

Mn-O 共掺单层 MoS<sub>2</sub>磁性和  
光学性质的第一性原理研究

黄延彬<sup>1,4,5</sup>, 丁 召<sup>1,4,5</sup>, 魏节敏<sup>2</sup>, 罗子江<sup>3,4,5</sup>, 张振东<sup>1,4,5</sup>, 郭 祥<sup>1,4,5</sup>

(1. 贵州大学大数据与信息工程学院, 贵阳 550025; 2. 贵州理工学院, 贵阳 550003; 3. 贵州财经大学信息学院, 贵阳 550025;  
4. 贵州省微纳电子与软件技术重点实验室, 贵阳 550025; 5. 半导体功率器件可靠性教育部工程研究中心, 贵阳 550025)

**摘 要:** 基于第一性原理自旋极化密度泛函计算了 O, Mn 单掺杂和 Mn-O 共掺杂 MoS<sub>2</sub> 单层系统的电子结构、磁性和光学性质. 在 Mn 和 Mn-O 掺杂后, 由于自旋向上通道中杂质带的出现, 导致 MoS<sub>2</sub> 单层系统从自旋向上和自旋向下态密度完全对称的非磁性半导体转变为磁矩 1  $\mu_B$  和 1.08  $\mu_B$  的铁磁半导体, 磁矩主要集中在掺杂的 Mn 原子上, 而自旋向下通道仍保持半导体特征, 其自旋间隙分别为 1.613 和 0.396 eV. 同时发现 Mn-O 共掺杂后, 在低能量区域 (0~2.5 eV), 其介电常数、折射系数和吸收系数相比未掺杂和 O 单掺杂的 MoS<sub>2</sub> 系统增强显著, 并出现了红移现象.

**关键词:** 第一性原理; Mn-O 共掺杂; 单层 MoS<sub>2</sub>; 半金属铁磁

**中图分类号:** O562      **文献标识码:** A      **DOI:** 10.19907/j.0490-6756.2021.024001

First-principles study on properties of magnetic and  
optical of Mn-O co-doped MoS<sub>2</sub> monolayer

HUANG Yan-Bin<sup>1,4,5</sup>, DING Zhao<sup>1,4,5</sup>, WEI Jie-Min<sup>2</sup>,  
LUO Zi-Jiang<sup>3,4,5</sup>, ZHANG Zhen-Dong<sup>1,4,5</sup>, GUO Xiang<sup>1,4,5</sup>

(1. College of Big Data and Information Engineering, Guizhou University, Guiyang 550025, China;  
2. Guizhou Institute of Technology, Guiyang 550003, China;  
3. College of Information, Guizhou University of Finance and Economics, Guiyang 550025, China;  
4. Key Laboratory of Micro-Nano-Electronics of Guizhou Province, Guiyang 550025, China;  
5. Power Semiconductor Device Reliability Center of the Ministry of Education, Guiyang 550025, China)

**Abstract:** The electronic structure, magnetic properties and optical properties of the O, Mn single doped and Mn-O co-doped MoS<sub>2</sub> monolayer systems are calculated based on the first-principles spin-polarization density functional theory. For Mn and Mn-O doped, the MoS<sub>2</sub> monolayer system evolve from a completely symmetric band structures in spin-up and spin-down channels to a half-metal (HM) ferromagnet with completely (100%) spin polarization. their magnetic moments are 1  $\mu_B$  and 1.08  $\mu_B$ , mainly concentrated on the doped Mn atoms. while the spin-down channel remains semiconducting character but with a smaller spin-down gap of 1.613 and 0.396 eV due to appearance of the impurity bands. Meanwhile, in the low energy region (0~2.5 eV), it's dielectric constant, refractive index and absorption coefficient

收稿日期: 2019-07-08  
基金项目: 国家自然科学基金(61564002, 11664005); 贵州省科技计划项目(黔科合基础[2017]1055); 贵州大学引进人才科研项目(贵大人基合字[2015]23 号); 开放基金项目(KFJJ201603)  
作者简介: 黄延彬(1992-), 男, 贵州遵义人, 硕士研究生. E-mail: hyb0630@foxmail.com  
通讯作者: 郭祥. E-mail: xguo@gzu.edu.cn

are significantly enhanced compared with the undoped and O-doped MoS<sub>2</sub> system, red shift phenomenon appear after Mn-O co-doped.

