

双轴应变对 Co 掺杂单层 MoS₂ 磁学和光学性质影响的理论*

林雪玲 吴开鑫 潘凤春†

(宁夏大学物理学院, 银川 750021)

(2026 年 1 月 18 日收到; 2026 年 3 月 10 日收到修改稿)

单层 MoS₂ 基磁性半导体的实现及其自旋态的调控规律对二维自旋电子器件的开发和利用具有重要的科学价值. 本文利用基于密度泛函理论的第一性原理计算方法系统研究了双轴应变对 Co 掺杂单层 MoS₂ 的电子结构、磁学和光学性质的影响. 研究表明: 不同双轴应变下, Co 掺杂的 MoS₂(Co_{Mo}) 体系具有不同的电子结构, 在 -9%—6% 应变范围内, Co_{Mo} 体系产生大小为 1.00 μ_B 的局域磁矩, 在 -5%—9% 应变范围内, Co_{Mo} 体系产生大小为 3.00 μ_B 的磁矩; 磁矩之间的耦合类型随应变呈振荡趋势, 3% 应变下 Co_{Mo} 体系铁磁 (ferromagnetic, FM) 耦合的强度最大, 磁耦合机制由 d-p-d 超交换作用主导; 此外, Co 的掺杂提升了 Co_{Mo} 体系中价电子的跃迁概率和光生电子空穴对的分离效率, 使得掺杂体系的光催化性能得到了很大的改善, 同时提升了 Co_{Mo} 体系对可见光区和红外光区光子的吸收幅度, 光学吸收谱的吸收边发生了红移, 而拉伸应变则进一步提升了 Co_{Mo} 体系在可见光区和红外光区的光学性能.

关键词: MoS₂, 双轴应变, 磁学性质, 光学性质**DOI:** 10.7498/aps.75.20260090**CSTR:** 32037.14.aps.75.20260090

1 引言

石墨烯作为第一个被发现的二维材料, 具有优异的力学、电学和热学性能, 但带隙为零的特性使其并不适合做逻辑器件和光电器件, 从而限制了石墨烯在半导体领域的应用^[1,2]. 层状结构的过渡族金属硫族化合物 (transition metal dichalcogenides, TMDs) 具有可调节的带隙、高载流子迁移率等物理特性使其成为光电子器件、自旋电子器件、光催化和能源储存等领域的候选材料^[3-5]. 作为 TMDs 的代表材料, MoS₂ 具有优异的半导体特性, 单层 MoS₂ 为直接带隙半导体, 双层及以上层数的 MoS₂ 为间接带隙半导体, MoS₂ 的层状结构有利于离子的渗透, 高的比表面积和超快的载流子迁移

率使其在场效应晶体管^[6]、光电探测器件^[7]、太阳能电池^[8]、光催化剂^[9]和传感器^[10]等纳米电子学和光电子学领域展现出了巨大潜力.

自旋-轨道耦合效应决定了单层 MoS₂ 是一种具有自旋劈裂特性的半导体, 其自旋-谷耦合特性对自旋电子学和谷电子学的研究具有重要的科学价值^[11,12]. 然而本征的 MoS₂ 是非磁性的, 这限制了其在自旋电子学领域的应用, 因此室温 MoS₂ 基磁性半导体的研究有利于自旋纳米器件的实现, 同时也将丰富人们对电子和磁性之间关系的认识, 拓展磁性理论. 元素掺杂是使半导体材料改性的常用手段, 在过去的几十年中, 通常用过渡族金属替代传统半导体中的阳离子来实现的稀磁半导体引起了广泛关注^[13], 掺杂过渡族金属可以将铁磁性引入单层 MoS₂, 这为获得二维磁性半导体提供了新

* 宁夏全职引入高层次人才项目 (批准号: 2025BEH04007) 和宁夏自然科学基金 (批准号: 2024AAC03012) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: nxupfc@163.com

机遇,拓展了 MoS₂ 在磁学领域的应用. Fan 等^[14] 研究表明,掺杂 Mn, Zn, Cd 等过渡族金属可以使 MoS₂ 产生磁性,其磁性来源于掺杂金属或 Mo 原子中未配对电子的自旋. Addou 等^[15] 研究发现,通过控制掺杂 Mn 原子的浓度可以调控 MoS₂ 的室温铁磁性, Mn 原子引入的电子与 S-p 电子产生了耦合. Komsa 等^[16] 报道称,电子辐射有助于在 MoS₂ 中掺杂其他元素, Mo 的 p/d 电子与过渡族金属 d 电子之间的长程相互作用将增强材料的居里温度 (Curie temperature, T_C). Maity 等^[17] 报道了 V 掺杂单层 MoS₂ 的电子结构,电子结构的调节和载流子浓度的增大是实现基于 MoS₂ 磁性半导体的有效方法. 虽然筛选掺杂元素^[18], 金属和非金属元素共掺^[19], 利用栅极偏置控制掺杂金属元素的自旋态^[20] 等手段可以在 MoS₂ 半导体中实现磁性,但较低的 T_C 限制了 MoS₂ 磁性半导体进一步的开发和应用,而且过多的掺杂元素容易在母体中形成团簇,导致非本征磁性的出现. 此外,掺杂元素的聚集容易形成电子空穴对的复合中心,不利于 MoS₂ 光催化性能的提升^[21]. 众所周知,二维材料在制备的过程中由于缺陷、晶格失配以及母体与衬底之间不同的热膨胀系数等因素,样品中通常有应变的存在^[22-24]. 事实上,应变已被广泛应用于调节半导体的电子结构、提高载流子浓度和调控电荷输运等特性^[25,26]. 有趣的是,应变工程对半导体的掺杂有益,可以控制半导体中铁磁性与反铁磁性之间的转换^[27,28]. Dai 等^[29] 预测,应变可以调节 InMoTe₃ 单层材料中的磁耦合机制和 T_C . Wang 等^[30] 通过对单层 MoS₂ 施加应变,调控晶格中缺陷之间的磁耦合作用,提升了 MoS₂ 材料的热导率. Pan 等^[31,32] 利用第一性原理计算研究了应变对 Fe, Mn 等过渡族金属掺杂单层 MoS₂ 的磁学性质,应变导致晶格畸变,从而使掺杂元素的 d 电子轨道发生自旋劈裂和晶场劈裂,缺陷能级的位置对 MoS₂ 材料的磁学性质有重要的影响. 鉴于单层 MoS₂ 的电子结构和物理性质对应变敏感且其自身具有优异的机械柔韧性,研究应变对过渡族金属掺杂 MoS₂ 电子结构和磁性的影响值得关注.

本文采用第一性原理计算方法系统研究了应变对 Co 掺杂单层 2H-MoS₂ 体系的电子结构、磁学性质和光学性质的影响. 研究发现,应变不仅能调节 Co_{Mo} 缺陷产生局域磁矩的大小,还可以调节局域磁矩的空间分布、能级的顺序以及电子对能级

的占据情况,磁耦合相互作用随应变在-9%—9% 范围内振荡,3% 应变下磁矩之间的 FM 耦合强度最大,磁矩之间的耦合机制可以用 d-p-d 超交换作用和 d-d 直接交换作用模型解释. 此外,拉伸应变可以进一步提升 Co_{Mo} 体系在可见光区和红外光区的光学性能.

2 研究方法 with 模型构建

MoS₂ 主要以 3 种不同的晶相形式存在,即 2H 相、3R 相和 1T 相,对应的空间群分别为 $P3m1$, $P63/mmc$ 和 $R3m$. 3R 相和 1T 相这两种结构在热辐照下可以转化为 2H 相^[33],因此本文选择 2H 相的单层 MoS₂ 作为研究体系. 单层 MoS₂ 的原胞包含两个 S 原子和一个 Mo 原子,将其进行 $5 \times 5 \times 1$ 扩展,就得到了包含 75 个原子的 MoS₂ 超晶胞,为避免层间镜像的相互作用,我们在沿该二维模型的垂直方向加了 200 nm 的真空层. 图 1(a) 分别是单层 MoS₂ 的俯视图 (上) 和侧视图 (下),绿色、黄色、蓝色小球分别代表 Mo, S, Co 原子. 用一个 Co 原子替代图 1(a) 中标号为 1 的 Mo 原子,就得到了包含一个 Co_{Mo} 缺陷的 MoS₂ 超晶胞结构, Co 原子位于 6 个近邻的 S 原子 (nearest neighbor S atoms, N S) 构成的三棱柱结构的中心位置,见图 1(b). MoS₂ 晶体结构的第一布里渊区为正六边形结构,根据对称性,我们选取倒格空间能量的计算路径为 $G \rightarrow M \rightarrow K \rightarrow G$,其中 G 为第一布里渊区的中心位置, M 为第一布里渊区边界的中心, K 为第一布里渊区边界的交点,见图 1(c).

本文采用基于密度泛函理论的 CASTEP 软件,所有计算均采用先结构优化再进行单点能量计算的方式进行. 电子波函数采用平面波波函数展开,平面波波函数的截止能量为 500 eV,自洽精度为 1.0×10^{-6} eV/atom,电子之间的交换关联泛函采用广义梯度近似 (generalized gradient approximation, GGA) 下的 Perdew Burke Ernzerhof 泛函 (PBE, GGA-PBE),选取的赝势为适合高精度计算磁性和光学性质的 OTFG 形式的超软赝势. 采用 Monk-Horst-Pack 方案^[34] 将布里渊区内能量计算的 k 网格点选取为 $5 \times 5 \times 1$. 为了修正 GGA-PBE 交换关联泛函对 MoS₂ 半导体禁带宽度低估的问题,对 Mo-d 电子和 S-p 电子的库仑位能进行加 U 处理,测试结果表明 S-p 电子的 U

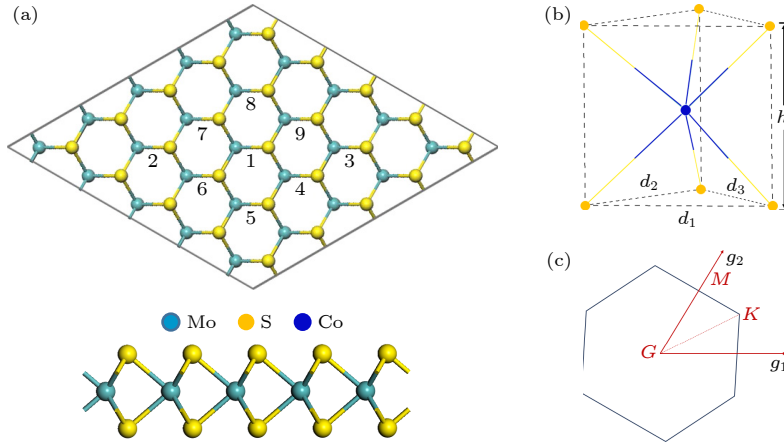


图1 晶体结构示意图 (a) 单层 $2H\text{-MoS}_2$ 超晶胞结构的俯视图(上)和侧视图(下); (b) Co和6个N S构成的三棱柱结构; (c) 第一布里渊区和高对称点, 红线表示 k 空间取点路径

Fig. 1. Diagram of crystal structure: (a) Monolayer $2H\text{-MoS}_2$ on vertical (top) and side (bottom) views under strain-free condition; (b) trigonal prismatic coordination of six S atoms; (c) Brillouin zone and high symmetry points, the red line means the taking-point path in k -space.

值 (U_{S-p}) 对体系晶体结构和电子结构的影响可以忽略, Mo-d 电子的 U 值为 $U_{\text{Mo-d}} = 2.5$ eV 时, 计算所得 MoS_2 的晶格常数 $a_0 = 0.316$ nm, 禁带宽度 $E_g = 1.78$ eV, 与实验值符合较好 [35]. 掺杂体系中 Co-d 电子的 U 值采用计算软件默认值, $U_{\text{Co-d}} = 2.5$ eV.

本文对 MoS_2 施加的是双轴应变, 通过改变晶格常数的大小来实现, 其定义为

$$\varepsilon = \frac{a - a_0}{a_0} \times 100\%, \quad (1)$$

式中, a 和 a_0 分别表示有应变时和无应变时的晶格常数, $\varepsilon > 0$ 和 $\varepsilon < 0$ 分别表示拉伸应变和压缩应变. 根据已有的理论和实验结果 [30,36-38], 本文将应变的范围控制在 -9% — 9% .

3 磁学性质

3.1 磁矩和磁耦合

首先计算了包含一个 Co_{Mo} 缺陷 MoS_2 超晶胞结构的磁矩分布, 如图 2 所示. Co_{Mo} 体系中, Co 原子周围有 6 个 N S 原子和 6 个近邻的 Mo 原子 (nearest neighbor Mo atoms, N Mo), Co 原子替代图 1(a) 中 1 号 Mo 原子时, 6 个 N Mo 为图 1(a) 中的 4, 5, 6, 7, 8, 9 号 Mo 原子, 6 个 N S 有 3 个在 MoS_2 的上 S 原子层 (S_1, S_2, S_3), 3 个位于下 S 原子层 (S_4, S_5, S_6), 见图 3(a).

