

خواص مغناطیسی و الکترونی تک لایه دی کالکوژنید Pd_2S_4 تحت دوپینگ اتم‌های مجاور اتم سولفور

مجتبی غلامی^{12*}، حمید رحیم پور سلیمانی³
1. گروه فیزیک، دانشگاه پردیس 2، دانشگاه گیلان، رشت، ایران
2. گروه فیزیک، دانشگاه پیام نور، تهران، ایران
3. گروه فیزیک، دانشگاه گیلان، رشت، ایران

تاریخ پذیرش: 1400/12/20

تاریخ دریافت: 1400/11/03

Magnetic and Electronic Properties of Pd_2S_4 Monolayer Dichalcogenid under Doping of Atoms Adjacent to Sulfur Atom

M. Gholami^{*12}, H. Rahimpour Soleimani³

1. Department of Physics, University Campus2, University of Guilan, Rasht, Iran
2. Department of Physics, Payame Noor University, Tehran, Iran
3. Department of Physics, University of Guilan, Rasht, Iran

Received: 2022/01/23

Accepted: 2022/03/11

Abstract

The magnetic and electronic properties of Pd_2S_4 monolayer were done through doping nonmetals $NM(N,P,As,O,Se,F,Cl,Br)$ and by using first principal calculations. The results show that nonmetals with an odd number of valence layers motivate magnetization of the structure, while non-metals with an even number in the valence layer do not induce magnetic property in the system. The highest amount of magnetization generated is due to the doping of seventh group atoms and especially the Br atom with a value of $0.81 \mu_B$. In the fifth group, from top to bottom (increasing the period), the value of spin-orbital p separation decreases, which corresponds to a decrease in the value of magnetization. While the value of spin-orbital separation P of the atoms of the seventh group increases with the increase of the period, so the value of magnetization of the atom The seventh group increases from the top to the bottom of the periodic table. In the seventh group, in contrast to the fifth group, the magnetization of the first neighboring sulfur atom is higher than that of the doping non-metal atoms. The findings obtained in this work can initiate experimental exploration and expand the application of non-metal doping in spintronic devices.

Keywords

Non-metal Dopin, 2D Dichalcogenid, Pd_2S_4

چکیده

خواص مغناطیسی و الکترونی تک لایه Pd_2S_4 از طریق دوپینگ غیر فلزات $NM(N,P,As,O,Se,F,Cl,Br)$ و با بکارگیری محاسبات اساسی اولیه انجام شد. نتایج نشان می‌دهد که غیرفلزاتی که دارای عدد فرد لایه ظرفیت هستند، باعث مغناطیسی شدن ساختار می‌شوند در حالی که غیرفلزات دارای عدد زوج در لایه ظرفیت خاصیت مغناطیسی درسیستم القا نمی‌کنند. بیشترین مقدار مغناطش تولید شده ناشی از دوپینگ اتم‌های گروه هفتم و به‌ویژه اتم Br با مقدار $0.81 \mu_B$ است. در گروه پنجم، از بالا به پایین (افزایش دوره) مقدار جدایی اسپینی اوربیتال p کاهش پیدا می‌کند که کاهش مقدار مغناطش را به همراه دارد. در حالی که مقدار جدایی اسپینی اوربیتال P اتم‌های گروه هفتم با افزایش دوره زیاد می‌شود. بنابراین مقدار مغناطش اتم‌های گروه هفتم از بالا به پایین جدول تناوبی افزایش می‌یابد. در گروه هفتم برعکس گروه پنجم مغناطش اتم سولفور همسایه اول از اتم‌های غیرفلزات دوپینگ بیشتر است. یافته‌های به‌دست‌آمده در این کار می‌تواند اکتشاف آزمایشی را آغاز کند و کاربرد مغناطش غیر فلزات را در ابزارهای اسپینترونیک گسترش دهد.