**Keywords:** First-principles; Mn-O co-doped; Monolayer MoS<sub>2</sub>; Half-metal ferromagnetism

# 1 引言

自旋电子学是当前国内外研究的热点问题. 利用电子的自旋自由度可构造一些新的、更有效的逻辑器件以及新型的存储器件<sup>[1]</sup>. 当然,最重要的自旋电子特性体现在半金属铁磁性<sup>[2]</sup> (half-metal ferromagnetism, HMFM)材料上,因其在自旋滤波器应用上有巨大潜力<sup>[3-4]</sup>. 目前研究结果表明氧化物<sup>[5]</sup>、硫化物<sup>[6]</sup>和石墨烯纳米棒<sup>[7]</sup>等材料中能够实现 HMFM,但鲜见在二维材料中的报道.

近年来,过渡金属二硫化物受到了人们的广泛关注<sup>[8]</sup>. 而二维 MoS<sub>2</sub>材料是过渡金属二硫化物的典型代表,作为具有直接带隙(1.8 eV)的半导体,单层 MoS<sub>2</sub>在电子和光子器件应用中具有优势<sup>[9-13]</sup>. Mo原子d轨道处于不饱和状态,因此可以在 MoS<sub>2</sub>单层系统中通过掺杂其他元素调节其磁矩<sup>[14-16]</sup>. 二维 MoS<sub>2</sub>具有优异的电学特性,例如室温下的自旋输运能力、几微米的自旋扩散长度,这些特性使其成为自旋电子学上极具研究价值的材料<sup>[10-16]</sup>.

Kong 等人<sup>[17]</sup>探究了 O 掺杂 MoS<sub>2</sub>单层系统,发现该系统的带隙宽度随 O 掺杂浓度的增加而减小,并由掺杂前的直接带隙变为间接带隙. 曹娟等人<sup>[18]</sup>探究了 V、Cr、Mn 掺杂 MoS<sub>2</sub>单层系统,发现相比于 V 和 Cr 掺杂,Mn 掺杂的体系更加稳定,并且在室温下显示出稳定的铁磁性. Xie 等人<sup>[19]</sup>探究了 Mn-X (X=F、Cl、Br、At)共掺 WS<sub>2</sub>单层系统,发现 Mn 掺杂和 Mn-Br 共掺杂 WS<sub>2</sub>体系转变为具有完全(100%)自旋极化 HMFM. 通过分析前期的相关研究发现,Mn-X 共掺 MoS<sub>2</sub>体系的研究相对较少. 因此,本文对单层 MoS<sub>2</sub>进行 Mn-O 替位式掺杂,研究 Mn-O 共掺杂对 MoS<sub>2</sub>单层体系能带结构、光学性质和磁性的影响.

# 2 计算方法和模型

本文的计算采用基于密度泛函理论(density functional theory, DFT)的剑桥系列总能量包(Cambridge serial total energy package, CASTEP)进行结构优化. 电子间相互作用的交换关联能通过广义梯度近似<sup>[20]</sup> (general gradient approximation,

GGA)和 Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE)函数进行处理. 平面波动态截止能量设置为 470 eV,以确保计算的收敛性和高精度. 自洽能量的收敛精度为  $0.5 \times 10^{-5}$  eV/atom,最大 Hellmann-Feynman 力在 0.01 eV 以内,最大离子位移在  $0.5 \times 10^{-4}$  nm 之内,最大应力在 0.02 GPa 以内. 布里渊区域采用 Monkhorst-Park 自动生成方案对全布里渊区积分 K 点进行取样,几何优化 K 点网格为  $5 \times 5 \times 1$ . 在所有计算中采用  $4 \times 4 \times 1$  的 MoS<sub>2</sub>单层超胞,晶格常数  $a=b=1.26$  nm. 对于每个共掺杂结构,优化晶胞以获得最低总能量的晶格参数,对所有使用的模型采用周期性边界条件.