从图 2 可以看出, -9% — 6% 应变范围, 一个

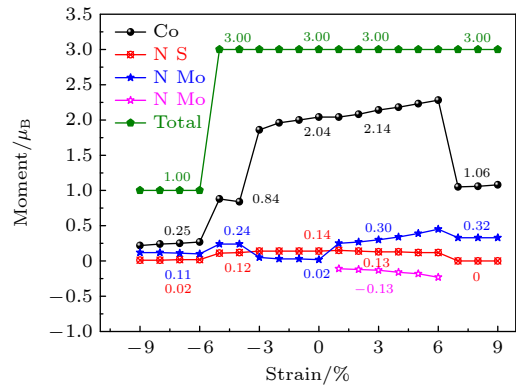


图2 不同应变下 Co_{Mo} 体系的磁矩分布

Fig. 2. Magnetic moment distribution of Co_{Mo} system under different strains.

Co_{Mo} 缺陷产生总磁矩的大小为 $1.00 \mu_B$, 磁矩由 Co, N S 和 N Mo 产生, 此应变范围内 6 个 N S 产生磁矩的大小相等, 6 个 N Mo 产生磁矩的大小也相等, 磁矩的分布具有对称性, 见图 3(b). 以 -7% 应变下的 Co_{Mo} 体系为例, 此时 Co 原子产生磁矩的大小为 $0.25 \mu_B$, 一个 N S (N Mo) 产生磁矩的大小为 $0.02 \mu_B$ ($0.11 \mu_B$), N S 产生的磁矩较小, 磁矩主要分布在 Co 和 6 个 N Mo 上; -5% — 9% 应变范围内, 一个 Co_{Mo} 缺陷产生总磁矩的大小为 $3.00 \mu_B$, 磁矩由 Co, N S 和 N Mo 所贡献. 其中, -5% — 0% 和 7% — 9% 应变范围内, Co_{Mo} 体系产生的磁矩分布也具有对称性, 见图 3(c), (d), (f); 1% — 6% 应变范围内, Co_{Mo} 体系产生的磁矩分布不再具有对称性, 从图 3(e) 可以看出, Mo_4 和 Mo_5 产生了自旋向上的磁矩, 而 Mo_6 , Mo_7 , Mo_8 和 Mo_9 产生了

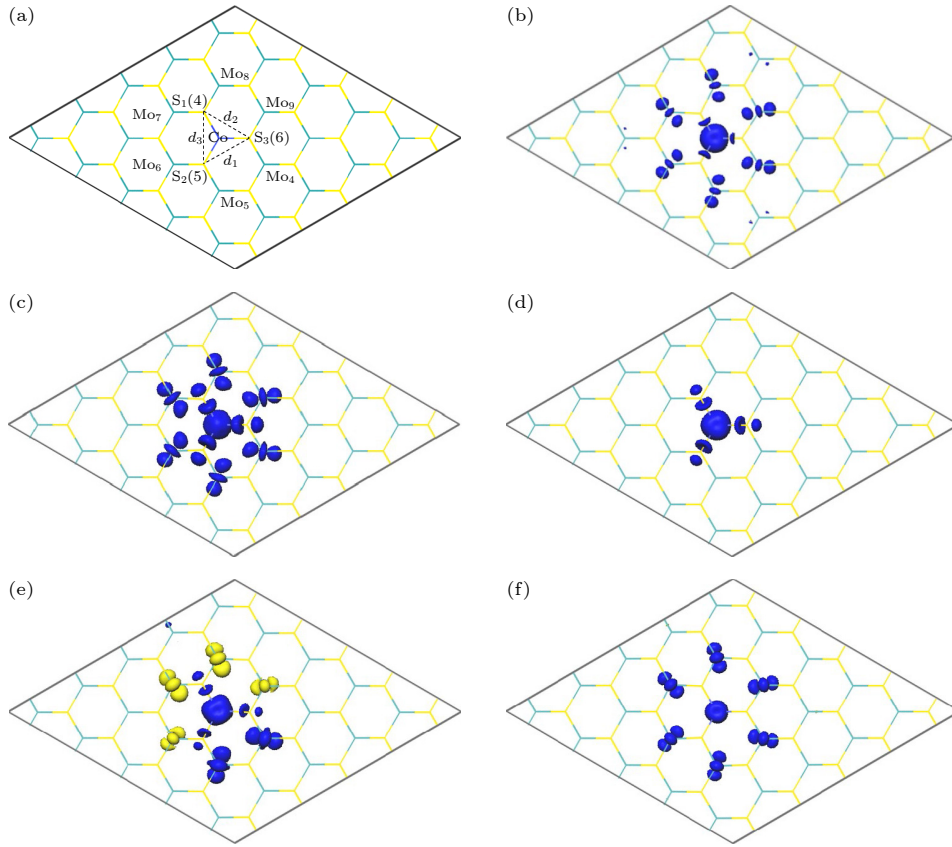


图 3 (a) CoMo_6 体系的晶体结构; 不同应变下 CoMo_6 体系的自旋密度空间分布图 (b) -9% — -6% 应变; (c) -5% — -4% 应变; (d) -3% — 0% 应变; (e) 1% — 6% 应变; (f) 7% — 9% 应变, 蓝色表示自旋向上, 黄色表示自旋向下

Fig. 3. (a) Schematic diagram structure of CoMo_6 system; the spatial distribution of spin density in CoMo_6 system under different strains: (b) -9% — -6% strain; (c) -5% — -4% strain; (d) -3% — 0% strain; (e) 1% — 6% strain; (f) 7% — 9% strain, the blue and yellow parts denote the spin-up and spin-down spatial net spin electron density, respectively.

自旋向下的磁矩. 以 3% 应变下的 CoMo_6 体系为例, 此时 Co 原子产生磁矩的大小为 $2.14 \mu_{\text{B}}$, 每个 N S 产生的磁矩为 $0.13 \mu_{\text{B}}$, Mo_4 和 Mo_5 产生的磁矩均为 $0.30 \mu_{\text{B}}$, 而 Mo_6 , Mo_7 , Mo_8 和 Mo_9 产生的磁矩均为 $-0.13 \mu_{\text{B}}$, 总磁矩的大小为 $3.00 \mu_{\text{B}}$; 在 7% — 9% 应变范围内, CoMo_6 缺陷产生的磁矩主要由 Co 和 6 个 N Mo 产生, 6 个 N S 对磁矩的贡献为零, 见图 2. 以 8% 应变下的 CoMo_6 体系为例, 此时 Co 原子产生的磁矩为 $1.06 \mu_{\text{B}}$, 每个 N Mo 产生的磁矩为 $0.32 \mu_{\text{B}}$, 每个 N S 产生的磁矩为零, 总磁矩的大小为 $3.00 \mu_{\text{B}}$, 磁矩保持了空间分布的对称性, 见图 3(f).

根据 Co 原子产生磁矩的大小, 将应变分为 5 个区间: 在 -9% — -6% 应变范围内为 Z_1 区间 (Zone 1, Z_1), Z_1 区间内 Co 产生的磁矩较小, 由 -9% 应变下的 $0.22 \mu_{\text{B}}$ 增至 -6% 应变下的 $0.27 \mu_{\text{B}}$; 在 -5% — -4% 应变范围内称为 Z_2 区间, Z_2 区间内 Co 产生的磁矩有所增加, -5% (-4%) 应变下 Co

产生的磁矩为 $0.88 \mu_{\text{B}}$ ($0.84 \mu_{\text{B}}$); 在 -3% — 0% 应变范围内称为 Z_3 区间, Z_3 区间内 Co 产生的磁矩增大为 $2.00 \mu_{\text{B}}$ 左右, 由 -3% 应变下的 $1.86 \mu_{\text{B}}$ 增至 0% 应变下的 $2.04 \mu_{\text{B}}$; 在 1% — 6% 应变范围内称为 Z_4 区间, Z_4 区间内 Co 产生的磁矩由 1% 应变下的 $2.04 \mu_{\text{B}}$ 增至 6% 应变下的 $2.28 \mu_{\text{B}}$; 在 7% — 9% 应变范围内称为 Z_5 区间, Z_5 区间内 Co 产生的磁矩又降低到 $1.00 \mu_{\text{B}}$ 左右, 7% , 8% 和 9% 应变下 Co 产生的磁矩分别是 $1.05 \mu_{\text{B}}$, $1.06 \mu_{\text{B}}$ 和 $1.08 \mu_{\text{B}}$. 从后文的分析可知, 这 5 个区间 CoMo_6 体系的晶体结构和电子结构不同, 对磁矩的大小、分布和磁矩之间的耦合特性有重要的影响.

均匀掺杂是保证磁性半导体材料性能稳定、可重复并具备实际应用价值的关键前提. 不均匀掺杂不仅会削弱材料的本征磁性, 还会影响材料的电输运性质和自旋调控能力. Co 属于磁性原子, 过高的浓度掺杂容易在 MoS_2 母体中团聚引起非本征磁性的产生, 同时也会形成电子空穴对复合中心从而

影响其光学性能. 研究表明^[39,40], 低浓度掺杂通常会提高材料的迁移率, 而高浓度掺杂则因缺陷的增多增大了载流子与晶格的散射作用, 从而抑制了迁移率, 掺杂浓度的控制对 MoS₂ 的磁、光性能至关重要. 实验上采用化学气相沉积和水热法等方法可以制备过渡族金属均匀掺杂的 MoS₂ 半导体, 同时掺杂后 MoS₂ 的晶体结构不会发生显著的破坏或畸变, 过渡族金属在 Mo 位点的掺杂浓度可以达到 9%^[40-42]. 另外, 研究 Co_{Mo} 缺陷产生局域磁矩之间的耦合特性, 应当避免第一性原理计算中镜像缺陷之间不合理的相互作用对计算结果的影响, 因此, 两个 Co_{Mo} 缺陷之间的距离不应该超过掺杂体系晶格尺寸的一半.

基于以上考虑, 我们在包含 75 个原子的 MoS₂ 超晶胞中引入两个 Co_{Mo} 缺陷, 并设计了两种结构: 用两个 Co 原子替代图 1(a) 中的 1 号和 2 号 Mo 原子, 记为 SI 结构; 用两个 Co 原子替代图 1(a) 中的 2 号和 3 号 Mo 原子, 记为 SII 结构. 零应变下, SI 和 SII 结构中两个 Co 原子之间的距离分别为 0.55 nm 和 1.10 nm, 此时 Co 原子在 Mo 位点的掺杂浓度为 8%. FM 耦合体系中两个 Co 原子的初始自旋方向相同, 反铁磁 (antiferromagnetic, AFM) 耦合体系中两个 Co 原子的初始自旋方向相反. Co_{Mo} 缺陷的磁耦合特性可以根据 FM 耦合状态下体系的总能量 (E_{FM}) 和 AFM 耦合状态下体系的总能量 (E_{AFM}) 的能量差来判断, 定义:

$$\Delta E = E_{\text{AFM}} - E_{\text{FM}}, \quad (2)$$

若 $\Delta E > 0$, 表明 Co_{Mo} 缺陷产生的局域磁矩之间为 FM 耦合, 反之为 AFM 耦合. 利用平均场理论和 Heisenberg 模型^[43] 可以估算 FM 耦合体系的 T_C :

$$T_C = \frac{2\Delta E}{3k_B x}, \quad (3)$$

式中, k_B 为玻尔兹曼常数, x 为 Co 在 Mo 位点的掺杂浓度, SI 和 SII 结构中 $x = 8$.

图 4 给出了 SI 和 SII 结构的 ΔE 随应变的变化趋势, ΔE 越大表明磁矩之间的耦合强度越大, 相应的磁耦合状态也就越稳定. 可以看出, 两种结构在 Z_1 , Z_3 和 Z_4 区间, Co_{Mo} 缺陷产生局域磁矩之间的耦合倾向于 FM 耦合, SI (SII) 结构在 3% 应变下的 ΔE 达到了 352.8 meV (344.4 meV), 利用 (3) 式计算得到 SI(SII) 结构的 T_C 为 343 K (332 K), 说明此应变下对实现高 T_C 的 MoS₂ 基磁性半导体是极其有利的. SI 和 SII 结构在 Z_2 和 Z_5 区间的 $\Delta E < 0$, 说明此时 Co_{Mo} 缺陷产生局域磁矩之间的耦合倾向于 AFM 耦合, 不利于 MoS₂ 基磁性半导体的实现, 虽然两种结构在 Z_1 区间的 $\Delta E > 0$, 但 ΔE 的数值较小, 磁矩之间的 FM 耦合强度较小, 因此对 MoS₂ 基磁性半导体的实现, Z_1 , Z_2 和 Z_5 属于应变禁止区间. 0% 应变下一个 Co_{Mo} 缺陷产生总磁矩的大小为 3.00 μ_B , 且磁矩之间具有 FM 耦合特性的这一结论与 Mishra 等^[44,45] 的计算结果相符.

