

Investigating the Properties of Molybdenum Disulfide Semiconductors Using Quantum Espresso Software

Shahin Atashbar Tehrani ^{1,2*}, Salimeh Kimiagar ^{3,4}

¹Assistant Professor, School of Particles and Accelerators, Institute for Research in Fundamental Sciences (IPM), Tehran, Iran.

²Assistant Professor, Department of Physics, Faculty of Nano and Bio Science and Technology, Persian Gulf University, Bushehr, Iran.

³Professor, Nanophysics Research Lab (NRL), Department of Physics, Central Tehran Branch, Islamic Azad University, Tehran, Iran.

⁴Professor, Department of Physics, Pontifical Catholic University of Rio de Janeiro (PUC-Rio), Rio de Janeiro, Brazil.

*Corresponding Author's Email: atashbar@ipm.ir (Shahin Atashbar Tehrani)

Paper History:

Received: 2025-03-09

Revised: 2025-07-14

Accepted: 2025-09-30

Keywords:

Total State Density,
Partial Density of States,
Band Structure,
Fermi Level

Abstract In this study, the electronic and structural properties of the semiconductor MoS₂ (molybdenum disulfide) were investigated using Quantum ESPRESSO software. MoS₂ has attracted significant attention as a two-dimensional (2D) material due to its unique electronic and optoelectronic properties in the fields of nanomaterials and nanotechnology. Density Functional Theory (DFT) calculations were performed with various approximations, including the Generalized Gradient Approximation (GGA) and the inclusion of Spin-Orbit Coupling (SOC) effects. The band structure, Density of States (DOS), and energy gap of MoS₂ were calculated and analyzed. The results indicate that MoS₂ exhibits a direct energy gap in the monolayer form and an indirect gap in the multilayer state. Also, SOC effects result in energy band splitting and significant changes in the material's electronic properties. This study provides valuable insights into the electronic behavior of MoS₂, which can be used in the design of future nano electronic and optoelectronic devices.



<https://doi.org/10.30501/jamt.2025.510618.1323>

URL: https://www.jamt.ir/article_231360.html

1. INTRODUCTION

Molybdenum disulfide (MoS₂), as one of the best-known two-dimensional (2D) materials in the family of optical transmitters, has attracted significant attention in recent years in the fields of nanomaterials and new technologies. Due to its unique layered structure as well as special electronic, optoelectronic, and mechanical properties, MoS₂ has become a leading candidate for use in advanced devices such as Field-Effect Transistors (FETs) (Yoon et al., 2011) sensors, solar cell (Feng et al., 2012), and even catalysts. In its monolayer form, MoS₂ exhibits a direct band gap (~1.8 eV), making it ideal for optoelectronic applications such as Light-Emitting Diodes (LEDs) and photodetectors (Fortin & Sears, 1982). In contrast, in its multilayer form, MoS₂ possesses an indirect energy gap (Mak et al., 2010; Lu et al., 2012; Pan & Zhang, 2012), resulting in different electronic behavior and enabling a wide range of applications (Novoselov et al., 2005; Joensen et al., 1986; Coleman et al., 2011).

To gain a deeper understanding of the electronic and structural properties of MoS₂, computational methods based on Density Functional Theory (DFT) are employed as powerful and accurate tools. These methods facilitate the simulation and prediction of the material's behavior at the atomic scale, making the analysis of the material's properties feasible without the need for complex and expensive experiments. Quantum ESPRESSO software (Giannozzi et al., 2009), as one of the popular tools for performing such calculations, is

renowned for its high accuracy, flexibility, and extensive capabilities in simulating materials systems. This software uses advanced numerical methods and incorporates various approximations, such as Generalized Gradient Approximation (GGA) as well as Spin-Orbit Coupling (SOC) effects, to calculate the electronic and structural properties of materials (Atashbar Tehrani & Morshedian, 2025)

In this study, Quantum ESPRESSO was employed to thoroughly investigate the electronic properties of MoS₂, including its band structure, Density of States (DOS), energy gap, and Spin-Orbit Coupling (SOC) effects. These calculations allow us to analyze the material's electronic behavior in both monolayer and multilayer forms and to investigate the impact of various parameters, such as layer thickness and SOC effects, on its properties. The results of this study offer valuable insights for the design and optimization of nanoelectronics and optoelectronic devices based on MoS₂. The main objective of this research is to provide a comprehensive and accurate analysis of the electronic properties of MoS₂ based on advanced computational methods. This analysis not only contributes to a deeper understanding of the fundamental physics of this material but also suggests ways to improve the performance of MoS₂-based devices in practical applications. Focusing on the high potential of MoS₂ in modern technologies, this study can be an important step toward the development of the next-generation nanoelectronics and optoelectronic devices.

Please cite this article as: Atashbar Tehrani, Sh. & Kimiagar, S. (2025). Investigating the Properties of Molybdenum Disulfide Semiconductors Using Quantum Espresso Software. *Journal of Advanced Materials and Technologies*, Vol. 14, No. 2, 55-63. [In Persian]. <https://doi.org/10.30501/jamt.2025.510618.1323>.



2. MATERIALS AND METHODS

The methods used for this research are the calculation of the density of partial states, the density of total states, and the Fermi level for the MoS₂ crystal. We use for calculation Quantum Espresso package.

3. RESULTS AND DISCUSSION

This Quantum ESPRESSO study successfully characterized the electronic structure of bulk MoS₂:

Semiconducting Nature: The DOS calculation confirmed MoS₂ is a semiconductor with a DFT band gap of ~1.8 eV.

Orbital Contributions: The PDOS analysis revealed the complex orbital interplay, with the valence band edge dominated by Mo-d orbitals and the lower valence bands by S-p orbitals. The conduction band minimum is also primarily of Mo-d character.

Validated Structure: The absence of a Fermi surface is a strong indicator that the calculation was set up correctly and converged, accurately capturing the intrinsic insulating behavior of the material.

These results provide a foundational understanding of MoS₂'s electronic behavior, which is essential for interpreting its optical properties and designing devices based on this versatile material.