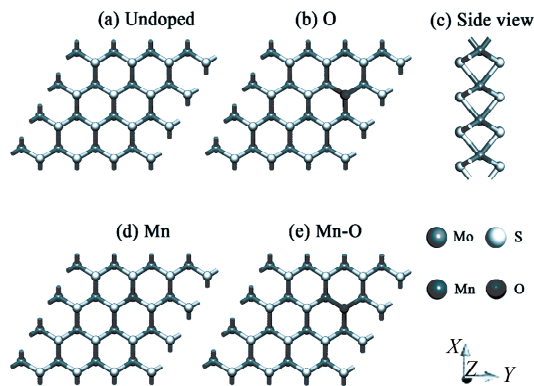


图 1 单层 MoS<sub>2</sub>的结构示意图  
Fig. 1 Monolayer MoS<sub>2</sub> structure diagrams

# 3 结果与讨论

## 3.1 结构分析

对未掺杂、O 单掺、Mn 单掺杂以及 Mn-O 共掺杂这四种 MoS<sub>2</sub>单层系统体系优化后的结构参数如表 1 所示. 其中本征 MoS<sub>2</sub>单层优化后,Mo-S 键长为 0.24 nm,S-Mo-S 键角为 81.962°. O 掺杂后,Mo-O 键长为 0.20 nm,比未掺杂的 Mo-S 键短. 由于 VI-A 族 O 原子的共价半径为 0.73 nm,而 S 原子的共价半径为 1.02 nm,共价半径小于 S 原子,因此共价半径小的 O 原子形成的 Mo-O 键短. Mn 掺杂后,Mn-S 键长为 0.24 nm,小于 Mo-S 键长,S-Mn-S 键角为 82.759°. 掺杂后键长的改变会产生局部应力,导致其键角也会随着键长的改变发生相应的变化,当键长变大时相对应键角会变小,反之变大,因此 S-Mn-S 键角略大于 S-Mo-S.

Mn-O 共掺杂后,Mn-O 键长为 0. 19 nm Mo-O-Mo 键角为 95. 36 °.

表 1 未掺杂、掺杂单层 MoS<sub>2</sub> 体系优化后的晶格常数

Tab. 1 Optimized lattice parameters of undoped and doped MoS<sub>2</sub> monolayer system

System	$d_{\text{Mn-X}}/\text{nm}$	$d_{\text{Mo-X}}/\text{nm}$	$\theta_{\text{S-Mn-S}}/^{\circ}$	$M_{\text{tot}}/\mu_{\text{B}}$	$E_{\text{g-su}}/\text{eV}$	$E_{\text{g-sd}}/\text{eV}$
undoped	2. 414( $d_{\text{Mo-S}}$ )	2. 414( $d_{\text{Mo-S}}$ )	82. 245( $\theta_{\text{S-Mo-S}}$ )	0	1. 738	1. 738
O	2. 065( $d_{\text{Mo-O}}$ )	2. 418( $d_{\text{Mo-S}}$ )	79. 620( $\theta_{\text{S-Mo-S}}$ )	0	1. 624	1. 624
Mn	2. 406 ( $d_{\text{Mn-S}}$ )	2. 330( $d_{\text{Mo-S}}$ )	82. 759	1	metal	0. 158
Mn-O	1. 976	2. 043	75. 231	1. 08	metal	0. 396

3. 2 能带结构和磁性

图 2 为未掺杂、O 和 Mn 单原子掺杂、Mn-O 双原子共掺杂的单层 MoS<sub>2</sub> 体系能带结构,费米能级  $E_{\text{F}}$  设定为零能量并由水平黑色虚线表示. 可以看到,本征 MoS<sub>2</sub> 单层为直接带隙,禁带宽度 1. 738 eV,略低于实验值 1. 740 eV<sup>[21-23]</sup>,这是因为基于密度泛函理论计算的方法会低估带隙值的大小<sup>[24]</sup>,未掺杂的单层 MoS<sub>2</sub> 系统因其自旋向上和自旋向下通道中的能带被完全对称地填充,因此呈现出非磁性半导体特性. 当 O 单原子掺杂 MoS<sub>2</sub> 单层系统后,MoS<sub>2</sub> 仍然表现为非磁性半导体特性,但是能带结构由直接带隙转变为间接带隙,禁带宽度转变为 1. 624 eV. Mn 掺杂和 Mn-O 共掺杂之后,由于

