

Ru 掺杂对单层 MoS_2 电子结构、磁性与光学性质的影响*

逯美红^{1)†} 张凡¹⁾ 邸志玲²⁾

1) (长治学院物理系, 长治 046011)

2) (河北工程大学数理科学与工程学院, 邯郸 056038)

(2025 年 12 月 24 日收到; 2026 年 3 月 17 日收到修改稿)

基于第一性原理计算, 研究了本征单层 MoS_2 及不同浓度钌 (Ru) 掺杂 (替换 Mo/S 原子) 体系的电子结构、磁性及光学性质. 结果表明, 本征 MoS_2 为直接带隙半导体, 带隙为 1.724 eV. Ru 替换 Mo 时, 带隙随掺杂浓度升高而减小, 11.1% 浓度下闭合, 体系转变为弱磁性 n 型金属; Ru 替换 S 时, 带隙显著降低, 25% 浓度下发生金属性转变, 磁矩随浓度增大, 呈现自旋极化特征. 态密度显示, Ru-Mo 体系费米能级上移至导带; Ru-S 体系费米能级附近引入杂质能级, 降低电子跃迁能垒. 磁性分析表明, Ru-Mo 体系弱磁性源于载流子填充诱导的晶格极化, Ru-S 体系强磁性源于 Ru-4d 与 Mo-4d 强轨道耦合导致的自旋劈裂. 光学性质上, 掺杂均增强可见-近红外光吸收、削弱紫外吸收; Ru-Mo 体系低能区介电响应随浓度增大显著提升, 特征峰蓝移, 主要归因于自由载流子的 Drude 效应; Ru-S 体系介电响应较弱且特征峰红移, 源于自旋极化杂质能级对带间跃迁的作用. 本研究揭示了 Ru 掺杂位点与浓度对 MoS_2 光电性质的差异化影响, 为相关光电子器件的设计提供理论依据.

关键词: 单层 MoS_2 , 第一性原理, Ru 掺杂, 光学性质, 磁性性质

DOI: 10.7498/aps.75.20251754

CSTR: 32037.14.aps.75.20251754

1 引言

二维材料作为一种纳米材料体系, 因其在电学、光学、力学、吸附及催化等方面的优异性能, 引起了研究者的广泛关注^[1-4]. 随着研究的深入, 更多新型二维材料相继涌现, 例如氮化硼、磷烯、过渡金属氧化物及过渡金属硫族化合物等. 其中, 二维过渡金属硫族化合物 (two-dimensional transition metal dichalcogenides, 2D-TMDCs) 的通式为 MX_2 (M 为 Mo, W 等 VIB 族过渡金属元素; X 为 S, Se 等硫族元素), 因其优异的物理化学性质而受到广泛研究^[5-11]. 二硫化钼 (MoS_2) 是 TMDCs 家族中

的典型代表, 具有“三明治”层状结构, 每层由中间钼原子和上下两层硫原子构成, 层间通过范德瓦耳斯力结合, 因此易被剥离为薄层结构^[12]. 体相 MoS_2 是间接带隙半导体, 带隙约 1.29 eV; 而当减薄至单层时, 带隙增大至 1.90 eV, 并转变为直接带隙, 使其在光伏、发光二极管、光电探测器等领域颇具潜力^[13-15]. 近年来, 研究表明掺杂是调控 MoS_2 光电性能的有效手段^[16-19]. 钌 (Ru) 作为一种过渡金属, 具备独特的 $4d^75s^1$ 电子构型, 兼具良好催化活性与电子传输能力, 因此常被用于 MoS_2 的掺杂研究. 目前研究多集中于 Ru 原子替换 S 原子的掺杂方式. Du 和 Wu^[20] 通过第一性原理计算证实, Ru 掺杂单层 MoS_2 对 SO_2 气体表现出强吸

* 山西省科技重大专项计划“揭榜挂帅”项目 (批准号: 202201030201008) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: lmhxueer@126.com

附能力. Chen 和 Wan^[21] 的研究表明, Ru 掺杂可能提升 MoS₂ 的气敏性能, 为肺癌呼气检测传感器提供可能. Zhang 等^[22] 则发现 Ru 掺杂单层 MoS₂ 可有效地检测并清除 SF₆ 绝缘装置中的 SO₂, SOF₂ 等有害气体, 可用于电力设备安全监测领域. 这些成果虽初步证实了 Ru 掺杂对 MoS₂ 吸附与传感性能的调控作用, 但仍存在明显的局限: 掺杂位点单一, 几乎未探讨 Ru 替换 Mo 原子的情况; 对不同掺杂浓度的影响规律关注不足; 研究多聚焦于其对特定气体的吸附与传感性能, 对其光吸收、介电函数等光电特性的调控机制探讨较少, 难以满足光电子器件精准设计的理论需求.

为此, 本研究基于密度泛函理论 (DFT) 的第一性原理计算方法, 系统地研究本征单层 MoS₂ 及不同浓度 Ru 掺杂体系 (分别替换 Mo 原子与 S 原子) 的电子结构、磁性及光学特性. 通过分析能带结构、态密度、光学性质、差分电荷密度等, 揭示掺杂位点与浓度对单层 MoS₂ 光电性质的调控规律, 为相关光电子器件 (如太阳能电池、红外探测器等) 的设计与优化提供理论依据. 值得指出的是, 本研究采用 Ru 原子替位超晶胞中 Mo/S 原子的方式构建掺杂模型, 从晶体结构表征来看, 该操作形成了新的周期性有序结构, 与真实掺杂体系中杂质原子随机分布、无严格周期性的特征存在差异, 这是第一性原理计算领域研究掺杂效应的常用简化处理方法. 然而, 这种理想化模型能够清晰揭示掺杂原子本身及其在不同晶格格位引入后, 对宿主材

料电子结构本征性质的定性影响规律和物理机制.

2 模型构建与研究方法

本研究以单层 MoS₂ 为研究对象. 由于 MoS₂ 的 (001) 面具有非极性且稳定性高, 采用 Materials Studio 软件沿 (001) 面切割体相 MoS₂, 获得理想单层 MoS₂ 结构^[23]. 为消除层间相互作用的干扰, 沿单层 MoS₂ 的 *C* 轴方向设置 1.8 nm 真空层, 分别构建了 $4 \times 4 \times 1$, $3 \times 3 \times 1$, $2 \times 2 \times 1$ 三种单层超晶胞模型. 用一个 Ru 原子分别替换 $4 \times 4 \times 1$, $3 \times 3 \times 1$, $2 \times 2 \times 1$ 超胞结构中的一个 Mo 原子, 得到掺杂浓度分别为 6.25%, 11.1% 和 25% 的 Ru-Mo:MoS₂ 掺杂体系; 分别替换 $3 \times 3 \times 1$, $2 \times 2 \times 1$ 超胞结构中的一个和两个 S 原子, 得到掺杂浓度分别为 5.55%, 12.5% 和 25% 的 Ru-S:MoS₂ 掺杂体系. 对于每个掺杂浓度, 测试了具有不同初始对称性的构型, 并选取能量最低的构型进行后续分析, 如图 1 所示. 所有第一性原理计算均基于 Materials Studio 软件包中的 CASTEP 模块完成, 电子间的交换关联作用通过广义梯度近似 (GGA) 范畴下的 Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) 泛函进行描述^[24,25]. 具体参数设置如下: 三种超胞结构的布里渊区 *K* 点网格选分别取 $3 \times 3 \times 1$, $3 \times 3 \times 1$, $5 \times 5 \times 1$; 平面波截断能设为 500 eV; 能量收敛精度为 1×10^{-5} eV/atom, 原子间力和应力的阈值分别设为 0.05 eV/Å 和 0.1 GPa, 原子最大位移收