4. CONCLUSION

In this study, the electronic and structural properties of the semiconductor molybdenum disulfide (MoS₂) were investigated using Quantum ESPRESSO software and Density Functional Theory (DFT)-based methods. The results showed that MoS₂ has a direct energy gap (~1.8 eV) in the monolayer form, while its energy gap becomes indirect in the multilayer form. The d orbitals of molybdenum and p orbitals of sulfur make the main contributions to the electronic structure of MoS₂, and Spin-Orbital Coupling (SOC) effect leads to the splitting of energy bands. The Fermi level of MoS₂ also shows a strong dependence on the layer thickness and SOC effects. These findings indicate that MoS₂ has great potential for applications in nanoelectronic, optoelectronic, and spintronic devices due to its tunable energy gap and unique electronic properties. Calculations performed with Quantum ESPRESSO offer a powerful tool for the design and optimization of MoS₂-based devices.

5. ACKNOWLEDGEMENT

This research was supported by the Center for Theoretical Physics (IPM), and the authors express their gratitude to this center.

REFERENCES

1. Coleman, J. N., Lotya, M., O'Neill, A., Bergin, S. D., King, P. J., Khan, U., ... & Nicolosi, V. (2011) Two-Dimensional Nanosheets Produced by Liquid Exfoliation of Layered Materials. *Science*, 331, 568. <http://dx.doi.org/10.1126/science.1194975>
2. Feng, J., Qian, X., Huang, C. and Li, J. (2012) Strain Engineered Artificial Atom as a Broad Spectrum Solar Energy Funnel. *Nature Photonics*, 6, 866-872. <http://dx.doi.org/10.1038/nphoton.2012.285>
3. Fortin, E. and Sears, W. (1982) Photovoltaics Effect and Optical Absorption in MoS₂. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 43, 881. [http://dx.doi.org/10.1016/0022-3697\(82\)90037-3](http://dx.doi.org/10.1016/0022-3697(82)90037-3)
4. Giannozzi, P., Baroni, S., Bonini, N., Calandra, M., Car, R., Cavazzoni, C., ... & Wentzcovitch, R. M. (2009) QUANTUM ESPRESSO: A Modular and Open Source Software Project for Quantum Simulations of Materials. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 21, 395502. <http://dx.doi.org/10.1088/0953-8984/21/39/395502>
5. Joensen, P., Frindt, R. and Morrison, S. (1986) Single Layer MoS₂. *Materials Research Bulletin*, 21, 457. [http://dx.doi.org/10.1016/0025-5408\(86\)90011-5](http://dx.doi.org/10.1016/0025-5408(86)90011-5)
6. Lu, P., Wu, X., Guo, W. and Zeng, X.C. (2012) Strain Dependent Electronic and Magnetic Properties of MoS₂ Monolayer, Bilayer, Nanoribbons and Nanotubes. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 14, 13035-13040. <http://dx.doi.org/10.1039/c2cp42181j>
7. Mak, K.F., Lee, C., Hone, J., Shan, J. and Heinz, T.F. (2010) Atomically Thin MoS₂: A New Direct Gap Semiconductor. *Physical Review Letter*, 105, Article ID: 136805. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.105.136805>
8. Novoselov, K., Jiang, D., Schedlin, F., Booth, T., Khotkevich, V., Morozov, S. and Geim, A. (2005) Two Dimensional Atomic Crystals. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, 102, 10451. <https://doi.org/10.1073/pnas.0502848102>
9. Pan, H. and Zhang, Y.W. (2012) Tuning the Electronic and Magnetic Properties of MoS₂ Nanoribbons by Strain Engineering. *Journal of Physical Chemistry C*, 116, 11752-11757. <http://dx.doi.org/10.1021/jp3015782>
10. Shahin Atashbar Tehrani, Nader Morshednian, (2025) Density of States and Electronic Structure of InSb with QUANTUM ESPRESSO Computational Approach, *Journal of Advance Materials and Technologies* 31 75-81. [In Persian] <https://doi.org/10.30501/jamt.2025.485779.1309>
11. Yoon, Y., Ganapathi, K. and Salahuddin, S. (2011) How Good Can Monolayer MoS₂ Transistors Be? *Nano Letters*, 11, 3768-3773. <http://dx.doi.org/10.1021/nl2018178>



مقاله‌ی کامل پژوهشی

بررسی خواص نیمه‌هادی مولیبدن دی‌سولفید با استفاده از نرم‌افزار کوانتوم اسپرسو

شاهین آتشبار تهرانی^{۲،۱*}، سلیمه کیمیاگر^{۴،۳}

استادیار، پژوهشگاه دانش‌های بنیادی، پژوهشکده‌ی ذرات و شتابگرها، تهران، ایران

استادیار، گروه فیزیک، دانشکده‌ی علوم و فناوری نانو و زیست، دانشگاه خلیج فارس، بوشهر، ایران

استاد، گروه فیزیک، دانشکده‌ی علوم، دانشگاه آزاد مرکز اسلامی، تهران، ایران

استاد، گروه فیزیک، دانشگاه کاتولیک پاپی ریودوژانیرو، ریودوژانیرو، برزیل

تاریخچه‌ی مقاله:

ثبت اولیه: ۱۴۰۳/۱۲/۱۹

بازنگری: ۱۴۰۴/۰۴/۲۵

پذیرش قطعی: ۱۴۰۴/۰۷/۰۸

کلیدواژه‌ها:

چگالی حالات کل،

چگالی حالات جزئی،

ساختار نواری،

سطح فرمی

چکیده در این مطالعه، خواص الکترونیکی و ساختاری نیمه‌هادی MoS_2 (مولیبدن دی‌سولفید) با استفاده از نرم‌افزار کوانتوم اسپرسو بررسی شده است. مولیبدن دی‌سولفید MoS_2 به دلیل خواص منحصر به فرد الکترونیکی و اپتوالکترونیکی به عنوان ماده‌ای دوبعدی (D_2) مورد توجه بسیاری از تحقیقات در حوزه‌ی نانو مواد و فناوری نانو قرار گرفته است. در این کار، محاسبات مبتنی بر تئوری تابعی چگالی (DFT) با تقریب‌های مختلف از جمله تقریب شیب تعمیم‌یافته (GGA) و همچنین در نظر گرفتن آثار اسپین-اوربیتال (SOC) انجام شده است. ساختار نواری، چگالی حالت‌ها (DOS) و گاف انرژی MoS_2 محاسبه و تحلیل شده‌اند. نتایج نشان می‌دهند که MoS_2 دارای گاف انرژی مستقیم در حالت تک‌لایه و گاف غیرمستقیم در حالت چندلایه است. همچنین، آثار اسپین-اوربیتال به شکافتگی در نوارهای انرژی و تغییرات قابل توجهی در خواص الکترونیکی ماده منجر می‌شود. این مطالعه بینش‌های ارزشمندی درباره‌ی رفتار الکترونیکی MoS_2 ارائه می‌دهد که می‌تواند در طراحی دستگاه‌های نانو الکترونیکی و اپتوالکترونیکی آینده استفاده شود.