自旋向上通道中少许杂质带与费米能级交叠,导致掺杂系统出现金属特征,而自旋向下通道仍保持半导体特征,但具有较小的自旋间隙,分别为 0. 158 和 0. 396 eV,表明 Mn 掺杂和 Mn-O 共掺杂单层 MoS<sub>2</sub> 系统变为半金属(half metal, HM)铁磁体,具有完全(100%)自旋极化. 图 2(b)和 2(c)表示自旋向上通道,图 2(e)和 2(f)表示自旋向下通道. Mn 掺杂后,体系磁矩为 1  $\mu_{\text{B}}$ ,与 Xie 等人<sup>[19]</sup> 计算结果吻合,其中 S 贡献 -0. 6  $\mu_{\text{B}}$ ,Mo 贡献 -0. 69  $\mu_{\text{B}}$ ,Mn 贡献 2. 29  $\mu_{\text{B}}$ . Mn-O 共掺杂后,体系磁矩为 1. 08  $\mu_{\text{B}}$ ,其中 O 贡献 0. 01  $\mu_{\text{B}}$ ,S 贡献 -0. 06  $\mu_{\text{B}}$ ,Mo 贡献 -0. 02  $\mu_{\text{B}}$ ,Mn 贡献 1. 15  $\mu_{\text{B}}$ . Mn 掺杂体系磁矩主要来源于 Mn-3d 态的自旋不对称.

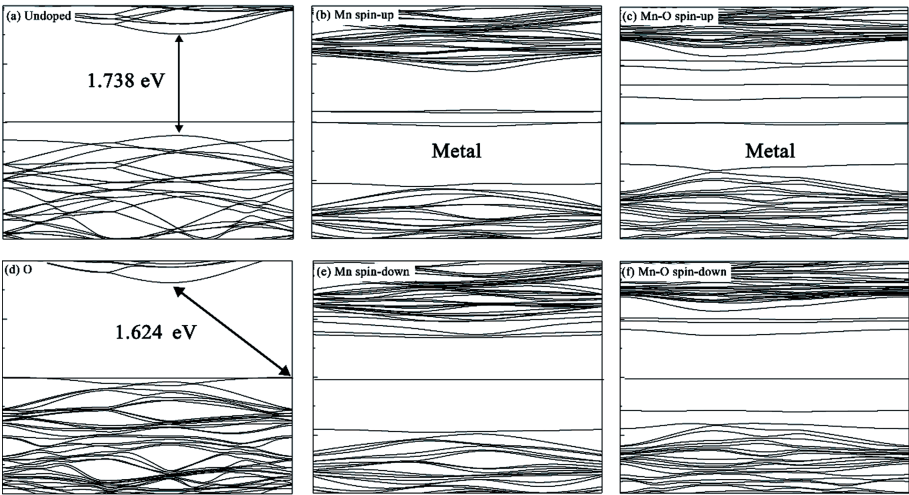


图 2 未掺杂、Mn 掺杂、O 掺杂和 Mn-O 共掺杂 MoS<sub>2</sub> 单层系统的能带结构图  
Fig. 2 The band structures of the undoped, Mn doped and Mn-O co-doped monolayer MoS<sub>2</sub> systems

3. 3 态密度

了解电子态密度(density of states, DOS)是分析材料的电学和光学性质的前提. 图 3 中绘制了总态密度(total density of states, TDOS)和投射到掺杂原子 Mn-3d、Mo-4d、S-3p 和 O-2p 上的分态密度(partial density of states, PDOS). 在 Mn 单掺杂和 Mn-O 共掺杂的单层 MoS<sub>2</sub> 系统,正值和

负值分别代表自旋向上和自旋向下通道,垂直红线表示费米能级  $E_{\text{F}}$  并设定为零能量. 图 3(a)显示在纯单层 MoS<sub>2</sub> 系统中,自旋向上和自旋向下的态密度是完全对称的,因此展现出非磁性半导体特性. 图 3(c)和 3(d)所示的总态密度 TDOS 说明在 Mn 掺杂和 Mn-O 共掺杂单层 MoS<sub>2</sub> 系统中,部分占据的杂质态仅在自旋向上通道中出现,说明在该费米

能级具有完全(100%)自旋极化的 HM 铁磁特性. 相应的较低部分 PDOS 表明部分占据杂质态主要由较近 Mo-5d 态杂化的 Mn-3d 态贡献.

Mn 单掺杂和 Mn-O 共掺杂 MoS<sub>2</sub> 单层系统由于电子之间的交换作用,在费米能级  $E_F$  附近,自旋向上和自旋向下的态密度发生了自旋劈裂,且自旋向上与自旋向下的电子数目不等,在 3d 能带中形成未被抵消的自发磁矩,因而发生自发磁化. Mn 掺杂的 MoS<sub>2</sub> 单层体系在靠近价带顶(CBM)的位置出现了明显的杂质能级并有能级劈裂现象,其在自旋向下的通道中穿过费米面,杂质能级来源于 Mo-4d 和 Mn-3d 轨道,表明体系的磁矩主要局域

