two-dimensional layered materials and their potential applications. *Mater. Today*. 2016;19(6): 322–335. <https://doi.org/10.1016/j.mattod.2015.11.003>
11. Petrić M.M., Kremser M., Barbone M., Qin Y., Sayyad Y., Shen Y., Tongay S., Finley J.J., Botello-Méndez A.R., Müller K. Raman spectrum of Janus transition metal dichalcogenide monolayers WSe_2 and MoSe_2 . *Phys. Rev. B*. 2021;103(3):035414. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.103.035414>

12. Ernandes C., Khalil L., Almabrouk H., Pierucci D., Zheng B., Avila J., Dudin P., Chaste J., Oehler F., Pala M., Bisti F., Brulé T., Lhuillier E., Pan A., Ouerghi A. Indirect to direct band gap crossover in two-dimensional $\text{WS}_{2(1-x)}\text{Se}_{2x}$ alloys. *npj 2D Mater. Appl.* 2021;5(1):7. <https://doi.org/10.1038/s41699-020-00187-9>
13. Wang Z., Sun J., Wang H., Lei Y., Xie Y., Wang G., Zhao Y., Li X., Xu H., Yang X., Feng L., Ma X. 2H/1T' phase $\text{WS}_{2(1-x)}\text{Te}_{2x}$ alloys grown by chemical vapor deposition with tunable band structures. *Appl. Surf. Sci.* 2020;504:144371. <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2019.144371>
14. Perdew J.P., Burke K., Ernzerhof M. Generalized Gradient Approximation Made Simple. *Phys. Rev. Lett.* 1996;77(18):3865–3868. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.77.3865>
15. Giannozzi P., Baroni S., Bonini N., Calandra M., Car R., Cavazzoni C., Ceresoli D., Chiarotti G.L., Cococcioni M., Dabo I., Corso A.D., Gironcoli S., Fabris S., Fratesi G., Gebauer R., Gerstmann U., Gougoussis C., Kokalj A., Lazzeri M., Martin-Samos L., Marzari N., Mauri F., Mazzarello R., Paolini S., Pasquarello A., Paulatto L., Sbraccia C., Scandolo S., Sclauzero G., Seitsonen A.P., Smogunov A., Umari P., Wentzcovitch R.M. QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials. *J. Phys.: Condens. Matter.* 2009;21(39):395502. <https://doi.org/10.1088/0953-8984/21/39/395502>
16. Monkhorst H.J., Pack J.D. Special points for Brillouin-zone integrations. *Phys. Rev. B.* 1976;13(12):5188–5192. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.13.5188>
17. Li S.-L., Miyazaki H., Song H., Kuramochi H., Nakaharai S., Tsukagoshi K. Quantitative Raman spectrum and reliable thickness identification for atomic layers on insulating substrates. *ACS Nano.* 2012;6(8):7381–7388. <https://doi.org/10.1021/nn3025173>
18. Zhuang H.L., Henning R.G. Computational search for single-layer transition-metal dichalcogenide photocatalysts. *J. Phys. Chem. C.* 2013;117(40):20440–20445. <https://doi.org/10.1021/jp405808a>
19. Huang J., Wang W., Fu Q., Yang L., Zhang K., Zhang J., Xiang B. Stable electrical performance observed in large-scale monolayer $\text{WSe}_{2(1-x)}\text{S}_{2x}$ with tunable band gap. *Nanotechnology.* 2016;27(13):13LT01. <https://doi.org/10.1088/0957-4484/27/13/13LT01>

Об авторах

Пименов Никита Юрьевич, аспирант кафедры нанoeлектроники Института перспективных технологий и промышленного программирования ФГБОУ ВО «МИРЭА – Российский технологический университет» (119454, Россия, Москва, пр-т Вернадского, д. 78). E-mail: nikitapimenov13@gmail.com. ResearcherID ABB-2465-2021, <https://orcid.org/0000-0001-9882-8647>

Лавров Сергей Дмитриевич, к.ф.-м.н., доцент, старший научный сотрудник кафедры нанoeлектроники Института перспективных технологий и промышленного программирования ФГБОУ ВО «МИРЭА – Российский технологический университет» (119454, Россия, Москва, пр-т Вернадского, д. 78). E-mail: sdlavrov@mail.ru. Scopus Author ID 55453548100, ResearcherID G-2912-2016, <https://orcid.org/0000-0002-9432-860X>

Кудрявцев Андрей Владимирович, к.ф.-м.н., доцент, научный сотрудник кафедры нанoeлектроники Института перспективных технологий и промышленного программирования ФГБОУ ВО «МИРЭА – Российский технологический университет» (119454, Россия, Москва, пр-т Вернадского, д. 78). E-mail: kudryavcev_a@mirea.ru. Scopus Author ID 55219889700, ResearcherID O-1457-2016, <https://orcid.org/0000-0002-2126-7404>

Авдизиян Артур Юрьевич, к.ф.-м.н., младший научный сотрудник кафедры нанoeлектроники Института перспективных технологий и промышленного программирования ФГБОУ ВО «МИРЭА – Российский технологический университет» (119454, Россия, Москва, пр-т Вернадского, д. 78). E-mail: avdizhiyan@mirea.ru. Scopus Author ID 57200646355, ResearcherID C-2190-2018, <https://orcid.org/0000-0003-1766-5482>

About the authors

Nikita Yu. Pimenov, Postgraduate Student, Department of Nanoelectronics, Institute for Advanced Technologies and Industrial Programming, MIREA – Russian Technological University (78, Vernadskogo pr., Moscow, 119454 Russia). E-mail: nikitapimenov13@gmail.com. ResearcherID ABB-2465-2021, <https://orcid.org/0000-0001-9882-8647>

Sergey D. Lavrov, Cand. Sci. (Phys.-Math.), Associate Professor, Senior Researcher, Department of Nanoelectronics, Institute for Advanced Technologies and Industrial Programming, MIREA – Russian Technological University (78, Vernadskogo pr., Moscow, 119454 Russia). E-mail: sdlavrov@mail.ru. Scopus Author ID 55453548100, ResearcherID G-2912-2016, <https://orcid.org/0000-0002-9432-860X>

Andrey V. Kudryavtsev, Cand. Sci. (Phys.-Math.), Associate Professor, Researcher, Department of Nanoelectronics, Institute for Advanced Technologies and Industrial Programming, MIREA – Russian Technological University (78, Vernadskogo pr., Moscow, 119454 Russia). E-mail: kudryavcev_a@mirea.ru. Scopus Author ID 55219889700, ResearcherID O-1457-2016, <https://orcid.org/0000-0002-2126-7404>

Artur Yu. Avdizhiyan, Cand. Sci. (Phys.-Math.), Junior Researcher, Department of Nanoelectronics, Institute for Advanced Technologies and Industrial Programming, MIREA – Russian Technological University (78, Vernadskogo pr., Moscow, 119454 Russia). E-mail: avdizhiyan@mirea.ru. Scopus Author ID 57200646355, ResearcherID C-2190-2018, <https://orcid.org/0000-0003-1766-5482>