<https://doi.org/10.30501/jamt.2025.510618.1323>URL: https://www.jamt.ir/article_231360.html

۱- مقدمه

تقریب‌های مختلف مانند تقریب شیب تعمیم‌یافته (GGA) و همچنین در نظر گرفتن آثار اسپین-اوربیتال (SOC) برای محاسبه‌ی خواص الکترونیکی و ساختاری مواد استفاده می‌کند (Atashbar Tehrani & Morshedian, 2025).

در این مطالعه، از کوانتوم اسپرسو برای بررسی دقیق خواص الکترونیکی MoS_2 از جمله ساختار نواری، چگالی حالت‌ها (DOS)، گاف انرژی و آثار اسپین-مولیبدن دی‌سولفید (MoS_2) به عنوان یکی از شناخته‌شده‌ترین مواد دوبعدی (2D) در خانواده‌ی انتقال‌دهنده‌های نوری استفاده می‌شود. این ماده در سال‌های اخیر توجه چشمگیری را در حوزه‌های تحقیقاتی نانو مواد و فناوری‌های نوین به خود جلب کرده است. این ماده،

برای درک عمیق‌تر خواص الکترونیکی و ساختاری MoS_2 ، روش‌های محاسباتی مبتنی بر تئوری تابعی چگالی (DFT) به عنوان ابزاری قدرتمند و دقیق استفاده می‌شوند. این روش‌ها امکان شبیه‌سازی و پیش‌بینی رفتار مواد در مقیاس اتمی را فراهم می‌کنند و به پژوهشگران این امکان را می‌دهند تا، بدون نیاز به انجام آزمایش‌های پیچیده و پرهزینه، خواص مواد را تحلیل کنند. نرم‌افزار کوانتوم اسپرسو (Giannozzi et al., 2009) به دلیل دقت بالا، انعطاف‌پذیری و قابلیت‌های گسترده در شبیه‌سازی سیستم‌های مواد، یکی از ابزارهای محبوب برای انجام چنین محاسباتی است. این نرم‌افزار از روش‌های عددی پیشرفته و

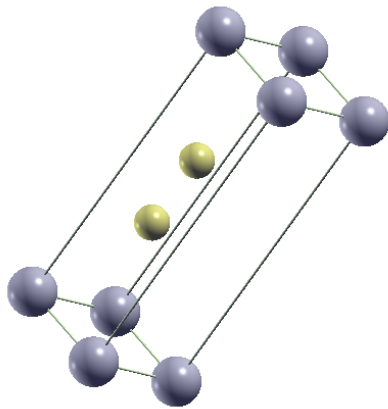
1. Band Structure

عهده‌دار مکاتبات: شاهین آتشبار تهرانی

نشانی: ایران، تهران پژوهشگاه دانش‌های بنیادی IPM پژوهشکده‌ی ذرات و شتابگرها، صندوق پستی: تلفن ۰۲۱۲۲۸۰۹۵۰

پیام‌نگار: atashbar@ipm.ir

کوانتومی قابل دسترس برای الکترون‌ها در سطوح انرژی مختلف را نشان می‌دهد. برای نیمه‌هادی MoS_2 ، محاسبه‌ی چگالی حالت‌ها نه تنها اطلاعاتی درباره‌ی گاف انرژی و موقعیت نوارهای ظرفیت و رسانش ارائه می‌دهد، بلکه بینشی درباره‌ی تأثیر اوربیتال‌های اتمی و آثار اسپین-اوربیتال (SOC) بر ساختار الکترونیکی ماده نیز فراهم می‌کند. در این مطالعه، از نرم‌افزار کوانتوم اسپرسو برای محاسبه‌ی چگالی حالت‌های MoS_2 در حالت‌های تک‌لایه و چندلایه استفاده شده است.



شکل ۱. شکل بلوری مولیبدون دی‌سولفید

۲-۱- روش‌شناسی محاسبات

محاسبات مبتنی بر تئوری تابعی چگالی (DFT) با استفاده از تقریب شیب تعمیم‌یافته (GGA) انجام شده‌اند. برای افزایش دقت محاسبات، آثار اسپین-اوربیتال نیز در نظر گرفته شده‌اند. شبکه‌های بریلوئن با دقت بالا و مش‌های k -فضای بهینه‌شده برای اطمینان از همگرایی نتایج استفاده شده‌اند. همچنین، از پتانسیل‌های شبه‌نرم^۱ برای توصیف برهم‌کنش بین الکترون‌ها و یون‌ها استفاده شده است.

۲-۲- نتایج چگالی حالت‌ها

نتایج محاسبات چگالی حالت‌ها برای MoS_2 نشان می‌دهند که این ماده در حالت تک‌لایه دارای یک گاف انرژی مستقیم ($\sim 1/8$ الکترون‌ولت) در نقطه‌ی K صفحه‌ی بریلوئن است. این گاف انرژی با افزایش تعداد لایه‌ها به حالت غیرمستقیم تغییر می‌کند که نشان‌دهنده‌ی وابستگی شدید خواص الکترونیکی MoS_2 به ضخامت لایه است. چگالی حالت‌ها در نوارهای ظرفیت و رسانش MoS_2 نشان‌دهنده‌ی حضور قله‌های

به دلیل ساختار لایه‌ای منحصربه‌فرد و خواص الکترونیکی، اپتوالکترونیکی و مکانیکی ویژه‌ای که از خود نشان می‌دهد، به یکی از گزینه‌های اصلی برای کاربرد در دستگاه‌های پیشرفته‌ای مانند ترانزیستورهای اثر میدانی (FETs) (Yoon et al., 2011)، حسگرها، سلول‌های خورشیدی (Feng et al., 2012) و حتی کاتالیزورها تبدیل شده است. اسپین-مولیبدن دی‌سولفید (MoS_2) در حالت تک‌لایه دارای یک گاف انرژی مستقیم ($\sim 1/8$ الکترون‌ولت) است که آن را برای کاربردهای اپتوالکترونیکی مانند دیودهای نشر نور (LEDs) و فوتودکتورها ایدئال می‌کند (Fortin & Sears, 1982). از سوی دیگر، در حالت چندلایه، این ماده دارای گاف انرژی غیرمستقیم (Mak et al., 2010; Lu et al., 2012; Pan & Zhang, 2012) است که رفتار الکترونیکی متفاوتی را ایجاد می‌کند و امکان استفاده از آن در کاربردهای گوناگون را فراهم می‌سازد (Novoselov et al., 2005; Joensen et al., 2011; Coleman et al., 1986).