在 Mo 和 Mn 上. Mn 掺杂的 MoS<sub>2</sub> 单层体系在靠近导带底的位置出现了明显的杂质能级,其主要由 Mo-4d 和 Mn-3d 轨道电子组成. 靠近价带顶的位置发生了自旋劈裂,自旋向上的部分穿过费米面,自旋向下的部分依然位于费米能级以下,表现出半金属性,其主要由 Mo-4d 和 Mn-3d 轨道电子组成,这表明 Mn 掺杂的 MoS<sub>2</sub> 单层体系的磁矩主要局域在 Mo 和 Mn 上. 从态密度上可以看出,在 Mn 掺杂的 MoS<sub>2</sub> 单层体系中,在费米面附近 Mn-3d、Mo-4d 和 S-3p 态之间发生了强烈的耦合作用,说明 Mn 是引起体系磁性的主要原因.

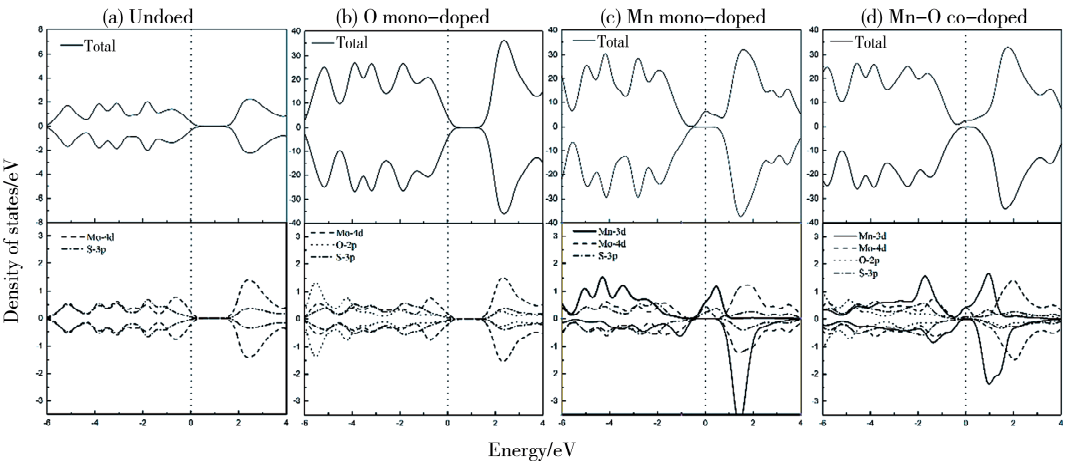


图 3 未掺杂、Mn 掺杂、O 掺杂和 Mn-O 共掺杂 MoS<sub>2</sub> 单层系统的总态密度 TDOS 与投射到掺杂原子 Mn-3d、Mo-4d、S-3p 和 O-2p 上的分态密度 PDOS(垂直虚线代表费米能级  $E_F$  为零值)

Fig. 3 The total densities of states (TDOSs) and partial densities of states (PDOSs) projected onto dopants Mn-3d, Mo-4 (d), S-3p and O-2p orbitals for the undoped, Mn doped, O doped and Mn-O co-doped MoS<sub>2</sub> monolayer systems (the Fermi level  $E_F$  is set at zero energy and shown by vertical dash lines)

3.4 光学性质

为探究 Mn-O 共掺单层 MoS<sub>2</sub> 系统光学性质的影响,在图 4(a)和 4(b)中分别绘制介电常数的实部 $\epsilon_1(\omega)$ 和虚部 $\epsilon_2(\omega)$ . 对于电磁辐射,介电常数 $\epsilon(\omega)$ 可用作描述系统的线性响应,通常定义为:

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_1(\omega) + i\epsilon_2(\omega) \tag{1}$$

其中实部 $\epsilon_1(\omega)$ 反映了介质的介电特性,而虚部 $\epsilon_2(\omega)$ 反映了半导体/绝缘体复合材料对电磁波的吸收特性. 图 4(a)计算出未掺杂,Mn 单掺杂,O 单掺杂,Mn-O 共掺的静态介电常数 $\epsilon_1(0)$ 分别为: 6.125、8.8415、6.105、6.576,我们发现 Mn 掺杂和 Mn-O 共掺杂后实部介电函数 $\epsilon_1(\omega)$ 的静态值高于未掺杂 MoS<sub>2</sub> 单层系统,并且 Mn 掺杂后的静态值为四个对比组的最大值达 8.841 5,说明 Mn

