

# DFT моделирование спектров КРС монослойных дихалькогенидов молибдена со структурой типа «Янус»

А.С. Орешонков<sup>1,2</sup>, Е.В. Суханова<sup>1</sup>, З.И. Попов<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Институт биохимической физики им. Н. М. Эмануэля РАН, Москва, 119334, Косыгина, 4

<sup>2</sup> Институт физики им. Л.В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук – обособленное подразделение ФИЦ КИЦ СО РАН, Красноярск, 660036, Академгородок, 50/38

тел.: +7 (391) 249-4510, эл. почта: oreshonkov@iph.krasn.ru

DOI 10.34077/SCATTERING95-58

Согласно актуальным статистическим данным [1], в 2021 году на ископаемые виды топлива приходилось 82% от всего количества потребления первичных энергоресурсов, в 2019 году – 83%, а пять лет назад – 85%. В тоже время, по мере восстановления экономической активности после карантина и других мер, связанных с COVID-19, потребление энергии резко возросло. Одновременно с этим выросли (приблизительно на 5.7 – 5.9 %) выбросы углекислого газа. В качестве низкоуглеродных источников энергии и технологий, используемых для снижения углеродного следа, сейчас можно выделить: ветровую и солнечную энергию; биотопливо; водородное топливо; CCUS (Carbon capture, utilisation and storage) – улавливание, использование и хранение углерода. В начале 1970-х, Fujishima и Honda [2] сообщили о фотоэлектрохимическом разложении воды на фотоанод из оксида титана. Эффект Хонды-Фудзисимы продемонстрировал потенциал полупроводниковых материалов для преобразования энергии света в химическую энергию для последующего разложения молекул воды.

В настоящее время наблюдается стремительный рост числа исследований наноразмерных полупроводниковых материалов с «Янус» структурой [3] являющихся перспективными для фотокаталитического расщепления воды. Главная особенность таких монослойных структур – наличие двух неэквивалентных поверхностей. В данной работе представлены результаты DFT моделирования спектров комбинационного рассеяния света как графеноподобных (1H, 1T) монослойных дихалькогенидов молибдена со структурой типа «Янус», так и результаты моделирования спектров его 1H', 1T', 1A' и Шеврелеподобных модификаций, см. рисунок 1.

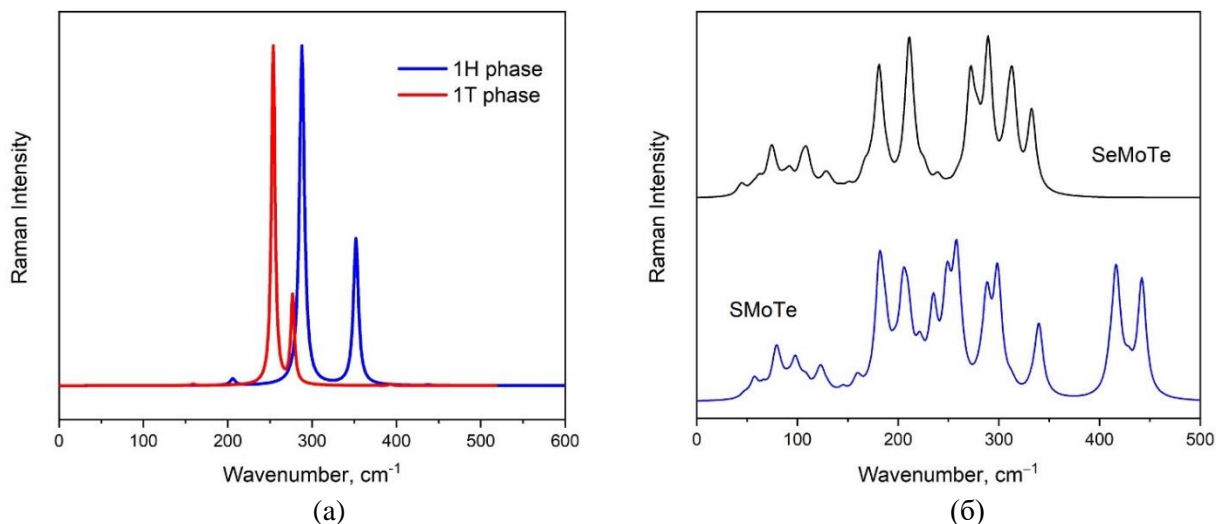


Рис. 1. Расчётные спектры КРС для 1H и 1T фаз SMoSe (а), для 1A' фазы SeMoTe и SMoTe (б).

Исследование выполнено в рамках поддержанного проекта РНФ №21-73-20183. Ссылка на информацию о проекте: <https://rscf.ru/project/21-73-20183>. Авторы благодарят межведомственный суперкомпьютерный центр РАН за предоставленные вычислительные ресурсы.

## Литература

1. S. Dale. BP Statistical Review of World Energy 2022. London: BP p.l.c., 2022. 60 p.
2. A. Fujishima & K. Honda // Nature. 1972. Vol.238. P.37-38.
3. J. Zhang et.al. // ACS Nano. 2017. Vol.11, Is.8. P.8192-8198.