اوربیتال، استفاده شده است. این محاسبات به ما امکان می‌دهند تا رفتار الکترونیکی این ماده را در حالت‌های تک‌لایه و چندلایه تحلیل و تأثیر پارامترهای مختلف مانند ضخامت لایه و آثار اسپین-اوربیتال را بر خواص آن بررسی کنیم. نتایج این مطالعه می‌تواند بینش‌های ارزشمندی را برای طراحی و بهینه‌سازی دستگاه‌های نانوالکترونیکی و اپتوالکترونیکی مبتنی بر MoS_2 ارائه دهد.

هدف اصلی این تحقیق، ارائه‌ی تحلیلی جامع و دقیق از خواص الکترونیکی MoS_2 با استفاده از روش‌های محاسباتی پیشرفته است. این تحلیل نه تنها به درک بهتر فیزیک بنیادی این ماده کمک می‌کند، بلکه راه‌هایی را برای بهبود عملکرد دستگاه‌های مبتنی بر MoS_2 در کاربردهای عملی پیشنهاد می‌دهد. با توجه به پتانسیل بالای MoS_2 در فناوری‌های نوین، این مطالعه می‌تواند گامی مهم در جهت توسعه‌ی نسل بعدی دستگاه‌های نانوالکترونیکی و اپتوالکترونیکی باشد.

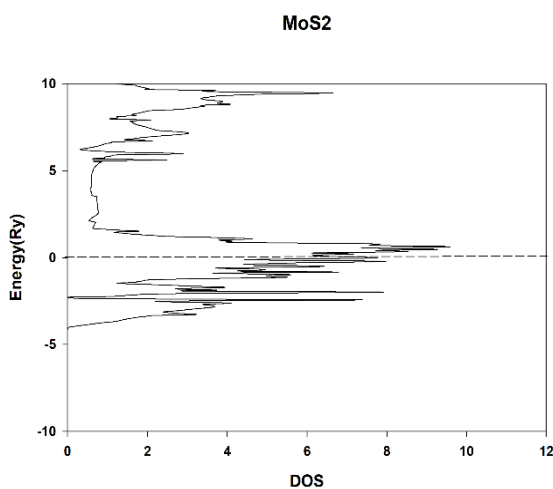
۲- چگالی حالت‌ها (Density of States - DOS)

برای مولیبدن دی‌سولفید (MoS_2) توسعه یافته

چگالی حالت‌ها (DOS) یکی از ابزارهای اساسی در مطالعه‌ی خواص الکترونیکی مواد است که توزیع حالت‌های

یا ترانزیستورهای با کارایی بهبودیافته استفاده شوند. همچنین، تأثیر آثار اسپین-اوربیتال بر گاف انرژی و ساختار نواری MoS_2 می‌تواند در طراحی دستگاه‌های اسپینترونیکی مفید باشد.

در نهایت، این مطالعه نشان می‌دهد که MoS_2 ، به دلیل خواص الکترونیکی منحصر به فرد و قابلیت تنظیم گاف انرژی، پتانسیل بالایی برای کاربرد در فناوری‌های نوین دارد. محاسبات دقیق چگالی حالت‌ها با استفاده از کوانتوم اسپرسو ابزاری قدرتمند برای پیش‌بینی و بهینه‌سازی این خواص به منظور کاربردهای عملی فراهم می‌کند. در شکل ۲، چگالی حالات بلور سولفید مولیبدون مشخص شده است.



شکل ۲. چگالی حالات نیمه‌هادی مولیبدون سولفید

انرژی قطع در DOS مشخص شده است و مقدار آن برای $\text{ecutrho}=400$ و $\text{ecutwfc}=50$ همچنین این مقادیر در فایل‌های SCF، FermiSurface، DOS، PDOS، BAND، scf-relax همین مقدار است. نوع پتانسیل استفاده شده در این محاسبات عبارت هستند از:

Mo Mo.rel-pbesol-spn-kjpaw_psl.1.0.0.UPF

S S.rel-pbesol-n-kjpaw_psl.0.1.UPF

و مش بندی k بسته به نوع آنالیز انتخابی متفاوت است. برای مثال، برای SFC این مش بندی به صورت $1 \times 1 \times 1$ است و در سطح فرمی $16 \times 16 \times 16$ است و بسته به نوع آنالیز این مقدار متفاوت است.

در شکل ۲، انرژی فرمی از انرژی DOS کم شده است، در نتیجه انرژی فرمی آن در صفر قرار می‌گیرد که در شکل نشان داده شده است. در شکل ۲، چگالی حالات کل مولیبدون دی‌سولفید را بین انرژی -10 تا انرژی 10 ری‌دبرگ نشان می‌دهد.

تیز در انرژی‌های خاص است که مربوط به اوربیتال‌های d مولیبدن (به ویژه اوربیتال‌های d_{xy} و d_{z^2}) و اوربیتال‌های p گوگرد است. این قله‌ها نشان‌دهنده تراکم بالای حالت‌های الکترونیکی در این انرژی‌ها هستند و نقش مهمی در تعیین خواص انتقال بار و اپتوالکترونیکی MoS_2 ایفا می‌کنند.

۲-۳- آثار اسپین-اوربیتال

آثار اسپین-اوربیتال (SOC) تأثیر قابل توجهی بر ساختار الکترونیکی MoS_2 دارد. این آثار به شکافتگی در نواری انرژی، به ویژه در ناحیه‌های نزدیک به نقطه K صفحه Brillouin منجر می‌شوند. شکافتگی اسپین-اوربیتال در چگالی حالت‌ها به وضوح قابل مشاهده است و نشان‌دهنده تقسیم نواری انرژی به زیرنواری با اسپین‌های متفاوت است. این شکافتگی در حالت تک‌لایه MoS_2 بیشتر مشهود است و با افزایش تعداد لایه‌ها کاهش می‌یابد. این پدیده نه تنها بر گاف انرژی تأثیر می‌گذارد، بلکه بر خواص انتقالی و اپتوالکترونیکی MoS_2 نیز تأثیرگذار است. در شکل ۱، ساختار بلوری سولفید مولیبدون مشخص شده است.