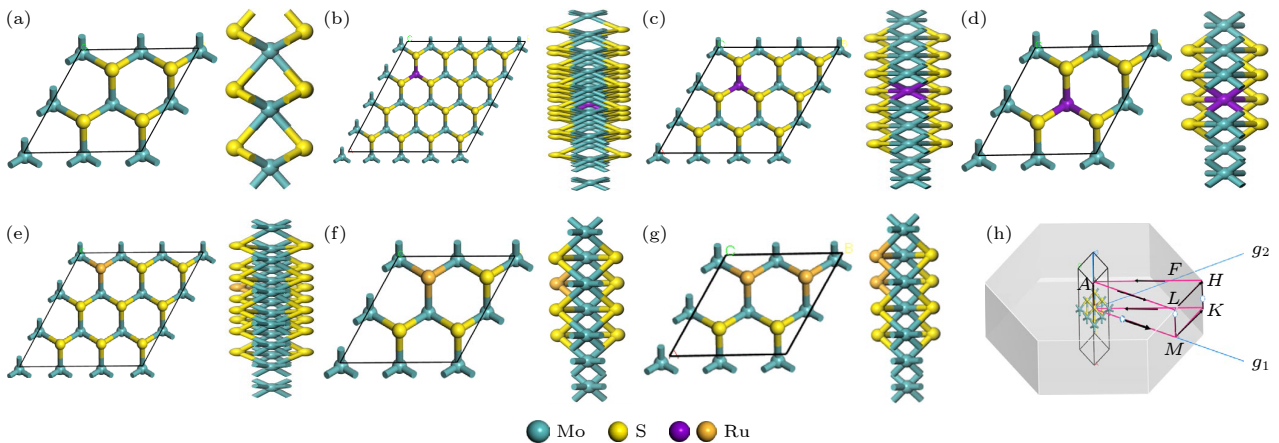


图 1 本征单层 MoS₂ 及掺杂 MoS₂ 的结构图 (a) 本征单层 MoS₂; (b) 6.25%Ru-Mo:MoS₂; (c) 11.1%Ru-Mo:MoS₂; (d) 25%Ru-Mo:MoS₂; (e) 5.55%Ru-S:MoS₂; (f) 12.5%Ru-S:MoS₂; (g) 25%Ru-S:MoS₂. (h) 布里渊区路径

Fig. 1. Structural diagrams of monolayer MoS₂ and doped MoS₂: (a) Intrinsic monolayer MoS₂; (b) 6.25%Ru-Mo:MoS₂; (c) 11.1%Ru-Mo:MoS₂; (d) 25%Ru-Mo:MoS₂; (e) 5.55%Ru-S:MoS₂; (f) 12.5%Ru-S:MoS₂; (g) 25%Ru-S:MoS₂. (h) The path of the Brillouin district.

收敛阈值为 0.001 Å, 布里渊区计算路径设定为 Γ - M - K - Γ - A - L - H - A | L - M | K - H , 所有计算均在自旋极化下进行. 此外, 文献 [26,27] 的理论研究证实, 自旋-轨道耦合 (SOC) 效应对 MoS₂ 体系费米能级附近导带与价带能级的影响可忽略不计, 因此本研究未考虑 SOC 效应.

3 结果与分析

3.1 结构与稳定性

为探究 Ru 掺杂对单层 MoS₂ 结构的影响, 对比分析了本征单层 MoS₂ 与不同浓度 Ru 替换 Mo 原子、S 原子掺杂体系的几何参数优化结果, 键长与键角数据如表 1 所列. 本征单层 MoS₂ 中, Mo—S 键长 $d_{\text{Mo—S}}$ 为 2.405 Å, Mo—S—Mo 键角 $\theta_{\text{Mo—S—Mo}}$ 为 82.305°, 其与李刚等 [23] 的理论计算结果相符. 在 Ru-Mo 体系中, 结构参数随掺杂浓度呈现规律性变化. 当掺杂浓度为 6.25% 时, S—Ru 键长 $d_{\text{S—Ru}}$ 为 2.360 Å, 较本征 Mo—S 键长显著缩短; 对应 Mo—S—Ru 键角 $\theta_{\text{Mo—S—Ru}}$ 为 79.932°, 较本征键角减小. 随掺杂浓度增加至 11.1%, $d_{\text{S—Ru}}$ 略增至 2.359 Å, 而 $\theta_{\text{Mo—S—Ru}}$ 则为 79.897°. 在 25% 掺杂浓度下, $d_{\text{S—Ru}}$ 为 2.362 Å, $\theta_{\text{Mo—S—Ru}}$ 为 83.359°, 仍分别处于缩短和增大的趋势范围内. 上述变化主要源于 Ru 原子共价半径 (1.25 Å) 小于 Mo 原子 (1.30 Å), 因此 Ru 替换 Mo 原子后, 形成的 S—Ru 键长应略短于本征体系的 Mo—S 键长. 而键长缩短后, 体系为维持结构稳定性, 键角随之呈现小幅增大趋势. 当 Ru 替换 S 原子时, 键长与键角的变化趋势与替换 Mo 原子时相反. 所有掺杂体系中, Mo—Ru 键长均大于本征体系的 Mo—S 键长, 且对应的 Mo—Ru—Mo 键角均小于本征体系的 Mo—S—Mo 键角. 这一现象同

样源于共价半径差异, Ru 原子共价半径 (1.25 Å) 大于被替换的 S 原子 (1.02 Å), 更大的共价半径使得 Mo—Ru 键长大于 Mo—S 键长, 键角则相应减小以适配原子空间排布.

为评价 Ru 掺杂 MoS₂ 体系的结构稳定性与制备可行性, 计算了不同掺杂浓度下的形成能. 形成能计算公式为 $E_{\text{form}} = E_{\text{doped}} - E_{\text{vac}} - E_{\text{Ru}}$, 其中, E_{doped} 为掺杂超胞的总能量, E_{vac} 为含有原子空位 (Mo 或 S) 的未掺杂超胞总能量, E_{Ru} 为单个 Ru 原子的能量. 该公式对应于将 Ru 原子嵌入晶格空位的掺杂过程, 能直观反映局域成键的强弱. $E < 0$ 说明该掺杂过程为放热反应, 掺杂后的结构比较稳定. 计算结果汇总于表 1. 结果表明, Ru-S 体系在所有浓度下形成能均为负值, 即使在 25% 高浓度下仍保持负值, 说明该掺杂体系热力学上普遍稳定. Ru-Mo 体系在低浓度下形成能为负值, 结构稳定; 但在 25% 高浓度时形成能转为正值, 表明该条件下结构不易自发形成. 需要说明的是, 本文采用 25% 高浓度模型, 并非对应实验常规掺杂比例, 而是为了更清晰地揭示调控规律. 该类高浓度结构虽需非平衡实验条件制备, 但在理论研究中能够有效地阐明 Ru-4d 轨道与宿主晶格的相互作用机制, 这也是本文开展多浓度对比分析的主要目的.

3.2 电子结构

图 2 展示了本征及不同浓度 Ru 掺杂 (替换 Mo 原子或 S 原子) 单层 MoS₂ 的能带结构. 为便于对比分析, 能带结构图中的能量选取 -3—3 eV, 所有能带结构的能量均以费米能级为参考零点 (水平虚线表示). 为验证计算结果的可靠性, 分别采用 PBE 和 HSE06 泛函 [28] 计算能带结构, 如图 2(a) 所示. 在 PBE 泛函下, 单层 MoS₂ 的带隙为 1.724 eV, HSE06 泛函下带隙值为 2.199 eV, 两种

表 1 本征单层 MoS₂ 及掺杂 MoS₂ 优化后的结构参数和形成能
Table 1. Structural parameters and formation energy of intrinsic monolayer MoS₂ and doped MoS₂.

不同结构	键长型	键长 $d/\text{Å}$	键角型	键角 $\theta/(\text{°})$	形成能 $E_{\text{form}}/\text{eV}$
MoS ₂	Mo—S	2.405	Mo—S—Mo	82.305	—
6.25%Ru-Mo- MoS ₂	S—Ru	2.360	Mo—S—Ru	79.932	-4.33
11.1%Ru-Mo-MoS ₂	S—Ru	2.359	Mo—S—Ru	79.897	-4.32
25%Ru-Mo-MoS ₂	S—Ru	2.362	Mo—S—Ru	83.359	0.74
5.55%Ru-S-MoS ₂	Mo—Ru	2.667	Mo—Ru—Mo	72.015	-7.83
12.5%Ru-S-MoS ₂	Mo—Ru	2.668	Mo—Ru—Mo	72.606	-5.18
25%Ru-S-MoS ₂	Mo—Ru	2.660	Mo—Ru—Mo	72.969	-2.55