3.2 电子结构和晶体结构

材料的物理特性受材料电子结构的影响, 而材料的电子结构又和构成材料的元素种类和晶体结构有密切的关系, 本节讨论 Co_{Mo} 体系的晶体结构、电子结构和磁学性质之间的关系. 图 5 给出了 0% 应变下本征 MoS₂ 和不同应变下 Co_{Mo} 体系的能带结构图. 图 5(a) 显示, 本征 MoS₂ 的带隙为 1.78 eV, 价带顶和导带底位于倒格空间的高

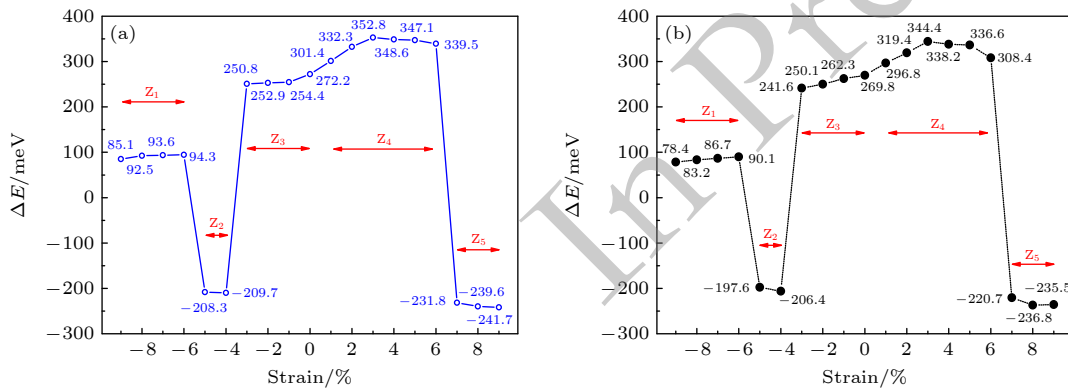


图 4 (a) SI 和 (b) SII 在不同应变下的 ΔE

Fig. 4. ΔE of (a) SI and (b) SII under different strains, respectively.

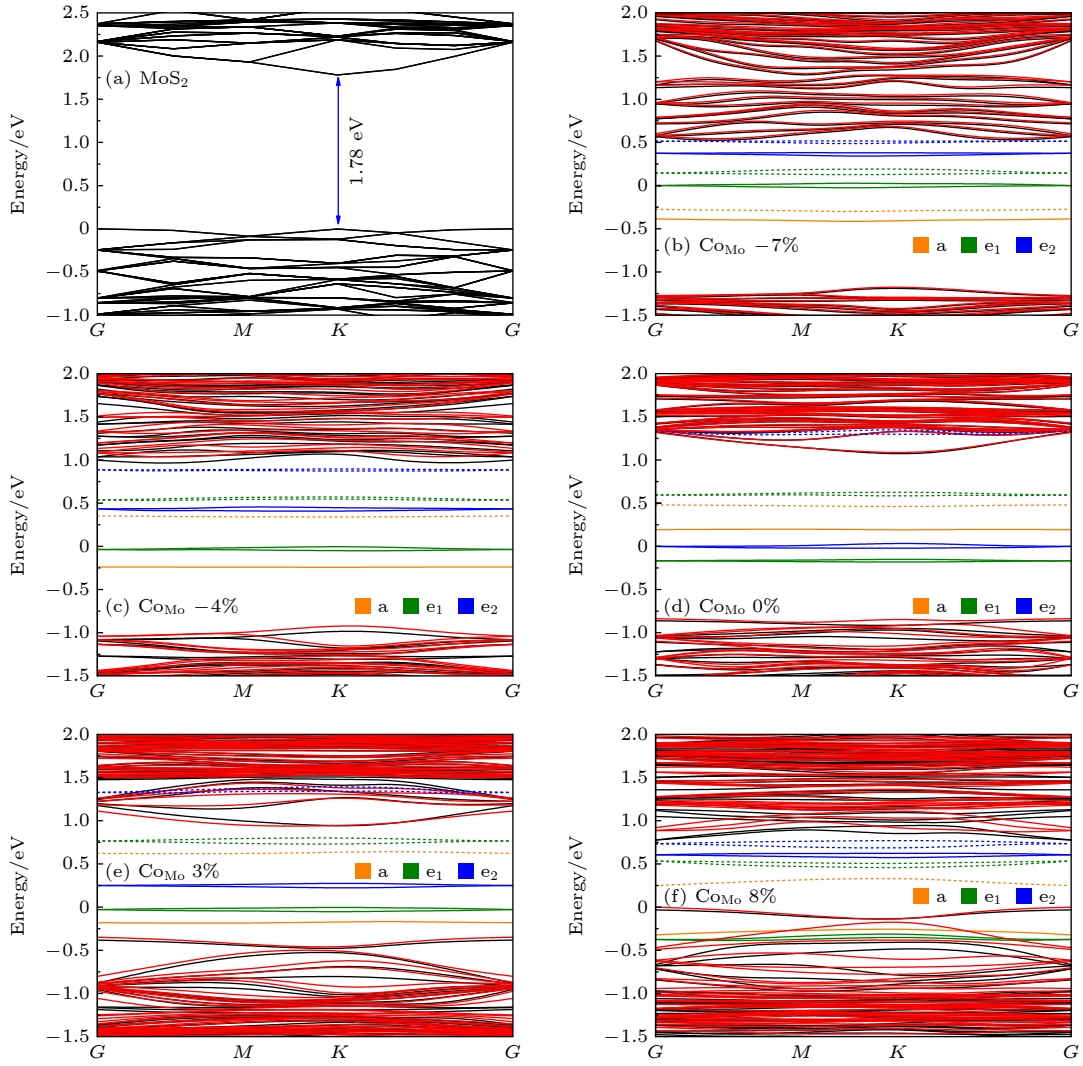


图 5 不同应变下的能带结构 (a) 未施加应变本征 MoS₂; (b) -7% 应变下的 CoMo₀ 体系; (c) -4% 应变; (d) 0% 应变; (e) 3% 应变; (f) 8% 应变; 红色和黑色线分别表示自旋向上和自旋向下能级

Fig. 5. Band structures under different strains: (a) Pristine MoS₂ without strain, and CoMo₀ systems under (b) -7% strain; (c) -4% strain; (d) 0% strain; (e) 3% strain; (f) 8% strain; the red and black lines represent the spin-up and spin-down energy levels, respectively.

对称 K 点, 单层 MoS₂ 属于直接带隙半导体材料. 图 5(b)–(f) 显示, CoMo₀ 体系的价带顶和导带底之间有杂质能级的出现, 此杂质能级由 CoMo₀ 缺陷引入. 在 CoMo₀ 体系中, Co 原子位于由 6 个 N S 构成的三棱柱中心, 具有 C_{3v} 点群对称性, CoMo₀ 缺陷态在 C_{3v} 晶场的作用下劈裂 (晶场劈裂) 成 3 组: 单态 a (d_{z^2}) 能级、双重简并态 e_1 (d_{xy, x^2-y^2}) 能级和 e_2 ($d_{xz, yz}$) 能级 [45,46]. d_{z^2} 电子轨道的波瓣指向三棱柱上下两个底面的中心, d_{xy, x^2-y^2} 电子轨道的波瓣指向三棱柱 3 条棱的中间位置, $d_{xz, yz}$ 电子轨道的波瓣指向三棱柱上下两个底面三角形边的中间位置, 不同应变下三棱柱结构的变化对 a , e_1 和 e_2 能级的顺序和位置有影响.

图 5(b) 给出了 -7% 应变下 CoMo₀ 体系的能带图. 可以看出, 杂质能级发生了自旋劈裂, 各能级位置顺序从低到高排布为 a_+ , a_- , e_{1+} , e_{1-} , e_{2+} , e_{2-} (此处及下文中的下标“+”和“-”分别表示自旋向上和自旋向下), 表明此应变下自旋劈裂能要比晶场劈裂能小, CoMo₀ 体系呈现出低自旋的排列方式. Co 原子的电子组态为 $[Ar]3d^74s^2$, Mo 原子的电子组态为 $[Kr]4d^55s^1$, 可以看出 Co 原子比 Mo 原子多 3 个 d 电子, Co 原子与 6 个 N S 成键后, 这 3 个 d 电子占据杂质能级形成缺陷态, 因此 -7% 应变下 CoMo₀ 缺陷的电子结构为 $a_+^1 a_-^1 e_{1+}^1 e_{1-}^0 e_{2+}^0 e_{2-}^0$ (此处及下文中上标的数字表示相应能级中电子占据数), a 能级上两个电子的自旋方向相反, 此时

Co_{Mo} 体系产生总磁矩的大小为 $1.00 \mu_{\text{B}}$. 为了研究各能级的成份, 给出 -7% 应变下 Co_{Mo} 体系的态密度 (density of states, DOS). 从图 6(a) 可以看出: Co_{Mo} 体系的总态密度 (total DOS, TDOS) 在费米能级处自旋向上电子占据数多于自旋向下电子占据数, 表明体系中产生了净磁矩; 图 6(b) 为 Co 原子的投影态密度 (projected DOS, PDOS) 图, 可以看出 Co-d 电子对 a, e_1 和 e_2 能级的态密度均有贡献; 图 6(c) 表明 a, e_1 和 e_2 能级的态密度也有 6 个 N S-p 电子的贡献, 相比于 Co-d 电子, 其态密度数值较小, 因此 -7% 应变下 N S 对磁矩的贡献较小; 图 6(d) 表明, 6 个 N Mo 仅对 a 和 e_1 能级的态密度有贡献, 由于 -7% 应变下 Co_{Mo} 体系的磁矩由 e_{1+} 能级上的电子产生, 因此 Mo-d 电子对磁矩也有贡献, 图 3(b) 显示了 Co, N S 和 N Mo 产生磁矩的分布. Z_1 区间内, Co_{Mo} 体系的电子结构相似, 其总磁矩的大小和分布基本相同.

图 5(c) 是 -4% 应变下 Co_{Mo} 体系的能带图, 可以看出此应变下 a_+ 和 e_{1+} 能级的位置发生了变化, a_+ 和 e_{1+} 能级位于零点费米能级以下, 此时 Co_{Mo} 缺陷的电子结构可以表示为 $a_+^1 e_{1+}^2 a_-^0 e_{2+}^0 e_{1-}^0 e_{2-}^0$,

产生大小为 $3.00 \mu_{\text{B}}$ 的总磁矩. 图 7(a) 为 -4% 应变下 Co_{Mo} 体系的 TDOS 图, 零点费米能级以下的 a_+ 和 e_{1+} 能级被自旋向上的电子满占据, 表明 Co_{Mo} 体系有净磁矩的产生. 图 7(b), (c) 表明 Co-d 电子和 N S-p 电子对 a, e_1 和 e_2 能级的态密度均有贡献, 产生自旋向上的净磁矩. 图 7(d) 显示, N Mo-d 电子只对 a, e_1 和 e_{2+} 能级的态密度有贡献, 对 e_{2-} 能级的态密度没有贡献. 图 3(c) 的自旋密度空间分布图显示出 -4% 应变下 Co, N S 和 N Mo 均产生了自旋向上的净磁矩, 每个 N Mo 产生的磁矩 ($0.24 \mu_{\text{B}}$) 大于每个 N S 产生的磁矩 ($0.12 \mu_{\text{B}}$). Z_2 区间内, Co_{Mo} 体系的电子结构相似, 其总磁矩的大小和分布基本相同.

图 5(d) 是 0% 应变下 Co_{Mo} 体系的能带图, 无应变时, e_{1+} 能级位于 e_{2+} 能级的下方, 零点费米能级跨过 e_{2+} 能级, 表明 e_{2+} 能级被电子半占据. 没有电子占据的 a 能级位于 e_{2+} 和 e_{1-} 能级之间, 且 a 能级和 e_1 能级位置相近. e_2 能级的自旋劈裂能较大, e_2 能级在倒格空间高对称 G 点的能量为 1.34 eV , 已处于导带中, Co_{Mo} 缺陷的电子结构可以表示为 $e_{1+}^2 e_{2+}^1 a_+^0 a_-^0 e_{1-}^0 e_{2-}^0$, e_{1+} 和 e_{2+} 能级被自旋向上的电

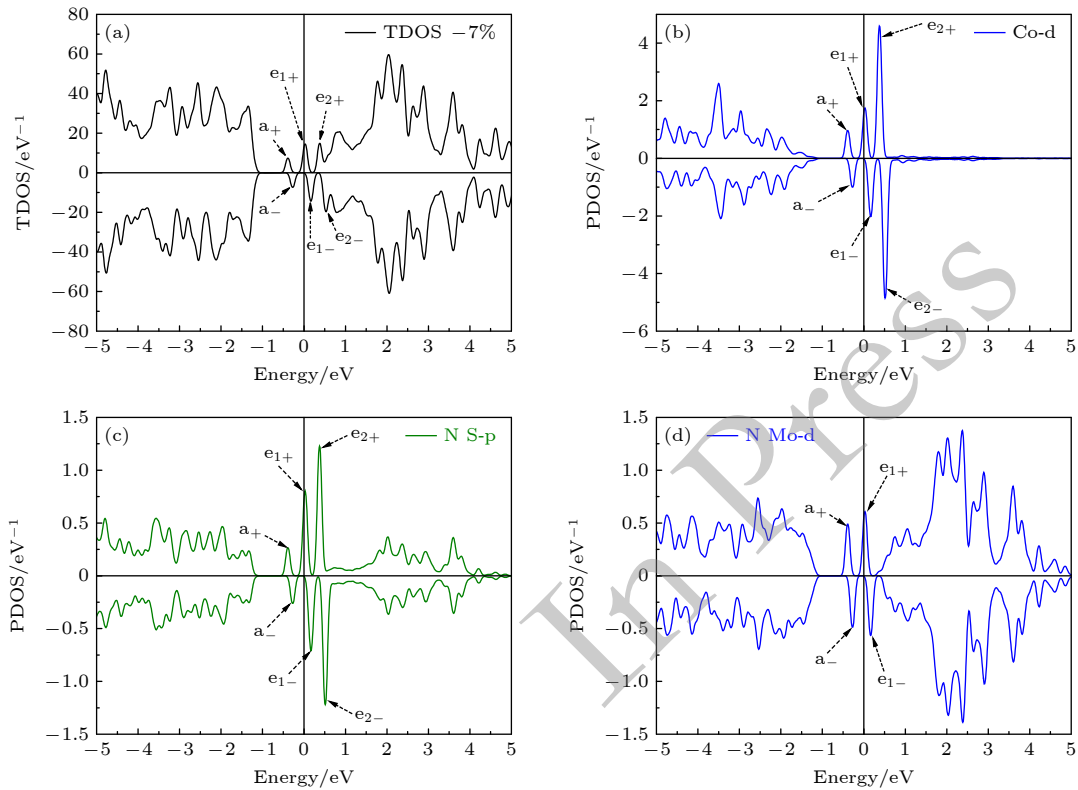


图 6 (a) -7% 应变下 Co_{Mo} 的 TDOS; (b) Co 的 PDOS; (c) N S 的 PDOS; (d) N Mo 的 PDOS

Fig. 6. DOS of Co_{Mo} system under -7% strain: (a) TDOS of Co_{Mo} ; (b) PDOS of Co; (c) PDOS of N S; (d) PDOS of N Mo.