۲-۴- مقایسه‌ی حالت تک‌لایه و چندلایه

در حالت تک‌لایه، چگالی حالت‌ها نشان‌دهنده یک گاف انرژی مستقیم با توزیع حالت‌های الکترونیکی متمرکز در نواری ظرفیت و رسانش است، در حالی که در حالت چندلایه گاف انرژی غیرمستقیم است و توزیع حالت‌های الکترونیکی گسترده‌تر می‌شود. این تغییرات نشان می‌دهند که وابستگی خواص الکترونیکی MoS_2 به ضخامت لایه است و اهمیت کنترل دقیق تعداد لایه‌ها را در کاربردهای عملی برجسته می‌کند.

انرژی نوار غدقن برای حالت چندلایه 0.189 الکترون‌ولت است و برای حالت تک‌لایه $1/8$ الکترون‌ولت است و مقدار حالت تجربی به دست آمده آن $1/8$ الکترون‌ولت است (Mak et al., 2010).

۲-۵- کاربردهای عملی

تحلیل چگالی حالت‌ها نه تنها به درک بهتر فیزیک بنیادی MoS_2 کمک می‌کند، بلکه اطلاعات ارزشمندی برای طراحی و بهینه‌سازی دستگاه‌های نانوالکترونیکی و اپتوالکترونیکی مبتنی بر این ماده ارائه می‌دهد. برای مثال، قله‌های تیز در چگالی حالت‌ها می‌توانند در طراحی حسگرهای نوری با حساسیت بالا

dz2dz2 مولیدن و pzpز گوگرد در نوار ظرفیت تحت تأثیر SOC به زیرنوارهای اسپین-بالا و اسپین-پایین تقسیم می‌شوند.

۳-۳- مقایسه‌ی حالت تک‌لایه و چندلایه

در حالت تک‌لایه MoS₂، PDOS نشان‌دهنده‌ی یک گاف انرژی مستقیم با مشارکت قوی اوربیتال‌های d مولیدن و p گوگرد در نوارهای ظرفیت و رسانش است، درحالی‌که در حالت چندلایه گاف انرژی غیرمستقیم می‌شود و توزیع حالت‌های الکترونیکی گسترده‌تر می‌شود. این تغییرات نشان‌دهنده‌ی وابستگی خواص الکترونیکی MoS₂ به ضخامت لایه است و اهمیت کنترل دقیق تعداد لایه‌ها را در کاربردهای عملی برجسته می‌کند.

۳-۴- کاربردهای عملی

تحلیل PDOS نه‌تنها به درک بهتر فیزیک بنیادی MoS₂ کمک می‌کند، بلکه اطلاعات ارزشمندی برای طراحی و بهینه‌سازی دستگاه‌های نانو الکترونیکی و اپتوالکترونیکی مبتنی بر این ماده ارائه می‌دهد. برای مثال، مشارکت قوی اوربیتال‌های d مولیدن در نوار رسانش می‌تواند در طراحی ترانزیستورهای با کارایی بهبودیافته استفاده شود.

همچنین، تأثیر آثار اسپین-اوربیتال بر PDOS می‌تواند در طراحی دستگاه‌های اسپینترونیک مفید باشد. درنهایت، این مطالعه نشان می‌دهد که MoS₂، به دلیل خواص الکترونیکی منحصر به فرد و قابلیت تنظیم گاف انرژی، پتانسیل بالایی برای کاربرد در فناوری‌های نوین دارد. محاسبات دقیق PDOS با استفاده از کوانتوم اسپرسو ابزاری قدرتمند برای پیش‌بینی و بهینه‌سازی این خواص به منظور کاربردهای عملی فراهم می‌کند. در شکل ۳، چگالی حالات جزئی سولفید مولیدون مشخص شده است.

در شکل ۳، انرژی فرمی از انرژی PDOS کم شده است، در نتیجه مقدار انرژی فرمی در صفر قرار گرفته است. در شکل ۳، لایه‌های اربیتالی مولیدن را برای اربیتال d از انرژی ۱۰- تا انرژی ۱۰ ریدبرگ مشخص می‌کند. همان‌طور که از ساختار نوار انرژی مشخص است. نوارهای انرژی از حدود ۴- تا ۴ الکترون‌ولت تغییرات دارند که همین تغییرات در شکل ۳ برای PDOS مشاهده می‌شود.

۳- چگالی حالت‌های جزئی (Partial Density of

States - PDOS) برای مولیدن‌دی سولفید (MoS₂)

چگالی حالت‌های جزئی (PDOS) ابزاری کلیدی برای درک سهم اوربیتال‌های اتمی مختلف در ساختار الکترونیکی یک ماده است. درباره‌ی نیمه‌هادی MoS₂، محاسبه‌ی PDOS به ما امکان می‌دهد تا سهم اوربیتال‌های اتمی مولیدن (Mo) و گوگرد (S) را در نوارهای ظرفیت و رسانش تحلیل کنیم. این تحلیل برای درک دقیق‌تر خواص الکترونیکی، انتقال بار و آثار اسپین-اوربیتال (SOC) در MoS₂ ضروری است. در این مطالعه، از نرم‌افزار کوانتوم اسپرسو برای محاسبه‌ی PDOS MoS₂ استفاده شده است.

۳-۱- روش‌شناسی محاسبات

محاسبات مبتنی بر تئوری تابعی چگالی (DFT) با استفاده از تقریب شیب تعمیم‌یافته (GGA) انجام شده‌اند. شبکه‌های بریلوئن با دقت بالا و مش‌های k-فضای بهینه‌شده برای اطمینان از همگرایی نتایج به کار گرفته شده‌اند.

۳-۲- نتایج PDOS برای MoS₂

نتایج PDOS نشان می‌دهند که اوربیتال‌های d مولیدن (به‌ویژه اوربیتال‌های dz2dz2، dxxy، و dx2-y2dx2-y2) و اوربیتال‌های p گوگرد (به‌ویژه pxpx، pypy، و pzpز) سهم عمده‌ای در ساختار الکترونیکی MoS₂ دارند. در نوار ظرفیت، اوربیتال‌های pzpز گوگرد و اوربیتال‌های dz2dz2 مولیدن بیشترین مشارکت را دارند. این اوربیتال‌ها نقش کلیدی در تشکیل پیوندهای کووالانسی بین Mo و S ایفا می‌کنند. در نوار رسانش، اوربیتال‌های dxxy و dx2-y2dx2-y2 مولیدن سهم غالب دارند که نشان‌دهنده‌ی نقش مهم این اوربیتال‌ها در انتقال بار و خواص الکترونیکی MoS₂ است.