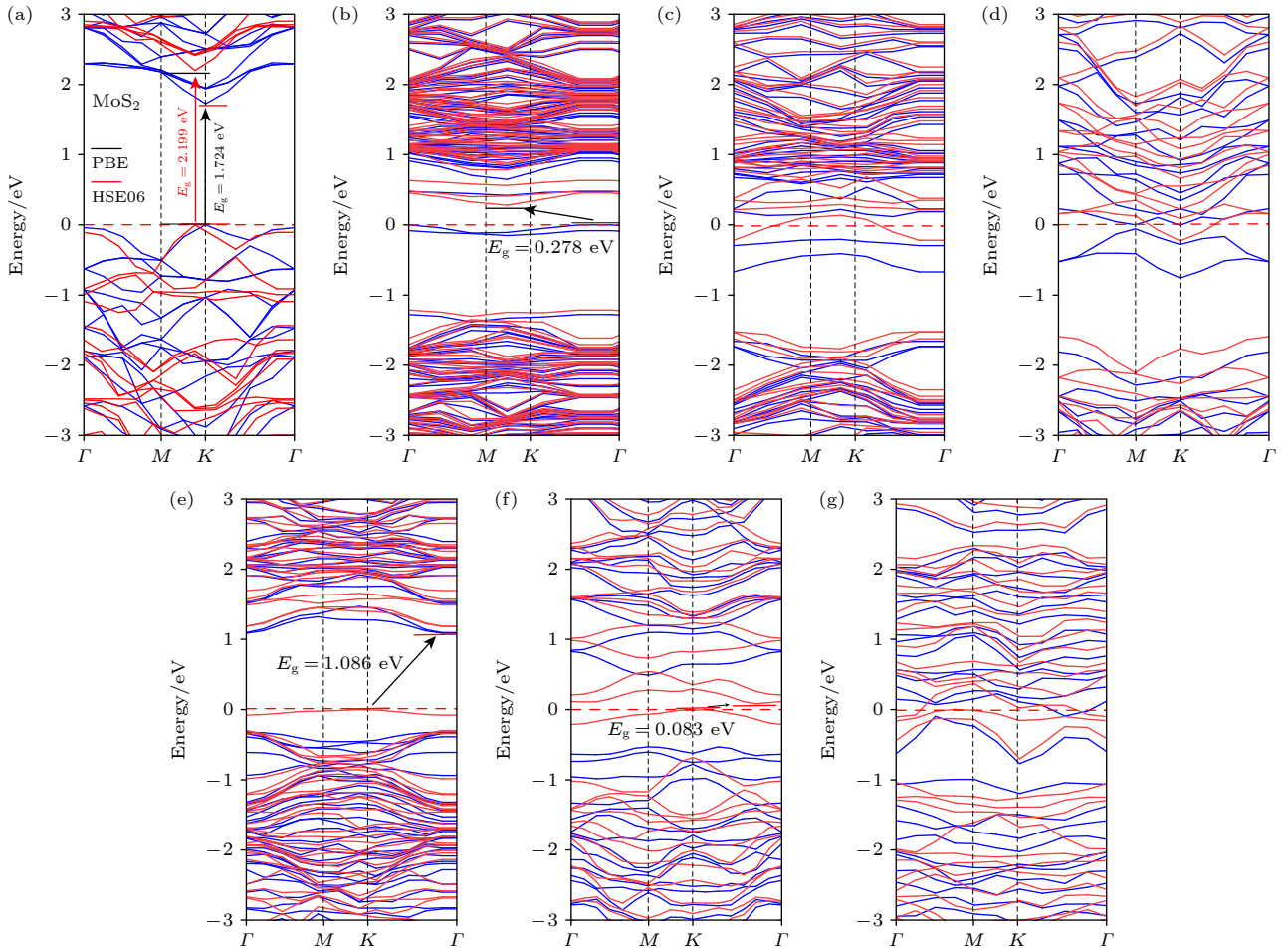


图2 本征单层 MoS₂ 及掺杂 MoS₂ 优化后的能带图 (蓝色为自旋向上能带, 红色为自旋向下能带) (a) 本征单层 MoS₂; (b) 6.25% Ru-Mo:MoS₂; (c) 11.1% Ru-Mo:MoS₂; (d) 25% Ru-Mo:MoS₂; (e) 5.55% Ru-S:MoS₂; (f) 12.5% Ru-S:MoS₂; (g) 25% Ru-S:MoS₂

Fig. 2. Band structure diagrams of monolayer MoS₂ (blue represents the PBE, red represents the HSE06) and doped MoS₂ (blue represents the spin-up bands, and red represents the spin-down bands): (a) Intrinsic monolayer MoS₂; (b) 6.25% Ru-Mo:MoS₂; (c) 11.1% Ru-Mo:MoS₂; (d) 25% Ru-Mo:MoS₂; (e) 5.55% Ru-S:MoS₂; (f) 12.5% Ru-S:MoS₂; (g) 25% Ru-S:MoS₂.

泛函计算所得导带底与价带顶均定位于 K 点, 为直接带隙半导体, 且自旋向上能带和自旋向下能带完全重合, 无磁性. 这些结果与文献报道接近^[27–30]. 比较两种泛函的计算结果可见, HSE06 泛函使导带底能量上移, 进而导致带隙增大, 但未改变能带的整体分布趋势. 尽管 HSE06 泛函的计算精度更高, 其结果也接近单层 MoS₂ 的实验带隙值 (1.87/1.74 eV)^[31,32], 但综合考量计算成本, 本研究后续计算均采用 PBE 泛函开展. 需说明的是, PBE 泛函虽存在带隙低估的固有局限性, 但在定性判断金属与半导体特性及预测晶体结构方面具有明显优势^[30]. 图 2(b)、图 2(c)、图 2(d) 分别为 Ru 替换 Mo 原子掺杂浓度为 6.25%、11.1% 和 25% 体系的能带结构. 可以看出, 费米能级附近的自旋向上和自旋向下能带发生劈裂, 且不同自旋方向的能带呈现出不对称性, 使体系产生净磁矩, 表现出磁性.

在 6.25% 掺杂浓度下, 体系仍保持半导体特性, 但带隙类型转变为间接带隙, 带隙值急剧减小至 0.278 eV; 同时, 能带的色散特性显著减弱, 导带整体呈现下移趋势. 这一变化主要源于 Ru 原子的电子组态为 $4d^75s^1$, 相较于 Mo 原子的 $4d^55s^1$ 多出 2 个价电子, 这些额外价电子作为施主载流子填充导带底部, 形成局域磁矩; 同时 Ru-4d 轨道与近邻 S-3p 轨道的轨道杂化进一步引起导带展宽下移. 当掺杂浓度增至 11.1% 与 25% 时, 由于施主电子注入效应与轨道杂化作用, 费米能级穿过了自旋向下的导带, 带隙完全闭合, 表现出 n 型金属导电特性. 且自旋极化效应持续存在, 说明磁矩未随金属化消失. 这种电子结构的转变可显著地提升材料的载流子浓度与电导率, 为高导电性电极类光电子器件的设计提供了潜在的材料支撑. 对比图 2(c) 与图 2(d) 可知, 二者在费米能级附近的能带特征基

本相似, 表明当 Ru 替换 Mo 的掺杂浓度达到约 11% 后, 体系电子结构的基本特征趋于稳定, 说明增大掺杂浓度对能带整体格局的调控作用减弱. 图 2(e)、图 2(f)、图 2(g) 则分别对应 Ru 替换 S 原子掺杂浓度为 5.55%, 12.5% 和 25% 体系的能带结构. 在 5.55% 掺杂下, 体系由直接带隙转变为间接带隙, 带隙为 1.806 eV, 出现微弱自旋劈裂; 当掺杂浓度增至 12.5% 时, 带隙收缩至 0.083 eV, 该结果与 Zhang 等^[22] 对类似 Ru-S 掺杂体系的理论计算结果相吻合, 验证了本计算方法的可靠性. 且费米能级附近的能带不对称性增强, 净磁矩更大, 自旋极化效应更显著; 在 25% 高掺杂下, 导带区域能级分布更加密集, 费米能级穿过自旋向下导带, 带隙完全闭合, 呈现出显著自旋极化的金属性. 这是源于 Ru-4d 与近邻 Mo-4d/S-3p 轨道发生局域耦合, 且该轨道的自旋劈裂效应随掺杂浓度升高而显著增强, 表明通过调控 Ru 掺杂浓度可有效调制单层 MoS₂ 的电子与自旋性质, 为其在自旋光电器件中的应用提供了理论依据. 值得说明的是, Ru 替换 Mo 时, 因 Ru 与 Mo 原子半径相近, 以施主电子注入为主导, Ru 的额外价电子直接填充导带产生带隙收窄与金属化, Ru-4d 与 S-3p 轨道的弱杂化仅诱导弱自旋极化, 局部结构畸变较小且金属化后趋于稳定; 而 Ru 替换 S 时, 因 Ru 原子半径远大于 S, 轨道杂化与电子注入协同作用, 局部结构畸变较大, 自旋极化较显著. 该结果揭示了掺杂位点对 MoS₂ 电子结构与功能特性的调控规律, 也导致了两种掺杂体系在磁学性质上的不同表现, 如表 2 所列. 其中, M_{tot} , M_{Mo} , M_{S} 和 M_{Ru} 分别表示体系的总磁矩、所有 Mo 原子贡献的磁矩、所有 S 原子贡献的磁矩及掺杂过渡金属原子 Ru 的磁矩. 结果表明, 本征 MoS₂ 体系无净磁矩, Ru 掺杂体系都出现了净磁矩. Ru-Mo 体系的总磁矩随掺杂浓度升高从 $1.98\mu_{\text{B}}$ 降至 $1.16\mu_{\text{B}}$, 且 Mo, S 和 Ru 原子均存在局域磁矩, 说明该体系存在弱自旋极化. 值得注意的是, 近邻 Mo 原子的磁矩贡献显著高于 Ru 原子自身, 说明 Ru 的磁性通过 S-3p 轨道有效地极化了周围晶格. 而 Ru-S 体系的总磁矩随掺杂浓度升高从 $2.00\mu_{\text{B}}$ 升高至 $4.30\mu_{\text{B}}$, 且局域磁矩主要来自 Ru 原子, Mo 与 S 的磁矩极小甚至为负, 说明该体系存在强自旋极化, 且自旋极化源于 Ru-4d 轨道主导的 Ru-4d 与 Mo-4d 的强耦合. 这

种差异与其在电子结构的调控机制对应, 为自旋光电器件的 MoS₂ 基掺杂材料设计提供了磁学依据.