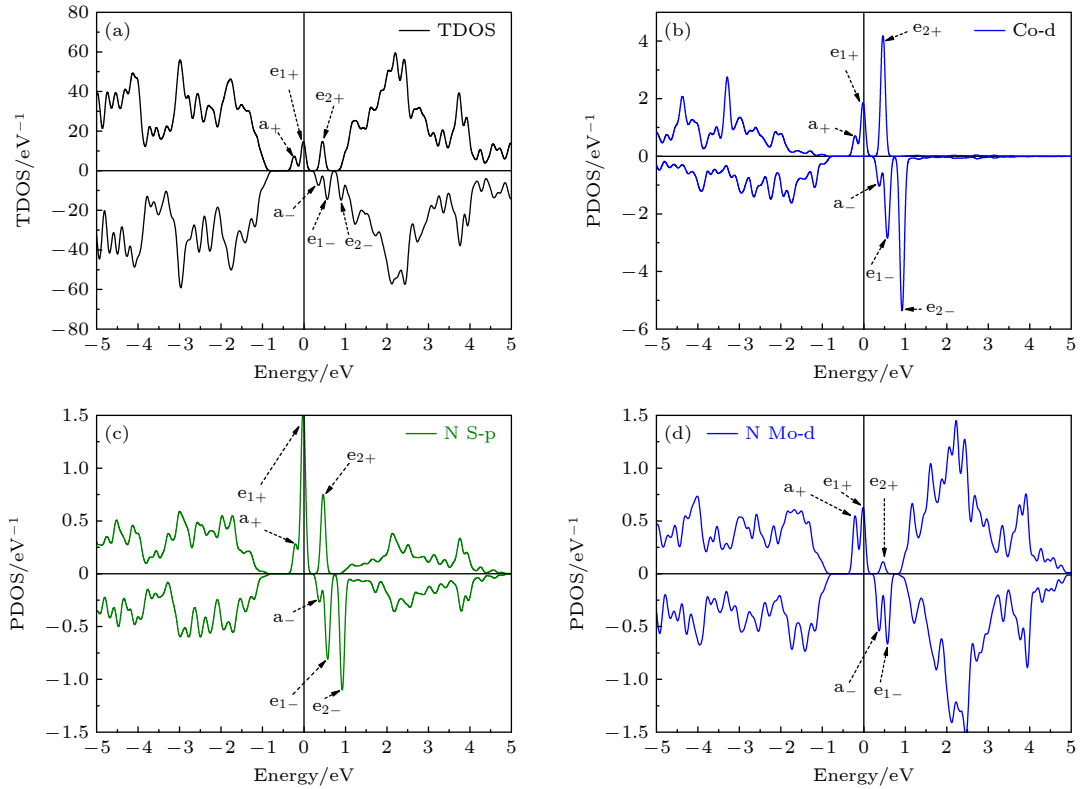


图 7 -4%应变下 CoMo 的 DOS (a) CoMo 的 TDOS; (b) Co 的 PDOS; (c) N S 的 PDOS; (d) N Mo 的 PDOS
 Fig. 7. DOS of CoMo system under -4% strain: (a) TDOS of CoMo ; (b) PDOS of Co; (c) PDOS of N S; (d) PDOS of N Mo.

子所占据, CoMo 缺陷产生总磁矩的大小为 $3.00 \mu_B$. 图 8(a) 为 0% 应变下 CoMo 体系的 TDOS 图, 可以看出 e_{2+} 和 a_+ 能级的态密度糅杂在一起构成了零点费米能级处自旋向上的态密度峰, a_- 和 e_{1-} 能级的态密度糅杂在一起构成了自旋向下的态密度峰, 由于 e_2 能级位于导带之中, 因此在 1.34 eV 处自旋向下的态密度相比于自旋向上的态密度有了一个小突起. 图 8(b), (c) 表明, Co-d 电子和 N S-p 电子构成了 a, e_1 和 e_2 能级的态密度, 但 N S-p 电子的态密度数值较小. 图 8(d) 表明 a 和 e_1 能级的态密度有 N Mo-d 电子贡献的成份, 但对 e_{1+} 和 e_2 能级的态密度没有贡献, 虽然 N Mo-d 电子对 e_{2+} 能级的态密度也有贡献, 但其数值很小, 远不及 Co-d 电子和 N S-p 电子对 e_{2+} 能级态密度的贡献, 因此 0% 应变下 CoMo 体系的磁矩主要由 Co 和 N S 产生, 图 3(d) 的自旋密度空间分布显示出了磁矩分布, 0% 应变下每个 N S 产生磁矩的大小为 $0.14 \mu_B$, 而每个 N Mo 产生的磁矩只有 $0.02 \mu_B$. Z_3 区间内, CoMo 体系的电子结构相似, 其总磁矩的大小和分布基本相同.

图 5(e) 是 3% 应变下 CoMo 体系的能带图, 可

以看出此应变下被电子满占据的 a_+ 和 e_{1+} 能级位于零点费米能级的下方 (同 -4% 应变下的 CoMo 体系相似), 没有电子占据的 a 能级处于零点费米能级上方的 e_{2+} 和 e_1 能级之间, a_+ 能级的自旋劈裂能较大, e_2 能级在倒格空间高对称点 G 点的能量为 1.33 eV, 处于导带之中, CoMo 缺陷的电子结构可以表示为 $a_+^1 e_{1+}^2 e_{2+}^0 a_-^0 e_{1-}^0 e_{2-}^0$, a_+ 和 e_{1+} 能级被自旋向上的电子所占据, CoMo 缺陷产生总磁矩的大小为 $3.00 \mu_B$. 图 9(a) CoMo 体系的 TDOS 图显示自旋向上的 a_+ , e_{1+} 和 e_{2+} 能级的态密度峰均位于 a_- , e_{1-} 和 e_{2-} 能级态密度峰的左侧, 表明 CoMo 体系的自旋劈裂能比晶场劈裂能大, 能级呈现出了高自旋的排列方式. 图 9(b), (c) 为 Co-d 电子和 N S-p 电子的 PDOS 图, 表明 Co-d 电子和 N S-p 电子对 a_- , e_{1-} 和 e_{2-} 能级的态密度有贡献, 对 a_+ 能级的态密度没有贡献. 图 9(d) 为 N Mo-d 电子的 PDOS, 由于此应变下 $\text{Mo}_{4(5)}$ 产生的净自旋方向向上, 而 $\text{Mo}_{6(7, 8, 9)}$ 产生的净自旋方向向下, 见图 3(e), 因此 6 个 N Mo-d 电子 PDOS 有所不同. 从图 9(d) 可以看出, N $\text{Mo}_{4(5)}$ -d 电子对 a, e_{1-} 和 e_{2-} 能级的态密度有贡献, 对 e_{1+} 能级的态密度没有贡献, N

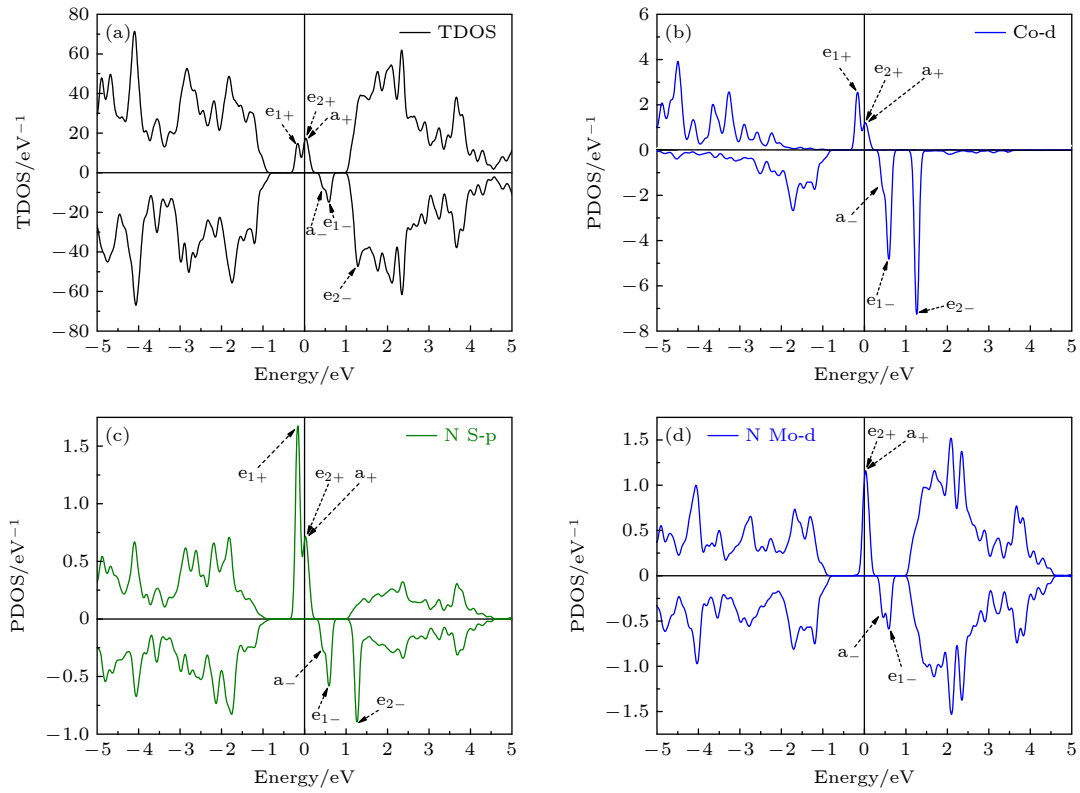


图 8 0%应变下 CoMo 的 DOS (a) CoMo 的 TDOS; (b) Co 的 PDOS; (c) N S 的 PDOS; (d) N Mo 的 PDOS
 Fig. 8. DOS of CoMo system under 0% strain: (a) TDOS of CoMo ; (b) PDOS of Co; (c) PDOS of N S; (d) PDOS of N Mo.

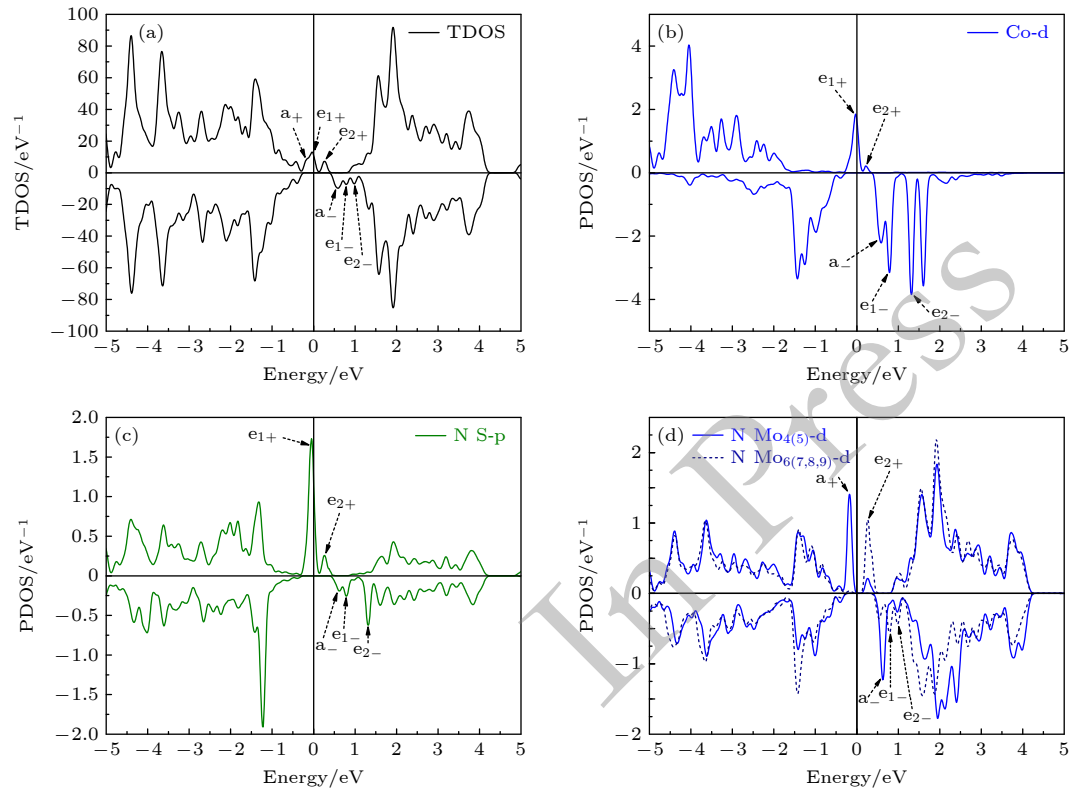


图 9 3%应变下 CoMo 的 DOS (a) CoMo 的 TDOS; (b) Co 的 PDOS; (c) N S 的 PDOS; (d) N Mo 的 PDOS
 Fig. 9. DOS of CoMo system under 3% strain: (a) TDOS of CoMo ; (b) PDOS of Co; (c) PDOS of N S; (d) PDOS of N Mo.