آثار اسپین-اوربیتال تأثیر چشمگیری بر PDOS، MoS₂ دارد. این آثار به شکافتگی در نوارهای انرژی، به‌ویژه در اوربیتال‌های d مولیدن، منجر می‌شوند. شکافتگی اسپین-اوربیتال در PDOS به‌وضوح در ناحیه‌های نزدیک به نقطه‌ی K صفحه‌ی بریلوئن مشاهده می‌شود. این شکافتگی نه‌تنها بر گاف انرژی تأثیر می‌گذارد، بلکه بر توزیع حالت‌های الکترونیکی در نوارهای ظرفیت و رسانش نیز تأثیرگذار است. برای مثال، اوربیتال‌های

حداکثر انرژی نوار ظرفیت در نقطه Γ قرار دارد که نشان‌دهنده گاف انرژی غیرمستقیم است. این تغییرات نشان‌دهنده وابستگی شدید خواص الکترونیکی MoS_2 به ضخامت لایه است.

۴-۳- آثار اسپین-اوربیتال (SOC)

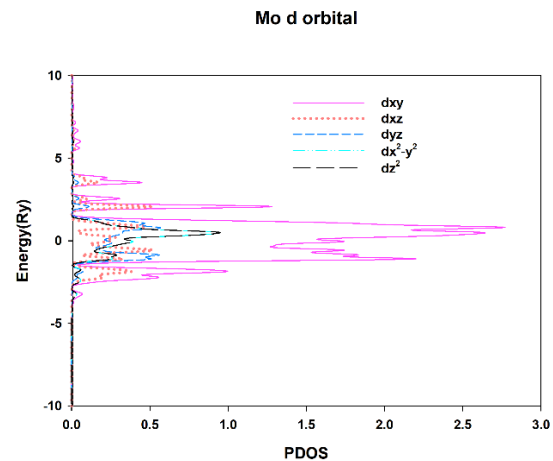
آثار اسپین-اوربیتال تأثیر چشمگیری بر ساختار نواری MoS_2 دارد. این آثار به شکافتگی در نوارهای انرژی، به‌ویژه در ناحیه‌های نزدیک به نقطه K صفحه K بریلوئن، منجر می‌شوند. شکافتگی اسپین-اوربیتال در ساختار نواری به‌وضوح قابل مشاهده است و نشان‌دهنده تقسیم نوارهای انرژی به زیرنوارهای با اسپین‌های متفاوت است. این شکافتگی در حالت تک‌لایه MoS_2 بیشتر مشهود است و با افزایش تعداد لایه‌ها کاهش می‌یابد. این پدیده نه تنها بر گاف انرژی تأثیر می‌گذارد، بلکه بر خواص انتقالی و اپتوالکترونیکی MoS_2 نیز تأثیرگذار است.

۴-۴- مقایسه‌ی حالت تک‌لایه و چندلایه

در حالت تک‌لایه، ساختار نواری نشان‌دهنده گاف انرژی مستقیم با حداقل انرژی نوار رسانش و حداکثر انرژی نوار ظرفیت در نقطه K است، در حالی که در حالت چندلایه گاف انرژی غیرمستقیم است و حداقل انرژی نوار رسانش در نقطه K و حداکثر انرژی نوار ظرفیت در نقطه Γ قرار دارد. این تغییرات نشان‌دهنده وابستگی خواص الکترونیکی MoS_2 به ضخامت لایه است و اهمیت کنترل دقیق تعداد لایه‌ها را در کاربردهای عملی برجسته می‌کند.

۴-۵- کاربردهای عملی

تحلیل ساختار نواری نه تنها به درک بهتر فیزیک بنیادی MoS_2 کمک می‌کند، بلکه اطلاعات ارزشمندی برای طراحی و بهینه‌سازی دستگاه‌های نانو الکترونیکی و اپتوالکترونیکی مبتنی بر این ماده ارائه می‌دهد. برای مثال، یک گاف انرژی مستقیم در حالت تک‌لایه MoS_2 آن را به گزینه‌ای ایدئال برای کاربردهای اپتوالکترونیکی مانند دیودهای نشر نور (LEDs) و فوتودتکتورها تبدیل می‌کند. همچنین، تأثیر آثار اسپین-اوربیتال بر ساختار نواری می‌تواند در طراحی دستگاه‌های اسپینترونیک مفید باشد. در نهایت، این مطالعه نشان می‌دهد که MoS_2 ، به دلیل خواص الکترونیکی منحصر به فرد و قابلیت تنظیم گاف انرژی، پتانسیل



شکل ۳. چگالی حالات جزئی مولیبدون سولفید

۴-۴- ساختار نواری نیمه‌هادی مولیبدن دی‌سولفید

(MoS_2) برای محاسبات کوانتوم اسپرسو

ساختار نواری یکی از مهم‌ترین ویژگی‌های الکترونیکی مواد است که اطلاعاتی کلیدی درباره رفتار الکترون‌ها در نوارهای ظرفیت و رسانش ارائه می‌دهد. برای نیمه‌هادی MoS_2 ، محاسبه ساختار نواری به درک گاف انرژی، موقعیت نوارها و تأثیر آثار اسپین-اوربیتال (SOC) بر خواص الکترونیکی کمک می‌کند. در این مطالعه، از نرم‌افزار کوانتوم اسپرسو برای محاسبه ساختار نواری MoS_2 در حالت‌های تک‌لایه و چندلایه استفاده شده است.

۴-۱- روش‌شناسی محاسبات

خطای سینماتیک از $\text{GGA-PBE / HSE06 / GW}$ استفاده می‌شود و ما در این محاسبات چون از نیمه‌هادی استفاده کرده‌ایم از GGA برای محاسبه خطای سینماتیک استفاده کرده‌ایم. محاسبات مبتنی بر تئوری تابعی چگالی (DFT) با استفاده از تقریب شیب تعمیم‌یافته (GGA) انجام شده‌اند. شبکه‌های بریلوئن با دقت بالا و مسیرهای k -فضای بهینه‌شده (مانند مسیر Γ -K-M- Γ) برای محاسبه ساختار نواری انتخاب شده‌اند.