表 2 本征单层 MoS₂ 及掺杂 MoS₂ 的磁矩Table 2. Magnetic moments of MoS₂ and doped MoS₂.

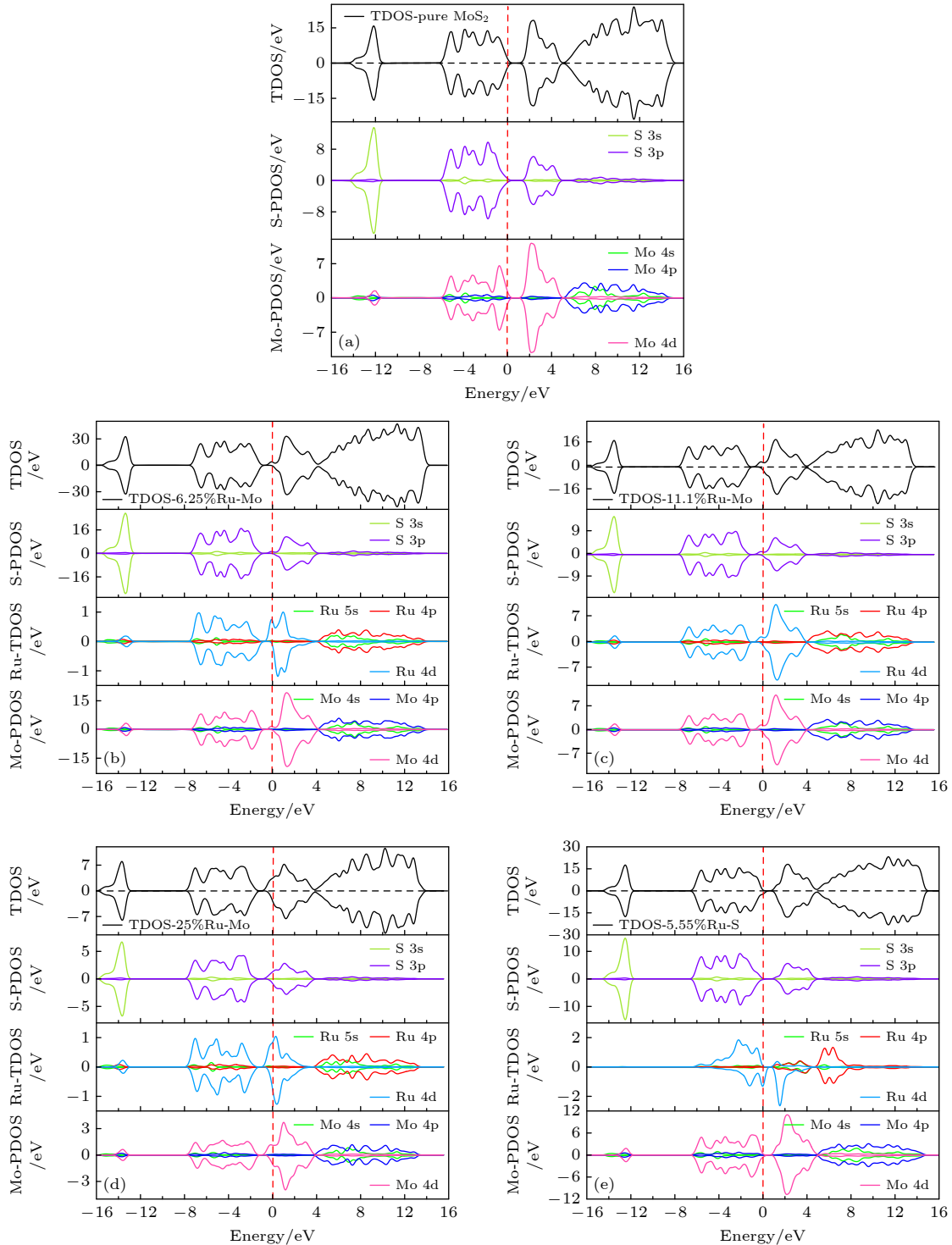
不同结构	$M_{\text{tot}}/\mu_{\text{B}}$	$M_{\text{Mo}}/\mu_{\text{B}}$	$M_{\text{S}}/\mu_{\text{B}}$	$M_{\text{Ru}}/\mu_{\text{B}}$
MoS ₂	0	0	0	0
6.25%Ru-Mo-MoS ₂	1.98	1.18	0.24	0.56
11.1%Ru-Mo-MoS ₂	1.74	0.96	0.26	0.52
25%Ru-Mo-MoS ₂	1.16	0.63	0.12	0.41
5.55%Ru-S-MoS ₂	2.00	-0.17	-0.05	2.20
12.5%Ru-S-MoS ₂	2.22	-0.18	-0.02	2.22
25%Ru-S-MoS ₂	4.30	-0.02	-0.02	4.34

3.3 电子态密度

为了进一步研究掺杂对电子结构的影响, 计算了本征 MoS₂ 掺杂前后的态密度分布情况. 图 3 展示了本征单层 MoS₂ 及不同浓度 Ru 掺杂体系的自旋极化下的总态密度 (TDOS) 和分态密度 (PDOS), 选取的能量范围从 -16 到 16 eV 之间, 包含了导带和上、下价带的分布信息. 图 3(a) 为本征 MoS₂ 态密度图, 上价带和导带主要由 S-3p, Mo-4d 与 Mo-4p 轨道杂化构成, 导带底距费米能级约为 1.73 eV, 与能带结构中带隙宽度对应. 态密度自旋向上与自旋向下明显对称, 无自旋极化现象, 表现为非磁性半导体特性. 图 3(b)–(d) 依次为 6.25%, 11.1%, 25% 浓度 Ru-Mo 体系的态密度图. 可以看出, 上价带和导带由 S-3p, Mo-4d 与 Ru-4d 杂化态构成, 其自旋向上与向下态密度出现不对称, 自旋极化主要由导带区 Ru-4d 态电子引起, 诱导极化了费米能级附近 S-3p, Mo-4d 态电子自旋, 使得费米能级附近的总态密度出现偏移, 体系产生净磁矩. 且随着掺杂浓度增大, Ru-4d 轨道的贡献显著增强, 与 S-3p, Mo-4d 轨道的杂化程度进一步提高. 这一特性与能带结构分析结果相互印证. 图 3(e)–(g) 依次为 5.25%, 12.5%, 25% 浓度 Ru-S 体系的态密度图. 可以看出, 导带态密度主要来源于 S-3p 和 Mo-4d 态电子, 同时存在少量 Ru-4p 与 Ru-4d 电子的贡献; 上价带态密度则由 S-3p, Mo-4d 及 Ru-4d 态电子共同贡献, 且自旋向上与向下态密度出现显著不对称分布. 这种自旋不对称性主要源于 Ru-4d 轨道与邻近 Mo-4d 轨道的强杂化作用, 在禁带中引入自旋依赖的局域化杂质

能级,并在费米能级附近诱导显著自旋劈裂,形成尖锐的自旋极化电子态.在5.55%与12.5%掺杂浓度下,此杂质能级可作为有效的中间跃迁通道,将本征直接带隙转变为窄间接带隙.随着浓度升高至25%,杂质能级间的电子耦合作用增强,导致杂质能级展宽,使带隙完全闭合,体系进入金属态.值得关注的是,所有Ru掺杂体系总态密度(TDOS)峰值均向低能方向整体红移;且随着掺杂浓度增

大,费米能级上移至导带区域,体系表现出n型金属导电特性,这一结果与能带结构分析结论一致.另外,所有掺杂体系在费米能级附近均出现新的态密度峰,这一现象源于S-3p, Mo-4d与Ru-4d轨道的杂化作用,不仅调控了电子跃迁路径,还引入了自旋极化通道,可有效降低电子跃迁能垒,提升电子跃迁效率,从而有效地增强单层MoS₂的光电响应性能.