掺杂 MoS<sub>2</sub> 单层体系具有较好的介电特性. 随着光子能量的增加,实部 $\epsilon_1(\omega)$ 的值呈先增加后减小再增加的趋势,峰值分别为: 8.613、8.510、7.580、7.972,对应的光子能量分别为: 2.049、2.001、2.026、1.923 eV,介电常数在光子能量 5.265~7.697 eV 区间变为负值,当 $\epsilon_1(\omega) > 0$  时,光子在材料中传播,对于 $\epsilon_1(\omega) < 0$ ,电磁波被衰减,对于 $\epsilon_1(\omega) = 0$ ,只可能存在纵向极化波. 图 4(b)显示随着光子能量的增加,介电函数的虚部 $\epsilon_2(\omega)$ 也在增加,在光子能量 2.9 eV 附近 $\epsilon_2(\omega)$ 达到最大值. 在 0~0.9 eV 范围内,由 3.3 中所述铁磁特性(HM)导致 Mn 掺杂 MoS<sub>2</sub> 系统的介电函数 $\epsilon(\omega)$ 值随着光子能量的增加而减小.

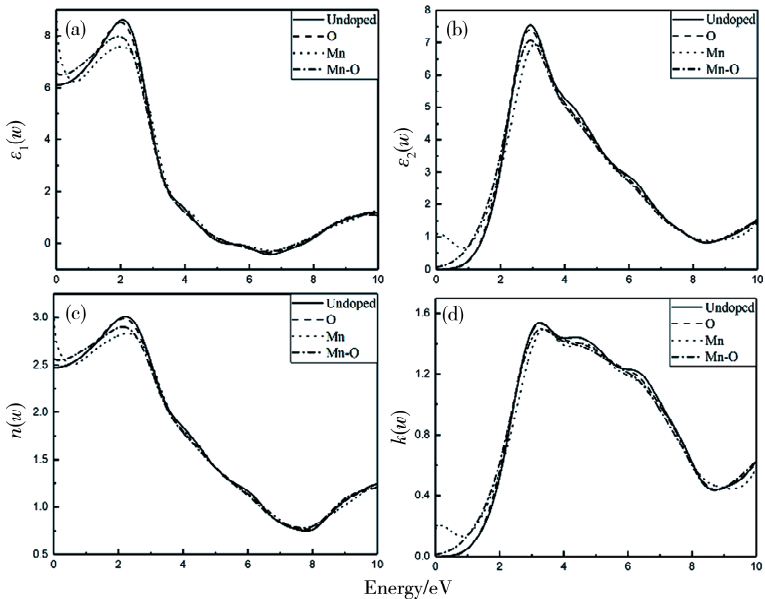


图 4 (a)和(b)分别为未掺杂、Mn 掺杂、O 掺杂和 Mn-O 共掺杂 MoS<sub>2</sub> 单层系统的介电常数的实部 $\epsilon_1(\omega)$ 和虚部 $\epsilon_2(\omega)$ ; (c)和(d)分别为折射系数的实部 $n(\omega)$ 和虚部 $k(\omega)$

Fig. 4 The real parts  $\epsilon_1(\omega)$  and imaginary parts  $\epsilon_2(\omega)$  of the dielectric constants  $\epsilon(\omega)$  for the undoped, Mn doped and Mn-O co-doped monolayer MoS<sub>2</sub> systems as shown in (a) and (b); the real parts  $n(\omega)$  and imaginary parts  $k(\omega)$  for the undoped, Mn doped and Mn-O co-doped monolayer MoS<sub>2</sub> systems as shown in (c) and (d)

在图 4(c)和 4(d)分别绘制折射系数的实部  $n(\omega)$  和  $k(\omega)$  随光子能量变化的曲线,发现他们与介电常数的实部 $\epsilon_1(\omega)$ 与虚部 $\epsilon_2(\omega)$ 的图形相似. 其中未掺杂、Mn 单掺杂、O 单掺杂和 Mn-O 共掺杂 MoS<sub>2</sub> 单层系统的静态折射系数  $n(0)$  分别为 3.007、2.985、2.829、2.896. 在图 4(d)中 0~4 eV 低能量区域,四个对比组  $k(\omega)$  的值随着光子能量的增加而增加,直至最大值,分别为 1.536、1.527、1.494 和 1.494,同时在 3.0~7.5 eV 区域内表现出振荡行为. 与其他三种掺杂情况不同的是,由于 Mn 掺杂 MoS<sub>2</sub> 单层系统出现了铁磁性质,

能量的增加而减小,在 0.83 eV 之后随着光子能量的增加而增加,并在 3.422 eV 达到最大值 1.494.