۴-۲- نتایج ساختار نواری برای MoS_2

نتایج محاسبات ساختار نواری نشان می‌دهند که MoS_2 در حالت تک‌لایه دارای یک گاف انرژی مستقیم (~ 1.8 eV) الکترون‌ولت) در نقطه K صفحه K بریلوئن است. این گاف انرژی با افزایش تعداد لایه‌ها به حالت غیرمستقیم تغییر می‌کند. در حالت چندلایه، حداقل انرژی نوار رسانش در نقطه K و

الکترونیکی است. مرحله‌ی رسیدن به گاف انرژی حل‌شده‌ی فایل‌ها آماده‌سازی شده است که در ابتدا فایل ورودی بلور را ایجاد می‌کند. در مرحله‌ی بعد، فایل SCF و بعد از آن فایل relax-SCF و سپس فایل Band است که از روی آن می‌توان انرژی‌ها را خواند. سپس، مقدار انرژی گاف ممنوعه را به دست آورد. مقادیر به‌دست‌آمده با مقاله مطابقت دارد (Ahmadi & Mukherjee, 2014). آثار کرنش یا نقص ساختار یا دوپینگ در این پژوهش بررسی نشده و در پژوهش‌های بعدی این آثار در نظر گرفته خواهد شد. هیچ فرض خاصی درباره‌ی شرایط غیرتعادلی یا حالت ذوب‌شده در محاسبه‌ی سطح فرمی اعمال نشده است.

۵-۳- آثار اسپین-اوربیتال (SOC)

آثار اسپین-اوربیتال تأثیر چشمگیری بر سطح فرمی MoS_2 دارد. این آثار به شکافتگی در نوارهای انرژی، به‌ویژه در ناحیه‌های نزدیک به نقطه‌ی K صفحه‌ی بریلوئن، منجر می‌شوند. شکافتگی اسپین-اوربیتال در سطح فرمی به‌وضوح قابل مشاهده است و نشان‌دهنده‌ی تقسیم نوارهای انرژی به زیرنوارهای با اسپین‌های متفاوت است. این شکافتگی در حالت تک‌لایه MoS_2 بیشتر مشهود است و با افزایش تعداد لایه‌ها کاهش می‌یابد. این پدیده نه تنها بر گاف انرژی تأثیر می‌گذارد، بلکه بر خواص انتقالی و اپتوالکترونیکی MoS_2 نیز تأثیرگذار است.

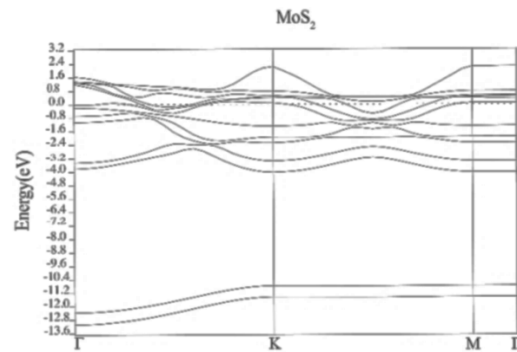
۵-۴- مقایسه‌ی حالت تک‌لایه و چندلایه

در حالت تک‌لایه، سطح فرمی نشان‌دهنده‌ی یک گاف انرژی مستقیم با حضور الکترون‌ها و حفره‌ها در انرژی فرمی است، درحالی‌که در حالت چندلایه سطح فرمی گسترده‌تر می‌شود و نشان‌دهنده‌ی تغییرات در توزیع حالت‌های الکترونیکی است. این تغییرات نشان می‌دهند که وابستگی خواص الکترونیکی MoS_2 به ضخامت لایه است و اهمیت کنترل دقیق تعداد لایه‌ها را در کاربردهای عملی برجسته می‌کند.

۵-۵- کاربردهای عملی

تحلیل سطح فرمی نه تنها به درک بهتر فیزیک بنیادی MoS_2 کمک می‌کند، بلکه اطلاعات ارزشمندی برای طراحی و بهینه‌سازی دستگاه‌های نانوالکترونیکی و اپتوالکترونیکی مبتنی بر این ماده ارائه می‌دهد. برای مثال، سطح فرمی در شکل ۵، برای بلور سولفید مولیبدون مشخص شده است.

بالایی برای کاربرد در فناوری‌های نوین دارد. محاسبات دقیق ساختار نواری با استفاده از کوانتوم اسپرسو ابزاری قدرتمند برای پیش‌بینی و بهینه‌سازی این خواص به‌منظور کاربردهای عملی فراهم می‌کند. در شکل ۴، ساختار نواری بلور سولفید مولیبدون مشخص شده است.



شکل ۴. ساختار نواری نیمه‌هادی سولفید مولیبدون

۵-۵- محاسبه سطح فرمی نیمه‌هادی مولیبدن

دی سولفید (MoS_2) برای محاسبات کوانتوم اسپرسو

سطح فرمی یکی از مفاهیم کلیدی در فیزیک حالت جامد است که نشان‌دهنده‌ی مجموعه‌ای از حالت‌های الکترونیکی در فضای k است که در انرژی فرمی (E_F) قرار دارند. برای نیمه‌هادی‌ها مانند MoS_2 ، سطح فرمی اطلاعات مهمی درباره‌ی رفتار الکترون‌ها در نوارهای ظرفیت و رسانش ارائه می‌دهد. در این مطالعه، از نرم‌افزار کوانتوم اسپرسو برای محاسبه‌ی سطح فرمی MoS_2 استفاده شده است.

۵-۱- روش‌شناسی محاسبات

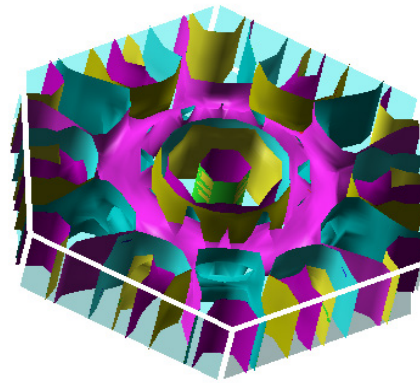
شبکه‌های بریلوئن با دقت بالا و مش‌های k -فضای بهینه‌شده برای اطمینان از همگرایی نتایج به کار گرفته شده‌اند.