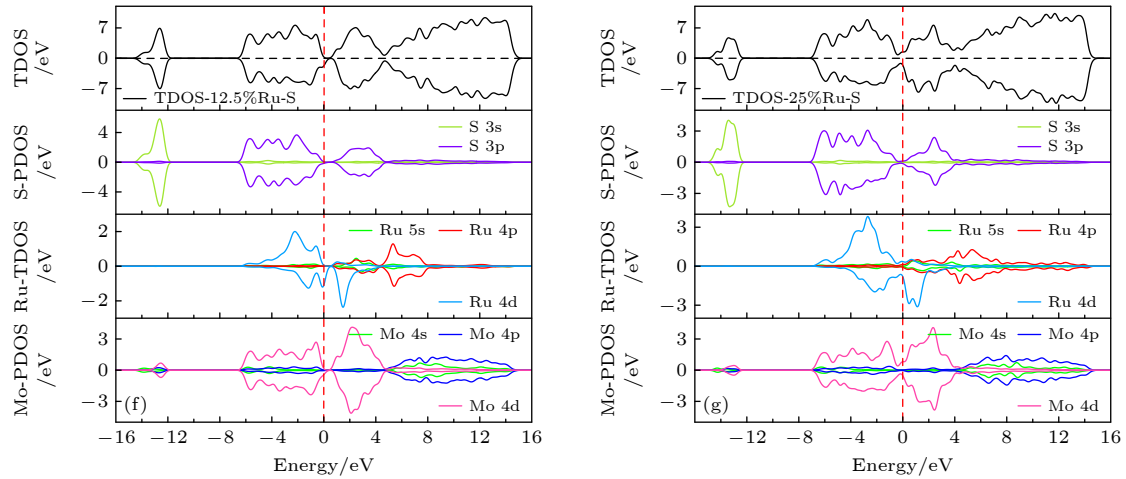


图3 本征单层 MoS_2 及掺杂 MoS_2 的总态密度 (TDOS) 和分态密度图 (PDOS) (a) 本征单层 MoS_2 ; (b) 6.25%Ru-Mo: MoS_2 ; (c) 11.1%Ru-Mo: MoS_2 ; (d) 25%Ru-Mo: MoS_2 ; (e) 5.55%Ru-S: MoS_2 ; (f) 12.5%Ru-S: MoS_2 ; (g) 25%Ru-S: MoS_2

Fig. 3. Total density of states and partial density of states diagrams of intrinsic monolayer MoS_2 and doped MoS_2 : (a) Intrinsic monolayer MoS_2 ; (b) 6.25%Ru-Mo: MoS_2 ; (c) 11.1%Ru-Mo: MoS_2 ; (d) 25%Ru-Mo: MoS_2 ; (e) 5.55%Ru-S: MoS_2 ; (f) 12.5%Ru-S: MoS_2 ; (g) 25%Ru-S: MoS_2 .

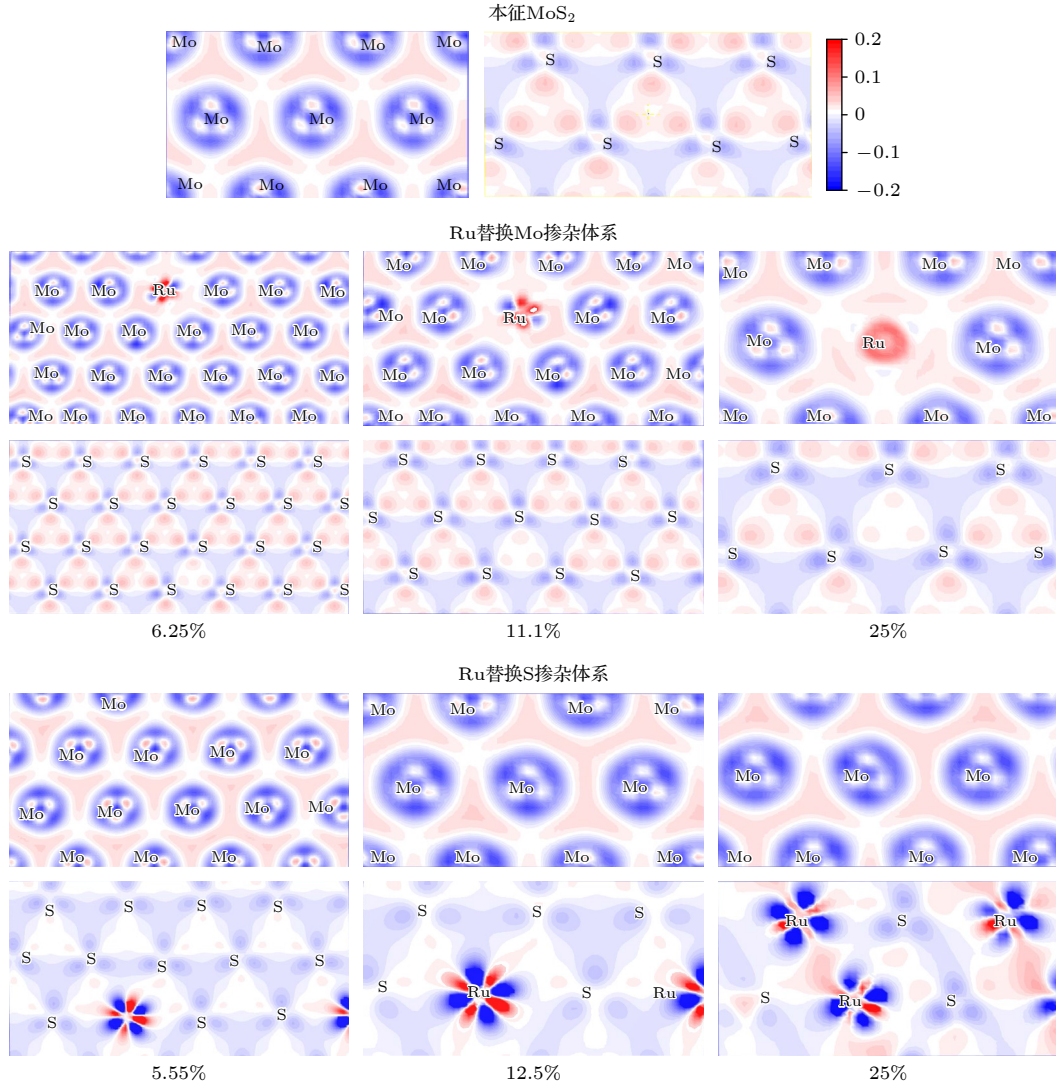
3.4 差分电荷密度

为揭示 Ru 掺杂对单层 MoS_2 电子结构的微观影响及电荷重排机制, 图4展示了本征及不同 Ru 掺杂体系的差分电荷密度分布. 图中分别以 Mo 原子层及顶层 S 原子层为截面进行展示, 右侧附有色标以量化电荷变化 (正值表示电子积累, 负值表示电子损失). 本征体系中, Mo 与 S 原子周围电荷分布呈镜像差异, Mo 位点以电子损失 (蓝色区) 为主, S 位点以电子聚集 (白色/浅红色区) 为主. 这种差异源于 Mo 与 S 原子的电负性差异 (Mo 原子的电负性为 2.16, S 原子的电负性为 2.58), 电负性更强的 S 原子吸引成键电子, 使 Mo 原子失电子、S 原子得电子, 直接体现了 Mo—S 键兼具离子性与共价性的微观本质. Ru 替位 Mo 原子时, 在 6.25%, 11.1% 和 25% 三种浓度下, Ru 位点均出现显著的电子积累 (红色区), 电荷沿 Ru—S 键方向延伸且键角区域形成对称分布特征, 反映 Ru-4d 与 S-3p 轨道的强杂化作用; 电荷重排局限于掺杂位点近邻, 随浓度升高积累范围略有扩展, 这是体系导带下移、费米能级进入导带呈现金属性的微观根源. Ru 替位 S 原子时, 随浓度升高, Ru 位点电子积累逐渐增强, 近邻 Mo 原子出现电子损失, 电荷重排同样局限于近邻区域. 该现象源于 Ru 与 S 的电负性差异, 形成的局域电偶极矩结合 Ru-4d 轨道局域态作用, 使带隙中引入杂质能级, 降低电子跃迁能垒. 因此, 差分电荷密度定量验证了 Ru

与周边原子的电荷转移行为, 为杂质能级的形成及带边移动提供了直接的微观解释.