图 5 为不同掺杂条件下单层 MoS<sub>2</sub> 的光吸收谱,在红外光波段(780 nm ~ 1 mm),它们的吸收边分别为 0.83、0.126、0.869 和 0.556 eV,对应的波长分别为 1 495.80、9 853.29、1 428.67、2 232.94 nm,这说明 MoS<sub>2</sub> 单层系统掺杂后出现一定的红移现象,在红外光探测上表现出良好的特性. 未掺杂与掺杂后的吸收系数峰值分别为 12.407、11.783、12.064 和 11.813,对应的能量分别为 6.442、6.484、6.335 和 6.295 eV. 在低能量区域(0~2.5 eV),掺杂后吸收系数较未掺杂的有所增强,其中 Mn-O 共掺杂的吸收增强最为显著.

4 结 论

本文基于第一性原理自旋极化密度泛函计算了本征单层 MoS<sub>2</sub>、O、Mn 和 Mn-O 掺杂 MoS<sub>2</sub> 单层系统电子结构、磁性和光学性质. 发现掺杂后的 MoS<sub>2</sub> 单层系统的晶胞参数和电子结构发生了一定变化,本征 MoS<sub>2</sub> 单层系统的禁带宽度为 1.738 eV,为直接带隙非磁性半导体. O 单原子掺杂 MoS<sub>2</sub> 单层系统后转变为禁带宽度为 1.624 eV 的间接带隙非磁性半导体. 在 Mn 和 Mn-O 掺杂后,MoS<sub>2</sub> 单层系统从自旋向上和自旋向下完全对称的非磁性半导体转变为拥有磁矩为 1  $\mu_B$  和 1.08  $\mu_B$  的

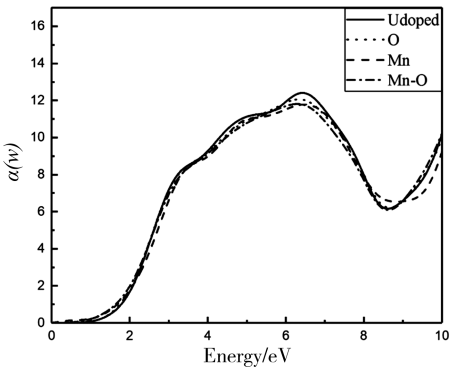


图 5 未掺杂、Mn 掺杂、O 掺杂、Mn-O 共掺杂 MoS<sub>2</sub> 单层系统的吸收系数  $\alpha(\omega)$

Fig. 5 The absorption coefficients  $\alpha(\omega)$  for the pure, Mn doped and Mn-O co-doped monolayer MoS<sub>2</sub> systems

导致其  $k(\omega)$  值在 0.2 ~ 0.83 eV 范围内随着光子

铁磁半导体. 同时发现 Mn-O 共掺杂后, 在低能量区域, MoS<sub>2</sub> 单层系统在光学性质上相比未掺杂和 O 单掺杂的 MoS<sub>2</sub> 系统有所增强, 并出现红移现象.