Mo_{6(7, 8, 9)}-d 电子对 a₋, e₁₋ 和 e₂₋ 能级的态密度有贡献, 对 a₊ 和 e₁₊ 能级的态密度没有贡献, N Mo₄₍₅₎ 产生了自旋向上 0.60 μ_B 的磁矩, N Mo_{6(7, 8, 9)} 产生了自旋向下 -0.52 μ_B 的磁矩, 6 个 N Mo 产生的磁矩之和基本为零, 3% 应变下 CoMo₆ 体系的总磁矩主要由 Co 和 6 个 N S 产生. Z₄ 区间内, CoMo₆ 体系的电子结构相似, 其总磁矩的大小和分布基本相同.

图 5(f) 是 8% 应变下 CoMo₆ 体系的能带图, e₁₊ 和 a₊ 能级是被电子满占据的, 且 e₁₊ 能级位于 a₊ 能级的下方, 0.25 eV 处的 a 能级位于 a₊ 和 e₁₋ 能级之间, 此时 CoMo₆ 缺陷的电子结构可以表示 e₁₊²a₊¹a₋⁰e₁₋⁰e₂₊⁰e₂₋⁰, 产生大小为 3.00 μ_B 的总磁矩. 图 10(a) 为 CoMo₆ 体系的 TDOS, 零点费米能级附近自旋向上的态密度数值大于自旋向下态密度数值, 体系有净磁矩的产生. 图 10(b) 为 CoMo₆ 体系中 Co-d 电子和 N Mo-d 电子的 PDOS 图, Co-d 电子对 e₁ 和 e₂₊ 能级的态密度有贡献, 而 a 和 e₂₋ 能级的态密度则主要由 N Mo-d 电子构成, Co 和 N Mo 对磁矩有贡献. N S 的态密度对称分布, 且对 a, e₁ 和 e₂ 能级的态密度没有贡献, 表明 8% 应变下 N S 不产生磁矩. Z₅ 区间内, CoMo₆ 体系的电子结构相似, 其总磁矩的大小和分布基本相同.

以上分析表明, 不同应变区间, CoMo₆ 体系的电子结构不同, 杂质能级之间的相对位置也不一样, Co, N S 和 N Mo 对杂质能级态密度的贡献也有所区别. 显然, CoMo₆ 体系的电子结构受晶体结构的影响, 而 CoMo₆ 缺陷产生局域磁矩之间的耦合特性又和电子结构密切相关.

CoMo₆ 体系中, 6 个 N S 构成了三棱柱结构, 见图 1(b) 和图 3(a). 采用 d₁, d₂ 和 d₃ 来表示结构优

化后图 1(b) 中上(下)层 3 个 S 原子之间的距离, 其中 d₁ 为 S₂₍₅₎ 和 S₃₍₆₎ 两个 S 原子之间的距离, d₂ 表示 S₃₍₆₎ 和 S₁₍₄₎ 两个 S 原子之间的距离, d₃ 表示 S₁₍₄₎ 和 S₂₍₅₎ 两个 S 原子之间的距离, 用 h 表示结构优化后三棱柱上下由 S 原子构成的底面之间的层间距离, 用 V 来表示结构优化后由 6 个 N S 构成的三棱柱的体积. 一般来说, 结构优化后 d₁, d₂, d₃, h 和 V 的数值相比于结构优化前对应 d₁₀, d₂₀, d₃₀, h₀ 和 V₀ 的数值不同, 为了分析结构优化对此三棱柱结构的影响, 我们定义表征此三棱柱结构的特征数值: R₁ = d₁/d₁₀, R₂ = d₂/d₂₀, R₃ = d₃/d₃₀, R₄ = h/h₀, R₅ = V/V₀. 从图 11 可以看出, Z₁ 区间 R₁ = R₂ = R₃ < 1, R₄ > 1, R₅ < 1, 表明 Z₁ 区间上下两层内的 S 原子相互靠近, 同时上下 S 原子层之间的层间距变大, 三棱柱的体积变小, 受此晶场的影响, CoMo₆ 缺陷的电子结构为 a₊¹a₋¹e₁₊⁰e₁₋⁰e₂₊⁰e₂₋⁰, 可以看出 a 能级的位置最低, e₂ 能级的位置最高, 能级处于低自旋态的排列方式. Z₂ 区间, R₁ = R₂ = R₃ < 1, 但其数值相比与 Z₁ 区间变大, 表明上下两层 S 原子相互靠近的程度较低, 同时 R₄ < 1, 表明上下 S 原子层的层间距变小. 由于 d_{z²} 电子轨道的波瓣指向三棱柱上下两个底面的中心, d_{xy, x²-y²} 电子轨道的波瓣指向 3 条棱的中间, 因此 Z₂ 区间 d_{z²} 和 d_{xy, x²-y²} 电子轨道受晶场的作用变强, 使得 a 和 e₁₋ 能级的能量上升, Z₂ 区间 CoMo₆ 缺陷的电子结构变为 a₊¹e₁₊²a₋⁰e₂₊⁰e₁₋⁰e₂₋⁰. 当应变到达 Z₃ 区间, R₄ 的数值进一步减小, 晶场对 d_{z²} 电子轨道的影响进一步增强, 使得 a 能级的能量上升到 e₂₊ 能级之上, 此时 CoMo₆ 缺陷的电子结构变为 e₁₊²e₂₊¹a₊⁰a₋⁰e₁₋⁰e₂₋⁰, 能级处于高自旋态的排列方式. Z₄ 区间 R₄ 仍然

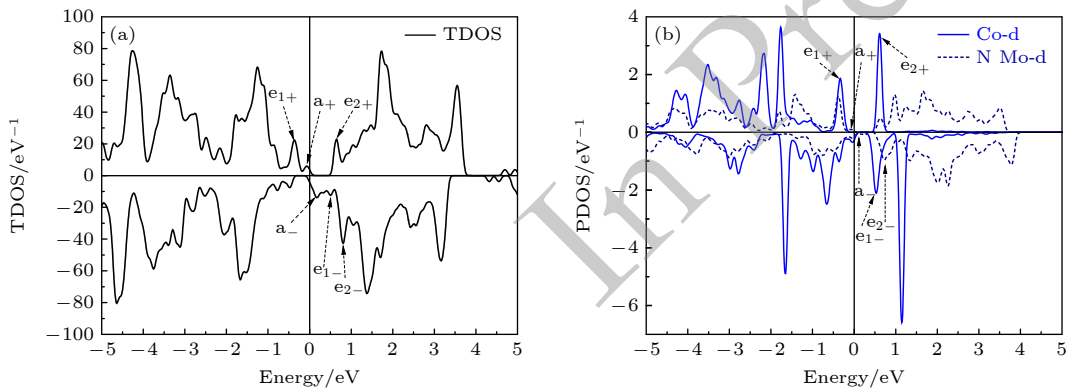


图 10 8% 应变下 CoMo₆ 的 DOS (a) CoMo₆ 的 TDOS; (b) Co 和 N Mo 的 PDOS

Fig. 10. DOS of CoMo₆ system under 8% strain: (a) TDOS of CoMo₆; (b) PDOS of Co and N Mo.

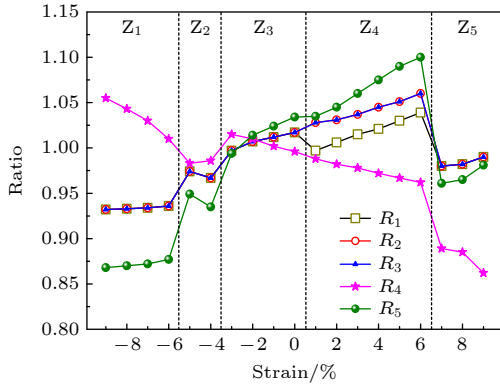


图 11 不同应变下晶体结构的特征数值

Fig. 11. Characterization values of structure under different strains.

有变小的趋势, 且 $R_1 \neq R_2 = R_3 > 1$, 虽然上下 S 原子层的层间距变小, 但 S 原子之间的距离相比与优化前变大, S 原子之间相互远离, 此应变区间晶场对 d_{z^2} 电子轨道的影响变小, 使得 a_+ 能级轨道的能量变为最低, Co_{Mo} 缺陷的电子结构变为 $a_+^1 e_{1+}^2 e_{2+}^0 a_-^0 e_{1-}^0 e_{2-}^0$. Z_5 区间, R_1, R_2, R_3, R_4 和 R_5 的数值相比与 Z_4 区间都变小, 此时晶场对 d_{z^2} , d_{xy, x^2-y^2} 和 $d_{xz, yz}$ 电子轨道的影响都有增强的趋势, 晶场劈裂和自旋劈裂综合作用的结果使得 Co_{Mo} 缺陷的电子结构变为 $e_{1+}^2 a_+^1 a_-^0 e_{1-}^0 e_{2+}^0 e_{2-}^0$.

3.3 磁耦合特性分析

图 12 给出了不同应变下 a, e_1 和 e_2 的能级位置和各能级上电子的占据情况, 同一应变区间内各能级的位置稍有变化, 但能级的相对位置保持不变. Co_{Mo} 体系产生局域磁矩之间的耦合特性与电子结构相关, 磁耦合强度受各能级位置的影响. Z_1 区间的电子结构为 $a_+^1 a_-^1 e_{1+}^0 e_{1-}^0 e_{2+}^0 e_{2-}^0$, e_{1+} 轨道跨过费米能级, 不同 Co_{Mo} 缺陷 e_{1+} 能级上电子之间的交换不需要改变电子的自旋方向, 因此 Z_1 区间 Co_{Mo} 缺陷产生局域磁矩之间的耦合是 FM 耦合. Z_2 区间的电子结构为 $a_+^1 e_{1+}^2 a_-^0 e_{2+}^0 e_{1-}^0 e_{2-}^0$, 由于 e_{1+} 能级是电子满占据的, 因此缺陷态上电子之间的交换只能以 $e_{1+} \rightarrow a_-$ 方式进行, 此时电子的自旋方向发生改变, Co_{Mo} 缺陷产生局域磁矩之间的耦合是 AFM 耦合. Z_3 区间的电子结构为 $e_{1+}^2 e_{2+}^1 a_+^0 a_-^0 e_{1-}^0 e_{2-}^0$, e_{2+} 能级跨过费米能级, 因此一个 Co_{Mo} 缺陷 e_{2+} 能级上的电子可以直接向另一个 Co_{Mo} 缺陷 e_{2+} 能级跃迁而不需要改变自旋方向, Co_{Mo} 缺陷产生局域磁矩之间的耦合是 FM 耦合.

Z_4 区间的电子结构为 $a_+^1 e_{1+}^2 e_{2+}^0 a_-^0 e_{1-}^0 e_{2-}^0$, 虽然 e_{1+} 能级是电子满占据的, 但位于 e_{1+} 能级之上的 e_{2+} 能级是没有电子占据的, 因此, e_{1+} 能级上的电子向 e_{2+} 能级跃迁不需要改变电子的自旋方向, Co_{Mo} 缺陷产生局域磁矩之间的耦合是 FM 耦合. Z_5 区间的电子结构为 $e_{1+}^2 a_+^1 a_-^0 e_{1-}^0 e_{2+}^0 e_{2-}^0$, a_+ 能级只能容纳一个电子且是被电子满占据的, a_- 能级位于 a_+ 能级之上且没有被电子占据, 因此不同缺陷态上电子的交换以 $a_+ \rightarrow a_-$ 的方式进行, 电子的自旋方向改变导致了 Co_{Mo} 缺陷产生局域磁矩之间的耦合是 AFM 耦合. 显然, Co_{Mo} 缺陷产生局域磁矩之间的磁耦合类型和缺陷态的电子结构相关.

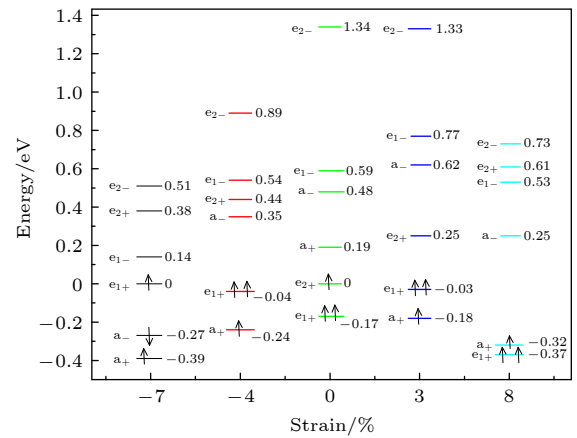


图 12 不同应变下能级位置和能级上电子的占据情况, 向上箭头表示自旋向上电子, 向下箭头表示自旋向下电子
Fig. 12. Energy level positions and electron occupancy under different strains, the upward arrows and downward arrows indicate spin-up and spin-down electrons, respectively.