3.5 磁性性质

为探究不同掺杂位点下体系磁性的微观起源, 以下结合分波态密度 (PDOS) 与差分电荷密度进行分析. 对于 Ru-Mo 体系, 其弱磁性主要源于载流子填充诱导的晶格极化. PDOS(图3) 显示, Ru-4d 轨道与近邻 S-3p 轨道耦合较弱, Ru 原子主要作为施主杂质向 MoS_2 基体注入电子. 这些额外载流子使周围 Mo 原子的轨道发生微弱极化, 产生较小的集体磁矩, Ru 原子自身磁矩仅为 $0.41\text{--}0.56\mu_B$ (表2). 差分电荷密度 (图4) 进一步表明, 体系与周围原子之间电荷转移较弱, 未形成明显的轨道杂化, 进一步印证了其磁性以晶格极化为主导的特征. 这与表2中近邻 Mo 原子磁矩贡献显著高于 Ru 原子自身的结果一致. 对于 Ru-S 体系, 其强磁性来源于 Ru-4d 与 Mo-4d 的强轨道耦合导致的自旋劈裂. PDOS(图3) 中可观察到, Ru-4d 轨道与近邻 Mo-4d 轨道存在显著重叠与杂化, 强相互作用使 Ru 原子的未成对 d 电子发生明显的自旋极化与劈裂, Ru 原子磁矩占体系总磁矩的 95% 以上 (表2). 差分电荷密度显示 (图4), Ru 替换 S 原子体系与周围 Mo 原子间存在明显的电荷集聚, 强轨道耦合进一步加剧了自旋极化, 近邻 Mo 原子出现负磁矩补偿, 形成以局域磁矩为主导的强磁特征.

图 4 本征单层 MoS₂ 及掺杂 MoS₂ 的差分电荷密度Fig. 4. Electron density difference of intrinsic monolayer MoS₂ and doped MoS₂.

这与表 2 中 Ru 原子磁矩占比极高、Mo/S 原子磁矩极小甚至为负的规律完全吻合。

3.6 光学性质

介电函数是表征材料光学性质的核心宏观物理量,一般表示为复数形式: $\varepsilon(\omega) = \varepsilon_1(\omega) + i\varepsilon_2(\omega)$ [32,33]. 其中,实部 $\varepsilon_1(\omega)$ 反映材料极化与储存电磁能量的能力,与折射率直接相关;虚部 $\varepsilon_2(\omega)$ 则反映材料对电磁能量的损耗,决定其光吸收强弱. 吸收系数 $\alpha(\omega)$ 直接描述材料对不同波长光的吸收能力;反射系数 $R(\omega)$ 定义为反射光通量与入射光通量之比 [13,34],反映材料表面对光的反射性能. 由经典电磁理论,吸收系数和反射系数可通过介电函数导出,与光子频率 ω 的关系为:[35]

$$\alpha(\omega) = \sqrt{2} \left[\sqrt{\varepsilon_1^2(\omega) + \varepsilon_2^2(\omega)} - \varepsilon_1(\omega) \right]^{1/2},$$

$$R(\omega) = \left| \frac{\sqrt{(\varepsilon_1(\omega) + j\varepsilon_2(\omega))} - 1}{\sqrt{(\varepsilon_1(\omega) + j\varepsilon_2(\omega))} + 1} \right|.$$

图 5(a) 和图 5(b) 分别展示了本征单层 MoS₂ 及不同浓度 Ru 掺杂体系的介电函数实部与虚部曲线. 从图 5(a) 可看出,对于 Ru-Mo 体系,11.1% 与 25% 浓度下静态介电常数分别为 8.5 和 19.8,显著高于本征体系的 6.12. 其低能区 (0—0.6 eV) 介电实部随掺杂浓度升高显著提升,主要源于掺杂原子引入的自由载流子的 Drude 极化效应 [6,34],弱自旋极化的贡献可忽略. 而对于 Ru-S 体系,随着掺杂浓度从 5.55% 增至 25%,静态介电常数由 6.8 上升至 9.6. 在低能区域 (0—0.6 eV),介电实部 ε_1

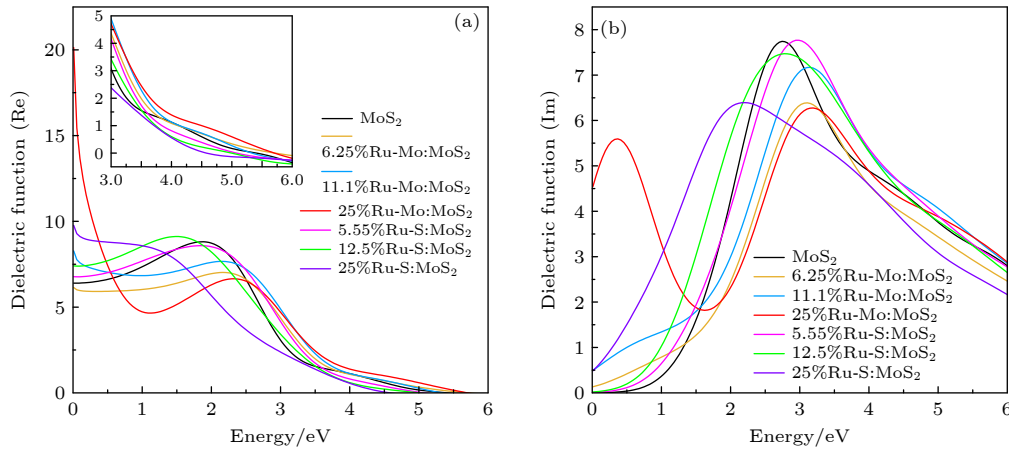


图 5 本征单层 MoS_2 及掺杂 MoS_2 的介电函数 (a) 介电函数实部; (b) 介电函数虚部

Fig. 5. Dielectric function of intrinsic monolayer MoS_2 and doped MoS_2 : (a) Real part of the dielectric function; (b) imaginary part of the dielectric function.

随浓度升高略有提升; 至约 2.3 eV 后, 其变化趋势逐渐与本征体系趋于一致. 结合前文得到的该体系磁矩随掺杂浓度同步增大, 说明其介电响应主要源于 Ru-4d 与近邻 Mo-4d 轨道耦合诱导的强自旋极化及相对较弱的自由载流子极化. 从图 5(b) 可以看出, 对于 Ru-Mo 体系, 其低能区 (0—1.5 eV) 介电虚部 ε_2 显著高于本征体系, 且随掺杂浓度升高持续增强, 在 0.4 eV 附近的近红外区域出现一个极强的介电响应峰. 这是由于该体系为施主掺杂, 引入的大量自由载流子在低能区产生了显著的 Drude 弛豫损耗, 载流子浓度越高, 损耗效应越显著; 同时, 该体系的特征吸收峰随掺杂浓度升高呈现明显蓝移, 6.25% 掺杂时峰位为 3.08 eV, 11.1% 掺杂时蓝移至 3.14 eV, 25% 掺杂时进一步蓝移至 3.18 eV. 这一现象源于 Ru-4d 与 Mo-4d 轨道杂化以及高浓度掺杂引发的能带收缩, 使本征带间跃迁所需能量增加. Ru-S 体系的低能区介电虚部 ε_2 高于本征体系, 但弱于同浓度 Ru-Mo 体系, 且随掺杂浓度升高略有增强, 其损耗源于自旋极化诱导的额外电子跃迁通道, 而非强 Drude 效应. 由于自由载流子浓度更低, 低能区损耗增强幅度更弱. 值得注意的是, 本征体系在 2.8 eV 附近的特征峰, 随掺杂浓度升高明显红移: 12.5% 时移至 2.7 eV, 25% 时移至 2.2 eV 附近. 这一红移现象主要源于 Ru 原子改变了 Mo4d 与 S-3p 轨道的杂化强度, 同时载流子填充效应降低了带间跃迁能量, 导致吸收峰向低能方向偏移. 以上结果与前文能带特点、态密度分析一致.