## 参考文献:

- [1] Žutić I, Fabian J, Sarma S D. Spintronics: fundamentals and applications [J]. Rev Mod Phys, 2004, 76: 323.
- [2] 谢建明, 王月影, 陈红霞. Mn 掺杂 ZnO 纳米线磁性质的第一性原理研究[J]. 原子与分子物理学报, 2019, 36: 246.
- [3] Park J H, Vescovo E, Kim H J, *et al.* Direct evidence for a half-metallic ferromagnet [J]. Nature, 1998, 392: 794.
- [4] de Groot R A, Mueller F M, van Engen P G, *et al.* New class of materials: half-metallic ferromagnets [J]. Phys Rev Lett, 1983, 50: 2024.
- [5] Coey J M D, Venkatesan M. Half-metallic ferromagnetism: example of CrO<sub>2</sub> (invited) [J]. J Appl Phys, 2002, 91: 8345.
- [6] Devey A J, Grau-Crespo R, de Leeuw N H. Electronic and magnetic structure of Fe<sub>3</sub>S<sub>4</sub>: GGA+*U* investigation [J]. Phys Rev B, 2009, 79: 195126.
- [7] Son Y W, Cohen M L, Louie S G. Half-metallic graphene nanoribbons [J]. Nature, 2006, 444: 347.
- [8] 牛兴平, 窦立璇. 过渡金属原子掺杂对单层 MoS<sub>2</sub> 磁性的影响[J]. 原子与分子物理学报, 2019, 36: 160.
- [9] Fan X L, An Y R, Guo W J. Ferromagnetism in transitional metal-doped MoS<sub>2</sub> monolayer [J]. Nanoscale Res Lett, 2016, 11: 154.
- [10] Li H, Qi X Y, Wu J, *et al.* Investigation of MoS<sub>2</sub> and graphene nanosheets by magnetic force microscopy [J]. ACS Nano, 2013, 7: 2842.
- [11] Xiao D, Liu G B, Feng W X, *et al.* Coupled spin and valley physics in monolayers of MoS<sub>2</sub> and other group-VI dichalcogenides [J]. Phys Rev Lett, 2012, 108: 196802.
- [12] Li X, Zhang F, Niu Q. Unconventional quantum hall effect and tunable spin hall effect in dirac materials: application to an isolated MoS<sub>2</sub> trilayer [J]. Phys Rev Lett, 2013, 110: 066803.
- [13] Late D J, Huang Y K, Liu B, *et al.* Sensing behavior of atomically thin-layered MoS<sub>2</sub> transistors [J]. ACS Nano, 2013, 7: 4879.
- [14] Fan Y H, Zhang J Y, Qiu Y Z, *et al.* A DFT study of transition metal (Fe, Co, Ni, Cu, Ag, Au, Rh, Pd, Pt and Ir)-embedded monolayer MoS<sub>2</sub> for gas adsorption [J]. Comp Mater Sci, 2017, 138: 255.
- [15] Zhao P J, Zheng J M, Guo P, *et al.* Electronic and magnetic properties of Re-doped monolayer MoS<sub>2</sub>: a DFT study [J]. Comp Mater Sci, 2017, 128: 287.
- [16] Cao D, Shu H B, Wu T Q, *et al.* First-principles study of the origin of magnetism induced by undoped defects in monolayer MoS<sub>2</sub> [J]. Appl Surf Sci, 2016, 361: 199.
- [17] Kong L J, Liu G H, Qing L. Electronic and optical properties of O-doped monolayer MoS<sub>2</sub> [J]. Comp Mater Sci, 2016, 111: 416.
- [18] 曹娟, 崔磊, 潘靖. V, Cr, Mn 掺杂 MoS<sub>2</sub> 磁性的第一性原理研究[J]. 物理学报, 2013, 62: 187102.
- [19] Xie L Y, Zhang J M. The structure, electronic, magnetic and optical properties of the Mn doped and Mn-X (X=F, Cl, Br, I and At) co-doped monolayer WS<sub>2</sub>: a first-principles study [J]. J Alloy Compd, 2017, 702: 138.
- [20] Perdew J P, Burke K, Ernzerhof M. Generalized gradient approximation made simple [J]. Phys Rev Lett, 1996, 77: 3865.
- [21] Lebègue S, Eriksson O. Electronic structure of two-dimensional crystals from *ab initio* theory [J]. Phys Rev B, 2009, 79: 115409.
- [22] 吴木生, 徐波, 刘刚, 等. Cr 和 W 掺杂的单层 MoS<sub>2</sub> 电子结构的第一性原理研究[J]. 物理学报, 2013, 62: 037103.
- [23] Kam K K, Parkinson B A. Detailed photocurrent spectroscopy of the semiconducting group VI transition metal dichalcogenides [J]. J Phys Chem, 1982, 86: 463.
- [24] Tang Z R, Yin X, Zhang Y H, *et al.* Synthesis of titanate nanotube - cds nanocomposites with enhanced visible light photocatalytic activity [J]. Inorg Chem, 2013, 52: 11758.

## 引用本文格式:

中文: 黄延彬, 丁召, 魏节敏, 等. Mn-O 共掺单层 MoS<sub>2</sub> 磁性和光学性质的第一性原理研究[J]. 四川大学学报: 自然科学版, 2021, 58: 024001.

英文: Huang Y B, Ding Z, Wei J M, *et al.* First-principles study on properties of magnetic and optical of Mn-O co-doped MoS<sub>2</sub> monolayer [J]. J Sichuan Univ: Nat Sci Ed, 2021, 58: 024001.