从图 4 还可以看出, 虽然 Z_1, Z_3 和 Z_4 区间 Co_{Mo} 体系属于 FM 耦合体系, 但磁耦合强度不同, Z_1 区间的 ΔE 最小, 而 Z_4 区间的 ΔE 最大, 这一点可以从各缺陷态的能级位置进行说明. 从图 12 可以看出, -7% 应变下 e_{1+} 和 e_{1-} 能级分别位于 0 eV 和 0.14 eV 处, 若电子从 e_{1+} 能级向 e_{1-} 能级跃迁实现 AFM 耦合需要克服的能量差为 0.14 eV . 0% 应变下 e_{2+} 和 a_- 能级分别位于 0 eV 和 0.48 eV 处, 若电子以 $e_{2+} \rightarrow a_-$ 跃迁实现 AFM 耦合需要克服的能量差为 0.48 eV . 同样的分析可以看出, 3% 应变下 Co_{Mo} 体系实现 AFM 耦合电子跃迁需要克服的能量差为 0.62 eV . 实现 AFM 耦合电子跃迁克服的能量差越大, 电子的跃迁越困难, 意味着 FM 耦合也就越稳定, 因此 Z_4 区间 Co_{Mo} 体系的 FM 耦合最稳定, Z_1 区间 Co_{Mo} 体系两种磁序的能量差最小.

磁耦合相互作用可以用 d-p-d 超交换作用和 d-d 直接交换作用模型来解释. 不同应变下 Co_{Mo} 缺陷在零点费米能级处的能级主要由 Co-d 电子和 N S-p 电子所占据, 见图 6—图 9, 因此缺陷态之间电子的交换既有 d-p-d 电子的超交换作用, 也有 d-d 电子的直接交换作用, d-d 直接交换作用距离短, 而 d-p-d 超交换作用具有长程性^[47], 两种交换机制同时存在. 从图 4 可以看出, SI 和 SII 两种结构的 ΔE 相差不大, 局域磁矩之间的磁耦合强度受距离影响较小, 表明起主导作用的是 d-p-d 超交换作用.

4 光学性质

应变的施加对半导体的电学、磁学及光催化等特性有重要的影响^[48,49], 在二维材料如石墨烯和 TMDs 中, 研究应变调控对其物理性能的影响受到了广泛的关注^[50,51]. Behera 等^[52] 研究发现, 当施加压缩应变达到 3% 时, GaN 材料由间接带隙转变为直接带隙, 当施加拉伸应变达到 12.72% 时, 其带隙为零, 具有金属性. Yang 等^[53] 研究了应变对单层 WSe_2 带隙类型和宽度的影响, 当施加拉伸应变达到 13% 时, WSe_2 的带隙变为零, 而压缩应变可以使 WSe_2 的带隙类型发生转变. He 等^[54] 的研究表明, 应变的施加可以调节 MoS_2 的带隙宽度, 拉伸应变可以使单层 MoS_2 的激子共振峰发生红移. 鉴于应变对二维材料的带隙大小、能带类型和光学性质有重要的影响, 本节研究了应变对 Co 掺杂 MoS_2 光学性质的影响.

半导体的光学性质一般包括光学吸收谱、反射系数和复介电函数等, 光学吸收谱和反射系数可以

通过计算材料的复介电函数得到. 复介电函数的表达式如下:

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_1(\omega) + i\varepsilon_2(\omega), \quad (4)$$

式中 ω 表示光子的频率, i 为虚数单位, $\varepsilon_1(\omega)$ 和 $\varepsilon_2(\omega)$ 分别为复介电函数的实部和虚部. 虚部可通过价电子在占据轨道和非占据轨道之间的跃迁来得到, 实部则由虚部所满足的 Kramers-Krönig 色散关系^[55] 确定, 公式如下:

$$\varepsilon_1(\omega) = 1 + \frac{2}{\pi} p \int_0^{\infty} \frac{s\varepsilon_2(s)}{s^2 - \omega^2} ds, \quad (5)$$

$$\varepsilon_2(\omega) = -\frac{2\omega}{\pi} p \int_0^{\infty} \frac{\varepsilon_1(s)}{s^2 - \omega^2} ds, \quad (6)$$

$$p \int_0^{\infty} = \lim_{\delta \rightarrow 0} \left(\int_0^{\omega - \delta} + \int_{\omega + \delta}^{\infty} \right), \quad (7)$$

式中, p 为积分主值, s 为积分变量, δ 为频率增量. 利用复折射率和复介电函数之间的关系和 Kramers-Krönig 色散关系可以得到光学吸收谱的吸收系数 $\alpha(\omega)$ 的表达式:

$$[n(\omega) + ik(\omega)]^2 = \varepsilon_1(\omega) + i\varepsilon_2(\omega), \quad (8)$$

$$\alpha(\omega) = 2\omega k(\omega)/c, \quad (9)$$

式中, c 为光速, 普通折射率 $n(\omega)$ 为复折射率的实部, 决定光衰减的 $k(\omega)$ 为复折射率的虚部.

图 13(a) 给出了 0% 应变下本征 MoS_2 和 Co_{Mo} 体系的光学吸收谱, 可以看出, 在光子波长大于 457 nm 的可见光区和红外光区, Co_{Mo} 体系光学吸收谱的吸收幅度大于未掺杂的本征 MoS_2 体系, 表明 Co_{Mo} 缺陷的引入可以提升 MoS_2 对可见光区和红外光区光子的吸收, Co_{Mo} 体系光学吸收谱的吸收边落在远红外光区, 发生了红移现象, 提升了

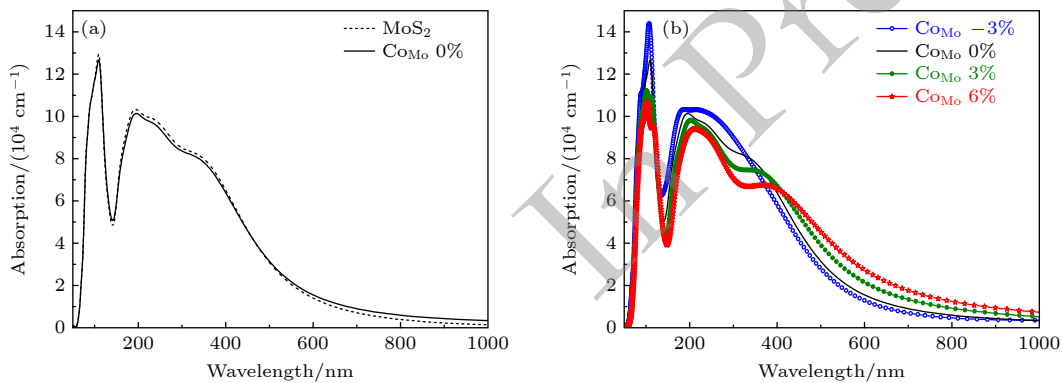


图 13 光学吸收谱 (a) 0% 应变下 MoS_2 和 Co_{Mo} 的光学吸收谱; (b) 不同应变下 Co_{Mo} 的光学吸收谱
Fig. 13. Absorption spectra: (a) MoS_2 and Co_{Mo} under 0% strain; (b) Co_{Mo} system under different strains.

Co_{Mo} 体系对长波光子的吸收, 增强了 MoS_2 的光催化特性. 当光子波长为 155—457 nm, Co_{Mo} 体系的吸收幅度反而降低, 在光子波长小于 155 nm 的紫外光区, 两者的吸收曲线基本重合. 另外, Co_{Mo} 体系和 MoS_2 体系在 107 nm 和 195 nm 处均出现了两个吸收峰, 其吸收幅度基本相同. Co_{Mo} 缺陷的引入对 MoS_2 光学吸收谱的影响与掺杂前、后电子结构的变化有关. 从图 5(d) 可以看出, Co_{Mo} 体系在本征 MoS_2 的价带顶和导带底之间出现了分立的杂质能级, 跨过零点费米能级的 e_{2+} 能级被电子半占据, e_{2+} 和 a_+ 能级之间的能量差为 0.19 eV, 表明 Co_{Mo} 缺陷的引入使得掺杂 MoS_2 体系的有效禁带宽度变低, e_{2+} 能级上的电子吸收能量较小的光子便可跃迁到 a_+ 能级从而实现光吸收, 这是 0% 应变下 Co_{Mo} 体系光学吸收谱的吸收边发生红移的原因. 从图 8(a) 可以看出, Co_{Mo} 体系在零点费米能级附近出现了几个小的态密度峰, 此态密度峰的出现使得价带顶和导带底分别移动到了 -0.82 eV 和 1.02 eV 处, 图 13(a) 中 MoS_2 体系和 Co_{Mo} 体系在 107 nm 和 195 nm 处出现的两个吸收峰是电子在不同能级之间的跃迁所致. 波长为 107 nm 光子的能量为 11.51 eV, 对于 $\text{MoS}_2(\text{Co}_{\text{Mo}})$ 体系, 此吸收峰对应 -9.73 eV (-11.32 eV) 能级附近的电子向 1.78 eV (0.19 eV) 处空带的跃迁. 波长为 195 nm 光子的能量为 6.43 eV, 对于 $\text{MoS}_2(\text{Co}_{\text{Mo}})$ 体系, 此吸收峰对应 -4.65 eV (-6.24 eV) 能级附近的电子向 1.78 eV (0.19 eV) 处空带的跃迁. 虽然吸收峰的位置与电子从价带向空带的跃迁有关, 但吸收峰所在的能量位置不能简单的理解为电子跃迁的能级差, 电子跃迁过程中的驰豫效应会使吸收峰的位置有偏差.

图 13(b) 给出了 -3%, 0%, 3% 和 6% 应变下 Co_{Mo} 体系的光学吸收谱, 可以看出, -3% 应变下 Co_{Mo} 体系在波长大于 329 nm 的可见光区和红外光区对光子的吸收幅度相比 0% 应变体系要小, 表明施加压缩应变不利于 Co_{Mo} 体系在可见光区和红外光区光学性能的提升. 当对 Co_{Mo} 体系施加拉伸应变 (3% 和 6%) 时, Co_{Mo} 体系在可见光区和红外光区的吸收幅度具有明显的增大, 且其吸收幅度的提升与拉伸应变的大小正相关. 从图 5(e), (f) 可以看出, 3% (8%) 应变下, Co_{Mo} 体系的价带顶和导带底分别位于 -0.35 eV (0 eV) 和 0.94 eV (0.78 eV) 处, 表明拉伸应变可导致价带顶和导带底之间的能

量间距缩小, Co_{Mo} 缺陷引入的杂质能级位于价带顶和导带底之间, 因此价带顶和各杂质能级之间的能量间距有缩小的趋势, 杂质能级作为电子跃迁的桥梁, 将使得电子在不同能级之间跃迁对所需要吸收光子的能量变小, 这必然提升了拉伸应变体系在可见光区和红外光区对光子的吸收幅度. 从图 13(b) 还可以看出, 拉伸应变体系在 363 nm 附近出现了一个新的吸收峰, 这与拉伸应变下能带的非局域化程度变高有关, 见图 5. 拉伸应变的施加导致化学键键长变长, 化学键的刚性减弱, 降低了晶格的整体刚性, 这会引入振动频率的降低, 从而使得吸收峰在拉伸应变下向长波光区移动^[56]. Co_{Mo} 体系在 195 nm 和 363 nm 处的吸收峰均有随拉伸应变的增大其峰值位置向长波光区移动的趋势. 可见应变对 Co_{Mo} 体系的电子结构和各能级位置有调控作用, 可以通过对半导体施加应变来调控其光学性能.

图 14(a) 给出了复介电函数实部随入射光子能量的变化曲线, 能量为零的位置对应的数值为半导体材料的静态介电常数. 半导体在电场作用下会产生电极化, 材料的电极化程度越大, 体系对电荷、空穴等载流子的束缚能力也就越强, 此时复介电函数实部的数值也就越大. 计算结果显示, 0% 应变下 Co_{Mo} 体系的静态介电常数为 5.35, 当对 Co_{Mo} 体系施加压缩应变时, 静态介电常数变小, -3% 应变下 Co_{Mo} 体系的静态介电常数为 5.18, 说明施加压缩应变不利于提高材料的电极化能力. 当对 Co_{Mo} 体系施加拉伸应变时, 介电常数随着应变的增大而增大, 3% 和 6% 应变下 Co_{Mo} 体系的静态介电常数分别为 5.66 和 6.28, 表明施加拉伸应变能有效提升 Co_{Mo} 体系的电极化能力, 这有利于光生电子空穴对的产生和分离, 从而提升材料的光催化特性. 不同应变下 Co_{Mo} 体系都有介电峰, 在介电峰左侧的低能量区, 实部曲线比较平缓, 而在介电峰右侧的高能量区, 实部曲线数值迅速降低. 应变从 -3% 增至 6% 的过程中, 介电峰的位置由 -3% 应变下的 2.28 eV 降低到 6% 应变下的 1.27 eV 处, 对应应变体系光学吸收谱的吸收边逐渐向长波方向移动. 应变的施加, 会导致晶体的晶格发生畸变, 电子云在畸变晶场的作用下使正负电荷中心发生相对位移从而产生位移极化现象^[21,32], 由拉伸应变引起的位移极化强度较大, 这使得 Co_{Mo} 体系的复介电函数实部具有较大的数值.