图 6(a) 和图 6(b) 分别展示了本征 MoS_2 及不

同浓度 Ru 掺杂体系在 0—10 eV 范围的吸收光谱和反射系数. 从图 6(a) 可见, 所有体系在紫外区域 (3.1—6.2 eV) 均表现出强吸收, 进入可见光 (1.6—3.1 eV) 及近红外波段 (<1.6 eV) 后吸收系数逐渐衰减. 对于 Ru-Mo 的体系, 红外区吸收略高于本征 (0—1.6 eV, 见图 6(a) 插图), 并随浓度升高而增大; 25% 掺杂浓度下, 0.82 eV 处出现一个新吸收峰, 主要源于 Ru-4d 与 Mo-4d 轨道杂化引入的导带内局域态电子跃迁与 Drude 载流子吸收. 在可见-紫外区域 (1.6—6.2 eV), 其吸收强度较本征降低, 与介电虚部特征吸收峰蓝移趋势一致, 反映能带收缩导致跃迁能量提升. 对于 Ru-S 的体系, 红外波段吸收更为显著, 对应强自旋极化诱导的额外电子跃迁通道; 而紫外区吸收随浓度升高而减弱, 对应介电虚部特征峰红移趋势, 源于 Mo-4d 与 S-3p 轨道杂化强度改变及跃迁能垒降低. 从图 6(b) 可见, 本征 MoS_2 的静态反射率为 0.18. Ru-Mo 体系在红外区域反射率随浓度升高而增强, 源于高浓度下自由载流子 Drude 极化效应增强; 而在可见-紫外区域反射率均整体降低. Ru-S 体系静态反射率随浓度升高而增大, 近红外区反射率显著提升, 与介电实部低能区的自旋极化诱导极化增强直接相关; 在可见-紫外区, 5.55% 与 12.5% 掺杂浓度的反射率高于本征, 而 25% 掺杂浓度的反射系数变化较为平缓, 这与介电实部在中高能区的平缓变化趋势完全呼应.

基于上述分析, 可将两种掺杂体系光学性质的变化归因于不同的物理机制. Ru-Mo 体系的光学响应主要受自由载流子行为主导. Ru 替换 Mo

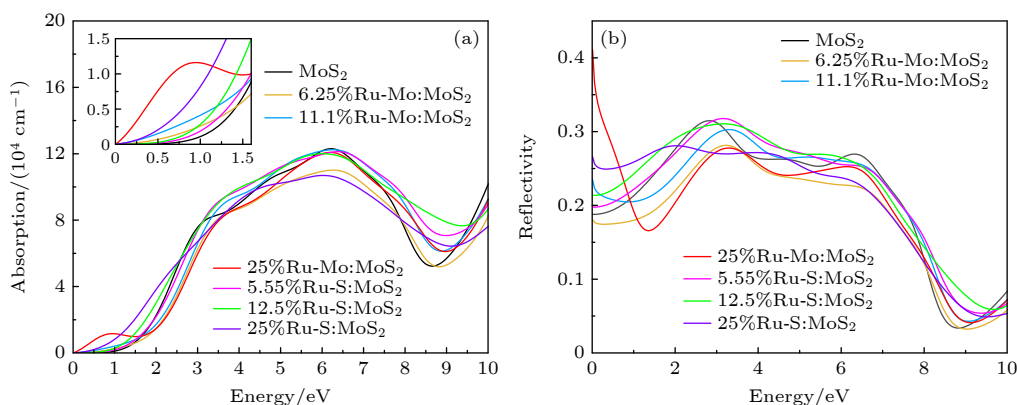


图 6 本征单层 MoS₂ 及掺杂 MoS₂ 的吸收光谱和反射系数 (a) 吸收光谱; (b) 反射系数

Fig. 6. Absorption and reflection spectra of intrinsic monolayer MoS₂ and doped MoS₂: (a) Absorption spectra; (b) reflection spectra.

引入的施主杂质注入大量电子, 这些自由载流子的 Drude 极化效应导致低能区介电响应显著增强, 并在红外波段产生明显的带内吸收. 同时, 导带内由 Ru-4d 与 S-3p 杂化形成的局域态提供了额外的跃迁通道, 在 0.4 eV 附近形成特征吸收峰. 随着掺杂浓度升高, 能带收缩效应使带间跃迁的联合态密度峰值向高能方向移动, 导致主吸收峰出现蓝移. 相比之下, Ru-S 体系的光学性质则源于 Ru-4d 与 Mo-4d 强耦合引入的自旋极化杂质能级. 这些杂质能级位于禁带之中, 作为中间态降低了带间跃迁所需能量, 使主吸收峰发生红移. 与此同时, 自旋极化产生新的跃迁通道, 在较宽的红外波段范围内增强了吸收强度. 上述机制与能带结构、态密度、差分电荷密度以及磁性分析的结果相互印证, 共同揭示了掺杂位点与浓度对 MoS₂ 光电性质的调控规律, 为其在红外光电探测与调制器件中的应用提供了重要的参数依据.

4 结 论

基于密度泛函理论的第一性原理计算, 本文系统地研究了 Ru 原子替换不同晶格位点 (Mo/S) 及不同掺杂浓度对单层 MoS₂ 电子结构、磁性及光学性质的影响. 计算表明, 掺杂位点与浓度的选择对单层 MoS₂ 的光电性能具有显著的影响. 电子结构方面, 本征单层 MoS₂ 为直接带隙半导体 (PBE 泛函下带隙约 1.724 eV), 无自旋极化. Ru-Mo 掺杂以施主电子注入为主导, 随浓度升高带隙闭合, 体系转变为弱自旋极化 n 型金属; Ru-S 掺杂则通过 Ru-4d 与 Mo-4d 强耦合在禁带中引入杂质能级, 呈现强自旋极化特征, 并随浓度升高发生金属化转

变. 磁性分析方面, Ru-Mo 体系的弱磁性源于载流子填充诱导的晶格极化, Ru 原子作为施主注入电子, 使近邻 Mo 轨道发生微弱极化, 磁矩由 Ru 和近邻 Mo 共同贡献; Ru-S 体系的强磁性则源于 Ru-4d 与 Mo-4d 强轨道耦合导致的自旋劈裂, 磁矩主要局域于 Ru 原子, 近邻 Mo 原子出现负磁矩. 光学性质方面, Ru-Mo 体系低能介电响应和红外吸收的显著增强主要源于自由载流子的 Drude 效应, 导带内局域态贡献了额外吸收峰, 能带收缩导致主吸收峰蓝移; Ru-S 体系主峰红移主要归因于自旋极化杂质能级对带间跃迁能量的降低, 而自旋极化提供的额外跃迁通道则增强了宽谱红外吸收. 与已有研究相比, 本文明确了掺杂位点与浓度对单层 MoS₂ 带隙、自旋极化、金属化及光学响应的差异化影响, 为高性能红外探测器、自旋光电器件及太阳能电池的设计提供了新的掺杂思路. 需要说明的是, 本研究基于周期性有序超胞模型与 PBE 泛函, 所得结果为有序掺杂下的定性规律. 实验上实现完美的长程有序掺杂极为困难, 高浓度下热力学不稳定性极易引发 Ru 原子团簇或相分离, 从而导致实际光学响应峰宽化或使金属化转变的临界掺杂浓度升高. 然而, 本研究所揭示的 Ru-4d 轨道与 MoS₂ 基体轨道杂化以及在带隙中引入杂质能级等核心物理图像, 在低浓度掺杂或缺陷体系中仍适用, 对于理解与设计 MoS₂ 基掺杂材料的光电性能具有重要意义.

参考文献

- [1] Tan C, Cao X H, Wu X J, He Q H, Yang J, Zhang X, Chen J Z, Zhao W, Han S K, Nam G H, Sindoro M, Zhang H 2017 *Chem. Rev.* **117** 6225