۵-۲- نتایج سطح فرمی برای MoS_2

نتایج محاسبات سطح فرمی نشان می‌دهند که MoS_2 در حالت تک‌لایه دارای یک گاف انرژی مستقیم (~ 1.8 eV) الکترون‌ولت) در نقطه‌ی K صفحه‌ی بریلوئن است. این گاف انرژی با افزایش تعداد لایه‌ها به حالت غیرمستقیم تغییر می‌کند. در حالت تک‌لایه، سطح فرمی در نوار ظرفیت و رسانش به‌وضوح قابل مشاهده است و نشان‌دهنده‌ی حضور الکترون‌ها و حفره‌ها در انرژی فرمی است. در حالت چندلایه، سطح فرمی گسترده‌تر می‌شود و نشان‌دهنده‌ی تغییرات در توزیع حالت‌های

مراجع

1. Atashbar Tehrani, S., & Morshedian, N. (2025). Density of States and Electronic Structure of InSb with QUANTUM ESPRESSO Computational Approach. *Journal of Advance Materials and Technologies*, 31, 75-81. [In Persian]. <https://doi.org/10.30501/jamt.2025.485779.1309>
2. Ahmadi, S., & Mukherjee, S. (2014). A Comparative Study of Electronic Properties of Bulk MoS₂ and Its Monolayer Using DFT Technique: Application of Mechanical Strain on MoS₂ Monolayer. *Graphene*, 3, 52-59. <http://dx.doi.org/10.4236/graphene.2014.34008>
3. Coleman, J. N., Lotya, M., O'Neill, A., Bergin, S. D., King, P. J., Khan, U., Young, K., ..., & Nicolosi, V. (2011). Two-Dimensional Nanosheets Produced by Liquid Exfoliation of Layered Materials. *Science*, 331(6017), 568-571. <http://dx.doi.org/10.1126/science.1194975>
4. Feng, J., Qian, X., Huang, C., & Li, J. (2012). Strain Engineered Artificial Atom as a Broad Spectrum Solar Energy Funnel. *Nature Photonics*, 6(12), 866-872. <http://dx.doi.org/10.1038/nphoton.2012.285>
5. Fortin, E., & Sears, W. (1982). Photovoltaics Effect and Optical Absorption in MoS₂. *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, 43(9), 881-884. [http://dx.doi.org/10.1016/0022-3697\(82\)90037-3](http://dx.doi.org/10.1016/0022-3697(82)90037-3)
6. Giannozzi, P., Baroni, S., Bonini, N., Calandra, M., Car, R., Cavazzoni, C., Ceresoli, D., Chiarotti, G. L., ..., & Wentzcovitch, R. M. (2009). QUANTUM ESPRESSO: A Modular and Open Source Software Project for Quantum Simulations of Materials. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 21(39), 395502. <http://dx.doi.org/10.1088/0953-8984/21/39/395502>
7. Joensen, P., Frindt, R., & Morrison, S. (1986). Single Layer MoS₂. *Materials Research Bulletin*, 21(4), 457. [http://dx.doi.org/10.1016/0025-5408\(86\)90011-5](http://dx.doi.org/10.1016/0025-5408(86)90011-5)
8. Lu, P., Wu, X., Guo, W., & Zeng, X. C. (2012). Strain Dependent Electronic and Magnetic Properties of MoS₂ Monolayer, Bilayer, Nanoribbons and Nanotubes. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 14(37), 13035-13040. <http://dx.doi.org/10.1039/c2cp42181j>
9. Mak, K. F., Lee, C., Hone, J., Shan, J., & Heinz, T. F. (2010). Atomically Thin MoS₂: A New Direct Gap Semiconductor. *Physical Review Letter*, 105(13), 136805. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.105.136805>
10. Novoselov, K., Jiang, D., Schedlin, F., Booth, T., Khotkevich, V., Morozov, S., & Geim, A. (2005). Two Dimensional Atomic Crystals. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, 102(30), 10451-10453. <https://doi.org/10.1073/pnas.0502848102>
11. Pan, H., & Zhang, Y. W. (2012). Tuning the Electronic and Magnetic Properties of MoS₂ Nanoribbons by Strain Engineering. *Journal of Physical Chemistry C*, 116(21), 11752-11757. <http://dx.doi.org/10.1021/jp3015782>
12. Yoon, Y., Ganapathi, K., & Salahuddin, S. (2011). How Good Can Monolayer MoS₂ Transistors Be? *Nano Letters*, 11(19), 3768-3773. <http://dx.doi.org/10.1021/nl2018178>



شکل ۵. سطح فرمی نیمه‌هادی سولفید مولیبدون

۶- نتیجه‌گیری

در این مطالعه، خواص الکترونیکی و ساختاری نیمه‌هادی مولیبدن دیسولفید (MoS₂) با استفاده از نرم‌افزار کوانتوم اسپرسو و روش‌های مبتنی بر تئوری تابعی چگالی (DFT) بررسی شد. نتایج نشان دادند که MoS₂ در حالت تک‌لایه دارای گاف انرژی مستقیم ($\sim 1/8$ الکترون‌ولت) است، درحالی‌که در حالت چندلایه گاف انرژی به حالت غیرمستقیم تغییر می‌کند. اوربیتال‌های d مولیبدن و p گوگرد سهم اصلی را در ساختار الکترونیکی MoS₂ دارند و آثار اسپین-اوربیتال (SOC) به شکافتگی در نوارهای انرژی منجر می‌شود. سطح فرمی MoS₂ نیز وابستگی شدیدی به ضخامت لایه و آثار SOC نشان می‌دهد. این یافته‌ها نشان می‌دهند که MoS₂، به دلیل گاف انرژی قابل تنظیم و خواص الکترونیکی منحصربه‌فرد، پتانسیل بالایی برای کاربرد در دستگاه‌های نانوالکترونیکی، اپتوالکترونیکی و اسپینترونیکی دارد. محاسبات انجام‌شده با کوانتوم اسپرسو ابزاری قدرتمند برای طراحی و بهینه‌سازی دستگاه‌های مبتنی بر MoS₂ فراهم می‌کند.

۷- سپاسگزاری

این پژوهش با پشتیبانی مرکز فیزیک نظری انجام شده است و نویسندگان مقاله کمال تشکر را از این مرکز ابراز می‌دارند.