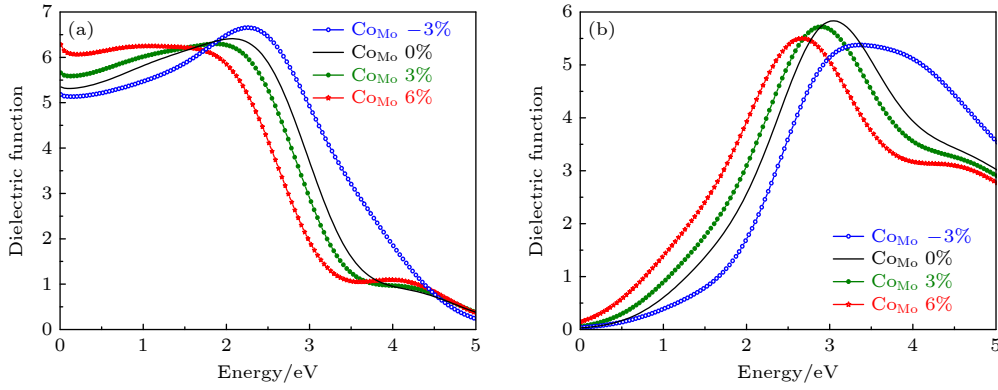


图 14 不同应变下 CoMo 体系的复介电函数 (a) 实部; (b) 虚部

Fig. 14. Complex dielectric function of CoMo system under different strains: (a) Real part; (b) imaginary part.

图 14(b) 给出了不同应变下 CoMo 体系复介电函数虚部随入射光子能量的变化曲线. 复介电函数的虚部反映了半导体对光子的吸收, 虚部的数值越大, 半导体内部处于激发态电子的数目也就越多, 电子进行下一步跃迁的概率也就越大. 从图 14(b) 可以看出, 在 0—2.65 eV 能量区间, 6% 应变下 CoMo 体系虚部的数值最大, 此能量区间对应的是可见光区和红外光区, 表明 6% 应变下 CoMo 体系对可见光区和红外光区光子的吸收能力最优. -3% 应变下的 CoMo 体系在可见光区和红外光区虚部的数值是最小的, 表明压缩应变的施加不利于提升 CoMo 体系在低能光区的光学性能. 电荷的空间分离 (电子迁移率) 直接影响了半导体的光催化特性, Co 掺杂属于 n 型掺杂, 会在 MoS₂ 的母体中引入电子, 对 CoMo 体系施加拉伸应变, 会改变价带顶和导带底电子的弥散程度, 电子的迁移率由于拉伸应变的施加而变大, 从图 5(e), (f) 可以看出, 拉伸应变下 CoMo 体系的能带起伏较大, 说明处于这些能带上的电子有效质量较小, 非局域化程度高, 组成这些能带的原子轨道扩展性较强 [57], 电子较大的迁移率导致了 CoMo 体系光催化效率的提升. 图 14(b) 显示, 3% 和 6% 应变下 CoMo 体系的虚部在入射光子能量为零的位置其数值并不为零, 且数值提升很快, 其原因在于 Z₄ 区间, e_{1+} 能级在零点费米能级处, e_{2+} 能级接近零点费米能级, 电子在简并的杂质能级之间的跃迁不需要吸收光子即可进行, 此即电子的带内响应, 虽然电子的带内响应对半导体的光学性质有影响, 但起主要作用的是电子在不同能级之间的直接跃迁, 即带间跃迁 [58].

以上结果分析表明, 拉伸应变下 CoMo 体系复介电函数实部数值增大, 电子空穴对的分离效率提

高, CoMo 体系的光电转换效率得到了提升. CoMo 体系复介电函数虚部数值增大, 电子发生跃迁的概率较大, 对光子的吸收有利, CoMo 体系对可见光区和红外光区光子的吸收幅度增大. Co 掺杂有利于 MoS₂ 半导体光学性能的提升, 通过对 CoMo 体系施加拉伸应变, 其光学性能进一步增强. 实验上制备的 Co 掺杂 MoS₂ 纳米材料, 具有较低的电荷复合效率、更高的载流子迁移率和较长的载流子寿命, 使其具有优秀的光催化特性, 其结论与我们的计算结果相符 [42]. 显然, 通过 Co 掺杂和施加应变来改善 MoS₂ 半导体的磁学和光学性能是可行的.

5 结构稳定性分析

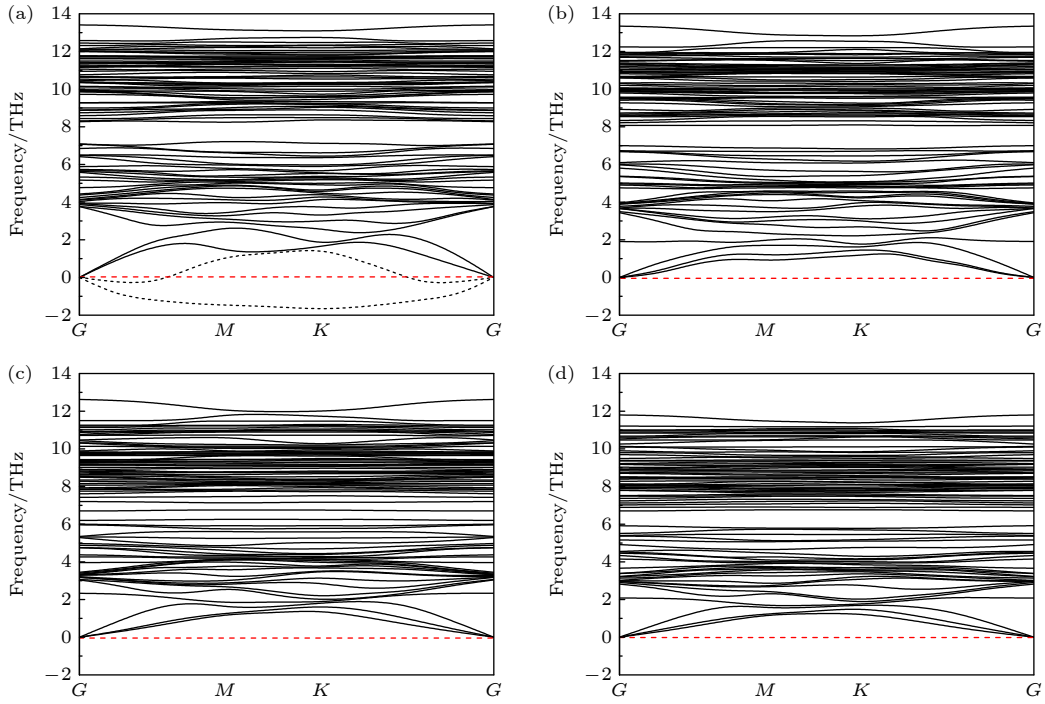
形成能是评估缺陷形成难易程度的重要指标, 缺陷的形成能越小说明缺陷的稳定性越高. 形成能可用如下公式计算:

$$E_f = E_{\text{defect}} - E_{\text{pristine}} - \mu_{\text{Co}} + \mu_{\text{Mo}}, \quad (10)$$

式中, E_f 表示 CoMo 缺陷的形成能, E_{defect} 和 E_{pristine} 分别表示是否包含一个 CoMo 缺陷 MoS₂ 体系的总能量, μ_{Co} 和 μ_{Mo} 分别为 Co 和 Mo 原子的化学势. 元素的化学势依赖于实验的生长条件, 富 Mo 条件下虽然 MoS₂ 容易在表面形成 S 空位, 但 Co 原子很难占据 S 空位与 Mo 原子形成化学键, 因此 Mo 的化学势采用如下公式:

$$\mu_{\text{Mo}} = E_{\text{MoS}_2} - E_{\text{S}_2}, \quad (11)$$

式中, E_{MoS_2} 和 E_{S_2} 分别表示一个 MoS₂ 原胞和一个 S₂ 分子的能量, 此时对应富 S 生长条件. 利用 (10) 式计算得到 CoMo 缺陷的形成能为 -0.18 eV, 说明 CoMo 缺陷是可以稳定存在的. 虽然 CoMo 缺

图 15 不同应变下 CoMo 体系的声子谱 (a) -4%; (b) -3%; (c) 6%; (d) 9%Fig. 15. Phonon dispersion relations of CoMo system under different strains: (a) -4%; (b) -3%; (c) 6%; (d) 9%.

陷的形成能为负值, 但也不能断定该掺杂体系晶格的动力学稳定性, 为此我们计算了不同应变下 CoMo 体系的声子谱. 从图 15(a) 可以看出, -4% 应变下 CoMo 体系的声子谱出现了虚频模式, 表明在此压缩应变下晶体处于动力学不稳定状态, 在外力的扰动下容易发生相变. 图 15(b)–(d) 分别为 -3%, 6% 和 9% 应变下 CoMo 体系声子谱, 三者在整个布里渊区内均无虚频模式, 我们认为, 在 -3%–9% 应变范围内 (Z_3 和 Z_4 区间), CoMo 体系具有优异的动力学稳定性^[59].

6 结 论

本研究运用基于密度泛函理论的第一性原理计算方法系统研究了应变对 Co 掺杂单层 MoS_2 的晶体结构、电子结构、磁学性质和光学性质的调控, 结论如下: 1) Z_1 区间 CoMo 缺陷产生 $1.00 \mu_B$ 的局域磁矩, 磁矩之间的耦合是 FM 耦合. Z_2, Z_5 区间 CoMo 缺陷产生 $3.00 \mu_B$ 的局域磁矩, 磁矩之间的耦合是 AFM 耦合. Z_3, Z_4 区间 CoMo 缺陷产生 $3.00 \mu_B$ 的局域磁矩, 磁矩之间的耦合是 FM 耦合. 磁矩之间的耦合主要由 d-p-d 超交换作用主导, 磁耦合类型和强度与 CoMo 缺陷的电子结构和缺陷能级的位

置有关, SI 和 SII 结构在 3% 应变下的 FM 耦合强度最大. 2) 不同应变下 CoMo 体系的电子结构受晶体结构的影响, 不同的晶场作用导致 a, e_1 和 e_2 能级的顺序和位置不同, 从而使得不同应变区间 CoMo 体系产生的局域磁矩、磁耦合类型和磁耦合强度不同. 同一应变区间内, CoMo 体系具有相似的能级顺序和能级位置, 磁矩的大小、磁耦合类型和磁耦合强度具有高度的相似性. 3) CoMo 缺陷引入的杂质能级使得电子的带间跃迁对所需要吸收光子的能量变小, CoMo 体系在可见光区和红外光区对光子的吸收幅度增大, 光学吸收谱的吸收边落在了远红外光区, 有效拓展了 CoMo 体系对光子的吸收范围. 拉伸应变进一步提升了 CoMo 体系在可见光区和红外光区的光学性能. 4) 拉伸应变可有效提升 CoMo 体系复介电函数实部和虚部的数值, 提高了 CoMo 体系光生电子空穴对的分离效率和光电转换能力, 而压缩应变则对 CoMo 体系光学性能的改善不利.

通过对不同应变下 CoMo 体系磁学和光学性质的研究分析, 我们认为把应变控制在具有优异动力学稳定性的 1%–6% 范围 (Z_4 区间) 内, 有利于具有高 T_C 和优异光学性能 MoS_2 基磁性半导体的实现, 可拓展其在自旋电子学、光电子学和光催化等领域的应用.