- [2] Hess P 2021 *Nanoscale Horiz.* **6** 856
- [3] Malyi O I, Sopiha K V, Persson C 2019 *ACS Appl. Mater. Interfaces* **11** 24876
- [4] Chen J B, Wang C H, Li H, Xu X, Yang J G, Huo Z, Wang L X, Zhang W F, Xiao X D, Ma Y P 2022 *Molecules* **28** 200
- [5] Ma D W, Ju W W, Li T X, Zhang X W, He C Z, Ma B Y, Tang Y N, Lu Z S, Yang Z X 2016 *Appl. Surf. Sci.* **364** 181
- [6] Wang Q H, Kalantar-Zadeh K, Kis A, Coleman J N, Strano M S 2012 *Nat. Nanotechnol.* **7** 699
- [7] Yang F, Hu P, Yang F F, Chen B, Yin F, Sun R Y, Hao K, Zhu F, Wang K S, Yin Z Y 2023 *Adv. Sci.* **10** 2300952
- [8] Maksymiuk J, Wrona I A, Szczesniak R, Durajski A P 2025 *Surf. Sci.* **122** 788
- [9] Yao Y, Li S Y, Zha J J, Lai Z C, He Q Y, Tan C L, Zhang H 2024 *Two-Dimensional Transition-Metal Dichalcogenides: Phase Engineering and Applications in Electronics and Optoelectronics (Chapter 7)* (Weinheim: Wiley-VCH) pp267–291
- [10] Zhao Y, Yan B, Liang X X, Liu S X, Shi X, Zhao H Q 2023 *Phys. Status Solidi B* **260** 2300055
- [11] Gusakova J, Wang X L, Shiau L L, Krivosheeva A, Shaposhnikov V, Borisenko V, Gusakov V, Tay B K 2017 *Phys. Status Solidi A* **214** 1700218
- [12] Novoselov K S, Jiang D, Schedin F, Booth T J, Khotkevich V V, Morozov S V, Geim A K 2005 *Proc. Natl. Acad. Sci. U. S. A.* **102** 10451
- [13] Li Y L, Chernikov A, Zhang X, Rigosi A, Hill H M, van der Zande A M, Chenet D A, Shih E M, Hone J 2014 *Phys. Rev. B* **90** 205422
- [14] Feng L P, Su J, Liu Z 2014 *J. Alloys Compd.* **613** 122
- [15] Jlidi Z, Baachaoui S, Raouafi N, Ridene S 2021 *Optik* **228** 166166
- [16] Liang T, Wang Y Y, Liu G H, Fu W Y, Wang H Z, Chen J F 2021 *Acta Phys. Sin.* **70** 080701 (in Chinese) [梁婷, 王阳阳, 刘国宏, 符汪洋, 王怀璋, 陈静飞 2021 物理学报 **70** 080701]
- [17] Chettri B, Sharma B, Das S K, Chettri P, Karki P, Bhutia P R 2024 *IEEE International Conference of Electron Devices Society Kolkata Chapter (EDKCON)* Kolkata, India, November 30–December 1, 2024 p567
- [18] Zou H, Zeng Q Y, Peng M Q, Zhou W Z, Dai X Y, Ouyang, F P 2018 *Solid State Commun.* **280** 6
- [19] Prajakta K, Vinturaj V P, Singh R, Singh R, Garg V, Pandey S K, Pandey S K 2023 *Phys. Status Solidi B* **260** 2300017
- [20] Du R J, Wu W 2022 *Chem. Phys. Lett.* **789** 139300
- [21] Chen X Q, Wan Q Q 2024 *ACS Omega* **9** 13951
- [22] Zhang G Z, Wang Z T, Zhang X X 2022 *Mol. Phys.* **120** e2018517
- [23] Li G, Chen M Q, Zhao S X, Li P W, Hu J, Sang S B, Hou J J 2016 *Acta Phys. -Chim. Sin.* **32** 2905 (in Chinese) [李刚, 陈敏强, 赵世雄, 赵世雄, 李朋伟, 胡杰, 桑胜波, 侯静静 2016 物理化学学报 **32** 2905]
- [24] Perdew J P, Burke K, Ernzerhof M 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 3865
- [25] Clark S J, Segall M D, Pickard C J, Hasnip P J, Probert M J, Refson K, Payne M C 2005 *Z. Kristallogr. Cryst. Mater.* **220** 567
- [26] Gong C, Zhang H J, Wang W H, Colombo L, Wallace R M, Cho K 2013 *Appl. Phys. Lett.* **103** 053515
- [27] Xu W W, Sun T, Jiang Y Z, Qu X Y, Yan X, Wang L Y, Wang X F, Huang J B, Wu X Z 2022 *Phys. Lett. A.* **451** 128398
- [28] Heyd J, Scuseria G E, Ernzerhof M 2003 *J Chem Phys.* **118** 8207
- [29] Mahmood A, Lu G H, Wang X, Wang Y, Xie X F, Sun J 2022 *J. Power Sources* **551** 232208
- [30] Sun Y M. 2024 *J. Mol. Model.* **30** 112
- [31] He X, Li H, Zhu Z Y, Dai Z Y, Yang Y, Peng Y, Zhang Q, Li P, Schwingenschlogl U 2016 *Appl. Phys. Lett.* **109** 173105
- [32] Kam K K, Parkinson B A 1982 *J. Phys. Chem.* **86** 463
- [33] Moore E A, Smart L E 2020 *Solid State Chemistry: An Introduction* (Boca Raton: CRC Press) p442
- [34] Wei R, Liu G L, Gao X W, He J L, Zhao J W, Chen Y L, Zhang G Y 2023 *J. Mol. Model.* **29** 331
- [35] Yang C X, Chen J F, Zeng X F, Cheng D J, Huan H F, Cao D P 2016 *Nanotechnol.* **27** 075203

Effects of Ru doping on the electronic structure, magnetic and optical properties of monolayer MoS₂*

LU Meihong^{1)†} ZHANG Fan¹⁾ DI Zhiling²⁾

1) (*Department of Physics, Changzhi University, Changzhi 046011, China*)

2) (*School of Mathematics and Physics, Hebei University of Engineering, Handan 056038, China*)

(Received 24 December 2025; revised manuscript received 17 March 2026)

Abstract

Based on first-principles calculations, the electronic structure, magnetic properties, and optical characteristics of intrinsic monolayer MoS₂ and Ru-doped systems with different concentrations (replacing Mo or S atoms) are systematically studied. The results indicate that intrinsic monolayer MoS₂ is a direct bandgap semiconductor with a bandgap of 1.724 eV. When Ru replaces Mo atoms, the system gradually transforms into an n-type metal with increasing doping concentration; the bandgap decreases to 0.28 eV and then closes, with negligible magnetism. When Ru replaces S atoms, the bandgap decreases significantly, with values of 1.086 eV and 0.083 eV at concentrations of 5.55% and 12.5%, respectively. At a concentration of 25%, the system becomes metallic, accompanied by the generation of magnetism and an increase in magnetic moment with concentration; spin polarization induces additional electron transition channels. The density of states (DOS) analysis shows that when Ru replaces Mo, the Fermi level enters the conduction band due to the injection of donor electrons and orbital hybridization. When Ru replaces S, it introduces Ru-4d and Mo-4d hybridized localized impurity levels in the bandgap, reducing the electron transition energy barrier. Magnetic analysis further shows that the weak magnetism in the Ru-Mo system originates from lattice polarization induced by carrier filling. The strong magnetism in the Ru-S system arises from spin splitting caused by strong orbital coupling between Ru-4d and Mo-4d states. In terms of optical properties, visible and near-infrared absorption are enhanced by Ru doping, while ultraviolet absorption is suppressed. For the Ru-Mo system, the dielectric response in the low-energy region increases significantly with concentration, and the characteristic peak exhibits a blue shift, which is primarily attributed to the Drude effect of free carriers. For the Ru-S system, the dielectric response is weaker, and the characteristic peak shows a red shift, resulting from the influence of spin-polarized impurity levels on interband transitions. This study elucidates the distinct effects of Ru doping sites and concentrations on the optoelectronic properties of MoS₂, providing a theoretical foundation for the design of related optoelectronic devices.

Keywords: monolayer MoS₂, first-principles, Ru doping, optical properties, magnetic properties

DOI: [10.7498/aps.75.20251754](https://doi.org/10.7498/aps.75.20251754)

CSTR: [32037.14.aps.75.20251754](https://cstr.cn/32037.14.aps.75.20251754)

* Project supported by the Major Science and Technology Special Program “Unveiling the List and Leading the Way” Project of Shanxi Province, China (Grant No. 202201030201008)

† Corresponding author. E-mail: lmhxueer@126.com

Ru掺杂对单层MoS₂电子结构、磁性与光学性质的影响

逯美红 张凡 邱志玲

Effects of Ru doping on the electronic structure, magnetic and optical properties of monolayer MoS₂

LU Meihong ZHANG Fan DI Zhiling

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 75, 120806 (2026) DOI: 10.7498/aps.75.20251754

CSTR: 32037.14.aps.75.20251754

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.75.20251754>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

应力调控对单层TiOCl₂电子结构及光学性质的影响

Effect of stress regulation on electronic structure and optical properties of TiOCl₂ monolayer

物理学报. 2022, 71(7): 077101 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20212023>

单层CrI₃电荷输运性质和光学性质应变调控的第一性原理研究

First-principles study of strain-tunable charge carrier transport properties and optical properties of CrI₃ monolayer

物理学报. 2022, 71(20): 207102 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20221019>

二维单层FeGa₂S₄电子结构及光学性质调控研究

Electronic structure and optical property regulation of two-dimensional monolayer FeGa₂S₄

物理学报. 2026, 75(1): 207102 <https://doi.org/10.7498/aps.75.20251180>

稀土元素掺杂含单碲空位缺陷单层WTe₂光学性质的第一性原理

First-principles study on optical properties of rare-earth doped monolayer WTe₂ with single tellurium vacancies

物理学报. 2025, 74(22): 223101 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20251196>

高熵碳酸盐MgMnFeCuCO₃电子结构与光学性质的第一性原理研究

First-principles investigation of the electronic structure and optical properties of high-entropy carbonate MgMnFeCuCO₃

物理学报. 2026, 75(10): 223101 <https://doi.org/10.7498/aps.75.20251758>

应变对(Ga, Mo)Sb磁学和光学性质影响的理论研究

First-principles study of strain effect on magnetic and optical properties in (Ga, Mo)Sb

物理学报. 2022, 71(9): 096103 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20212316>