参考文献

- [1] Zhang Y W, Shen W, Wu S, Tang W J, Shu Y T, Ma K K, Zhang B T, Zhou P, Wang S 2022 *ACS Nano* **16** 19187
- [2] Ai R Q, Cui X M, Li Y, Zhuo X L 2025 *Nano-Micro Lett.* **17** 104
- [3] Wang Y, Kim J C, Li Y, Ma K Y, Hong S, Kim M, Sin H S, Jeong H Y, Chhowalla M 2022 *Nature* **610** 61
- [4] Pi L, Li L, Liu K, Zhang Q, Li H, Zhai T 2019 *Adv. Funct. Mater.* **29** 1904932
- [5] Qi W X, Dang W Q, Li J, Li B, Duan X D, Wu R X 2025 *Appl. Phys. Lett.* **126** 173102
- [6] Zhang Y W, Ye J, Matsuhashi Y, Iwasa Y 2012 *Nano Lett.* **12** 1136
- [7] Yu W J, Li Z, Zhou H L, Chen Y, Wang Y, Huang Y, Duan X F 2013 *Nat. Mater.* **12** 246
- [8] Tsai M L, Su S H, Chang J K, Tsai D S, Chen C H, Wu C, Li L J, Chen L J, He J H 2014 *ACS Nano* **8** 8317
- [9] Li H, Tsai C, Koh A L, Cai L L, Contryman A W, Fragapane A H, Zhao J H, Han H S, Manoharan H C, Abild-Pedersen F, Nørskov J K, Zheng X L 2016 *Nat. Mater.* **15** 48
- [10] Kaasbjerg K, Thygesen K S, Jacobsen K W 2012 *Phys. Rev. B* **85** 115317
- [11] Tongay S, Fan W, Kang J, Park J, Koldemir U, Suh J, Narang D S, Liu K, Ji J, Li J, Sinclair R, Wu J 2014 *Nano Lett.* **14** 3185
- [12] Wang J, Huang C, You Y, Guo Q, Xue G, Hong H, Jiao Q, Yu D, Du L, Zhao Y, Liu K 2022 *J. Phys. Chem. C* **126** 3797
- [13] Dietl T, Ohno H 2003 *MRS Bulletin* **28** 714
- [14] Fan Y H, Zhang J Y, Qiu Y Z, Zhu J, Zhang Y F, Hu G L 2017 *Comp. Mater. Sci.* **138** 255
- [15] Addou R, McDonnell S, Barrera D, Guo Z, Azcatl A, Wang J, Zhu H, Hinkle C L, Quevedo-Lopez M, Alshareef H N, Colombo L, Hsu J W P, Wallace R M 2015 *ACS Nano* **9** 9124
- [16] Komsa H P, Kotakoski J, Kurasch S, Lehtinen O, Kaiser U, Krashenninikov A V 2012 *Phys. Rev. Lett.* **109** 035503
- [17] Maity D, Yadav R K, Levi A, Sharma R, Ber E, Yalon E, Biroju R K, Vretenár V, Narayanan T N, Naveh D 2025 *Small Methods* **9** 2401938
- [18] Gao Y Q, Kelly P J 2023 *Phys. Rev. B* **108** 245421
- [19] Lin L, Guo Y P, He C Z, Tao H L, Huang J T, Yu W Y, Chen R X, Lou M S, Yan L B 2020 *Chin. Phys. B* **29** 097102
- [20] Stephanovich V A, Kirichenko E V, Engel G, Semenov Y G, Kim K W 2021 *Phys. Rev. B* **104** 094423
- [21] Zhang J Q, Lin X L, Tian W H, Ma W J, Zhang X, Ma X W, Zhu Q P, Hao R, Pan F C 2025 *J. Synth. Cryst.* **54** 617 (in Chinese) [张家琪, 林雪玲, 田文虎, 马文杰, 张秀, 马小伟, 朱巧萍, 郝睿, 潘凤春 2025 人工晶体学报 **54** 617]
- [22] Guan Z Y, Ni S 2020 *ACS Appl. Mater. Interfaces* **12** 53067
- [23] Guan Z Y, Lian C S, Hu S L, Ni S, Li J, Duan W H 2017 *J. Phys. Chem. C* **121** 3654
- [24] Guan Z, Ni S 2021 *ACS Appl. Electron. Mater.* **3** 3147
- [25] Lloyd D, Liu X, Christopher J W, Cantley L, Wadehra A, Kim B L, Goldberg B B, Swan A K, Bunch J S 2016 *Nano Lett.* **16** 5836
- [26] Choi M 2018 *Phys. Rev. Appl.* **9** 024009
- [27] Yan X P, Li P, Wei S H, Huang B 2021 *Chin. Phys. Lett.* **38** 087103
- [28] Lv H Y, Lu W J, Shao D F, Liu Y, Sun Y P 2015 *Phys. Rev. B* **92** 214419
- [29] Dai S L, Tian Z A, Qian G L, Liu Y T 2024 *Appl. Phys. Lett.* **125** 012405
- [30] Wang C Y, Li S R, Wang S F, Zhao P X, Zhuo R S 2022 *Physica E* **114** 115401
- [31] Lan W J, Li H X, Du T, Lin X L, Pan F C 2025 *Eur. Phys. J. B* **98** 24
- [32] Pan F C, Lan W J, Li H X, Lin X L 2025 *Physica B* **699** 416847
- [33] Kan M, Wang J Y, Li X W, Zhang S H, Li Y W, Kawazoe Y, Sun Q, Jena P 2014 *J. Phys. Chem. C* **118** 1515
- [34] Pack J D, Monkhorst H J 1977 *Phys. Rev. B* **16** 1748
- [35] Kadantsev E S, Hawrylak P 2012 *Solid State Commun.* **152** 909
- [36] Zheng H L, Yang B S, Wang D D, Han R L, Du X B, Yan Y 2014 *Appl. Phys. Lett.* **104** 132403
- [37] Choudhary M, Shital S, Yaakobovitz A, Niv A 2020 *Appl. Phys. Lett.* **117** 223102
- [38] Scalise E, Houssa M, Pourtois G, Afanasev V, Stesmans A 2012 *Nano Res.* **5** 43
- [39] Zhang Q F, Wang L L, Wang J, Yu X Z, Ge J M, Zhang H, Lu B G 2018 *J. Mater. Chem. A* **6** 9441
- [40] Sun X, Dai J, Guo Y Q, Wu C Z, Hu F T, Zhao J Y, Zeng X C, Xie Y 2014 *Nanoscale* **6** 8359
- [41] Zhao B J, Huo Z J, Li L J, Liu H J, Hu Z G, Wu Y C, Qiu H L 2023 *Nanomaterials* **13** 2520
- [42] Iqbal T, Basit A, Elgorban A M, AL-Shwaiman H A, Farooq M, Yousaf M, Afsheen S, Mushtaq A, Munir R M 2025 *J. Phys. Chem. Solids* **197** 112422
- [43] Seña N, Dussan A, Mesa F, Castaño E, González-Hernández G 2016 *J. Appl. Phys.* **120** 051704
- [44] Mishra R, Zhou W, Pennycook S J, Pantelides S T, Idrobo J C 2013 *Phys. Rev. B* **88** 144409
- [45] Cheng Y C, Zhu Z Y, Mi W B, Guo Z B, Schwingenschlögl U 2013 *Phys. Rev. B* **87** 100401(R)
- [46] Kang Y, Najmaei S, Liu Z, Bao Y, Wang Y, Zhu X, Halas N J, Nordlander P, Ajayan P M, Lou J, Fang Z 2014 *Adv. Mater.* **26** 6467
- [47] Sato K, Bergqvist L, Kudrnovsky J, Dederichs P H, Eriksson O, Turek I, Sanyal B, Bouzerar G, Katayama-Yoshida H, Dinh V A, Fukushima T, Kizaki H, Zeller R 2010 *Rev. Mod. Phys.* **82** 1633
- [48] Zhao S F, He L J, Li M S, Song M Z, Zhang J K, Li Z N 2022 *J. Ningxia Univ. (Nat. Sci. Ed.)* **43** 152 (in Chinese) [赵世丰, 何力军, 李美岁, 宋明泽, 张健康, 李志年 2022 宁夏大学学报(自然科学版) **43** 152]
- [49] Hu Y X, Li H P, Qiu K 2025 *Acta Phys. Sin.* **74** 177101 (in Chinese) [胡宇霄, 李海鹏, 仇康 2025 物理学报 **74** 177101]
- [50] Yuan L D, Li S S, Luo J W 2024 *Nat. Commun.* **15** 618
- [51] Jaikissoon M, Köroğlu C, Yang J A, Neilson K, Saraswat K C, Pop E 2024 *Nat. Electron.* **7** 885
- [52] Behera H, Mukhopadhyay G 2019 *Int. J. Mod. Phys. B* **33** 1950281
- [53] Yang C X, Zhao X, Wang T X, Wei S Y 2017 *J. Alloy. Compd.* **699** 291
- [54] He K, Poole C, Mak K F, Shan J 2013 *Nano Lett.* **13** 2931
- [55] Huang K 1988 *Solid State Physics* (Beijing: Higher Education Press) pp437—452 (in Chinese) [黄昆 1988 固体物理学(北京: 高等教育出版社) 第 437—452 页]
- [56] Chen J Y, Yan J K, Gan G Y 2019 *J. Spectrosc.* **2019** 6470601
- [57] Huang J G, Fang Y M, Jiang Y H, Zheng K, Chen K X, Cheng M J, Lin Q B 2025 *Acta Phys. Sin.* **74** 186302 (in Chinese) [黄俊刚, 方艺梅, 江银河, 郑凯, 陈凯轩, 程梅娟, 林秋

宝 2025 物理学报 74 186302]

71 096103]

[58] Pan F C, Lin X L, Wang X M 2022 *Acta Phys. Sin.* 71 096103 (in Chinese) [潘凤春, 林雪玲, 王旭明 2022 物理学报

[59] Xie Z X, Chen X K, Yu X, Deng Y X, Zhang Y, Zhou W X, Jia P Z 2023 *Comp. Mater. Sci.* 220 112041

Effect of biaxial strain on magnetic and optical properties in Co doped monolayer MoS₂ studied by the first-principles calculation*

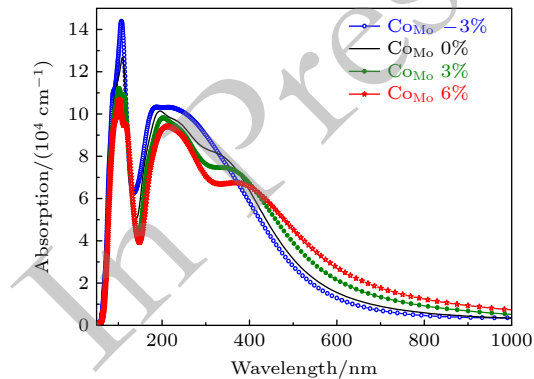
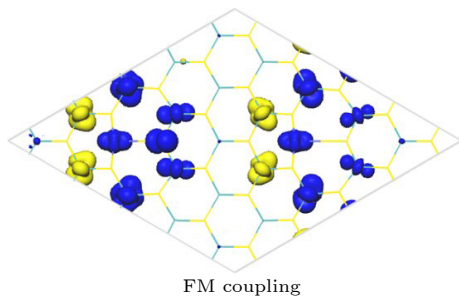
LIN Xueling WU Kaixin PAN Fengchun †

(School of Physics, Ningxia University, Yinchuan 750021, China)

(Received 18 January 2026; revised manuscript received 10 March 2026)

Abstract

It is scientifically significant to realize monolayer MoS₂-based magnetic semiconductors and to regulate the spin states of MoS₂ for the development and application of two-dimensional (2D) spintronic devices. In this work, we systematically studied the effects of biaxial strain on the electronic structure, magnetic and optical properties of Co doped monolayer MoS₂ (Co_{Mo}) systems using the first-principles calculations based on density functional theory (DFT). Our results indicate that the electronic structure, magnetic and optical properties of Co_{Mo} systems are closely related to biaxial strain. First, strain regulates the energy level sequences of Co-d orbitals. The electronic configurations vary with strains as follows: a₊a₊e₁₊e₁e₂₊e₂ for strains between -9% and -6%, a₊e₁₊a₊e₂₊e₁e₂ for -5% to -4%, e₁₊e₂₊a₊a₊e₁e₂ for -3% to 0%, a₊e₁₊e₂₊a₊e₁e₂ for 1% to 6%, and e₁₊a₊a₊e₁e₂₊e₂ for 7% to 9%, respectively. Second, strain influences the occupancy of Co-d orbitals, thereby affecting the magnetic properties. In the strain range of -9%–6%, the Co_{Mo} systems exhibit a local magnetic moment of 1.00 μ_B, and the coupling between such two moments is ferromagnetic (FM). Within the strain range of -5%–9%, the Co_{Mo} systems produce a magnetic moment of 3.00 μ_B, and the coupling between the magnetic moments is antiferromagnetic (AFM) in the range of -5%–4%, translates to FM states in the range of -3%–6%, and then changes to AFM states within range of 7%–9%. Among them, the FM coupling strength of the Co_{Mo} system is strongest at 3% strain, which is favorable for achieving a high Curie temperature (T_C) in MoS₂-based magnetic semiconductors. These oscillatory magnetic interactions are attributed to the d-p-d superexchange and d-d direct-exchange mechanisms. Third, tensile strain enhances the optical properties of



* Project supported by the Key Research and Development Program of Ningxia Province, China (Grant No. 2025BEH04007) and the Natural Science Foundation of Ningxia Province, China (Grant No. 2024AAC03012).

† Corresponding author. E-mail: nxupfc@163.com

Co_{Mo} systems. Compared to undoped MoS₂, the increased complex dielectric function in the low-energy light region enhances the valence electron transition probability and the separation efficiency of photogenerated electron-hole pairs, leading to a significant improvement in photocatalytic performance for the Co_{Mo} doped systems. Moreover, the impurity energy levels introduced by Co are located in the band-gap, which reduces the energy for valence electrons to transition to empty bands, thereby increasing photon absorption in the visible and infrared regions in Co_{Mo} doped systems. Meanwhile, the absorption edge undergoes a red shift, and tensile strain further improves the optical performance of the Co doped monolayer MoS₂ systems in the visible and infrared regions. Finally, dynamic stability analysis under strain reveals that Co_{Mo} systems are unstable as strain in the range of -9%—4%. Combined with the magnetic, optical properties, and structural stability of Co_{Mo} systems, the strain should be in the range of 1%–6%. The results presented here provide a novel approach for fabricating MoS₂-based magnetic semiconductors with superior optical properties.

Keywords: MoS₂, biaxial strain, magnetic properties, optical properties

DOI: [10.7498/aps.75.20260090](https://doi.org/10.7498/aps.75.20260090)

CSTR: [32037.14.aps.75.20260090](https://cstr.cn/32037.14.aps.75.20260090)

In Press