واژه‌های کلیدی

دوپینگ غیرفلزات، دی کالکوژنید دو بعدی، Pd_2S_4

*Corresponding Author: m_gholami@pnu.ac.ir

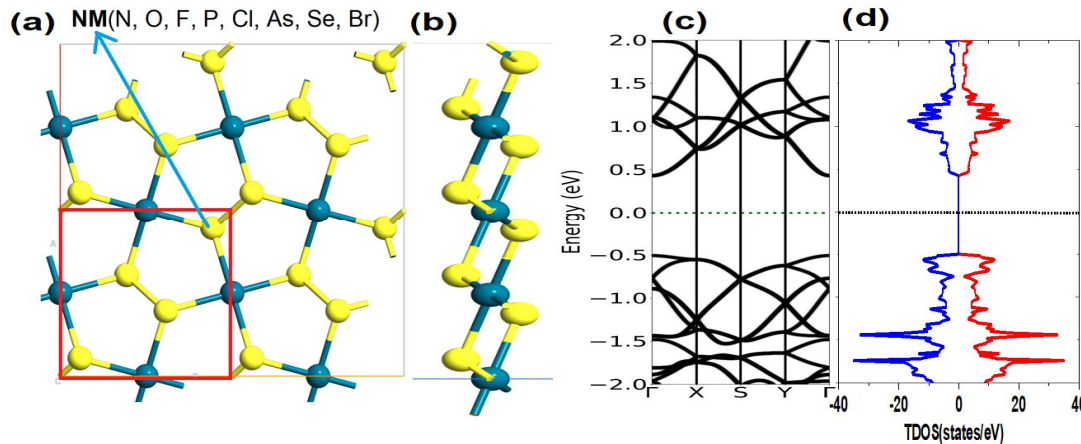
* نویسنده مسئول: مجتبی غلامی

مقدمه

مواد دی کالکوئیدهای فلزات واسطه تک لایه (TMDCs) دارای خواص ساختاری و الکترونیکی منحصر به فردی هستند [1-5]. با توجه به خواص رسانایی مختلفی از قبیل عایق، نیمه رسانا، رسانا و حتی ابررسانایی که دارند کاربردهای بالقوه‌ای در الکترونیک، اپتوالکترونیک و اسپینترونیک از خود بروز می‌دهند [6-7]. تحقق مغناطیس در سیستم‌های دو بعدی می‌تواند به طور بالقوه تحولی در توسعه فناوری اطلاعات ایجاد کند [10]. با این حال، خاصیت غیر مغناطیسی آنها باعث می‌شود که کاربردهای محدودی در دستگاه‌های اسپینترونیک داشته باشند. لذا برای پیشبرد خواص اسپینترونیکی این مواد روش‌های تئوری و تجربی مختلفی به کار برده می‌شود [15-11]. روش دوپینگ یکی از روش‌های امیدوارکننده برای تعدیل خواص مغناطیسی مواد دو بعدی در نظر گرفته می‌شود [16-18]. از میان مواد دو بعدی دی کالکوئید تحقیق بر روی Pd_2S_4 به دلیل خاصیت ساختاری منحصر به فردی که دارد، می‌تواند جالب باشد. ماده Pd_2S_4 بر خلاف سایر دی کالکوئیدها که چهار یا شش گوشه هستند، دارای ساختار پنتایی است. اخیراً با استفاده از دوپینگ مواد 3d خاصیت

محاسبات

مطالعه اصول اولیه در چارچوب تئوری تابعی چگالی با استفاده از بسته شبیه‌سازی سیستا (Siesta) انجام شد. موج تقویت شده پیش‌بینی شده (PAW) و تابع Perdew- (PBE) BurkeErnzerhof از تقریب گرادیان تعمیم یافته (GGA) به ترتیب برای برهم کنش‌های الکترون-یون و پتانسیل تبادل-همبستگی استفاده می‌شود [24,25]. همچنین برای ارزیابی حالت پلاریزاسیون از تقریب گرادیان تعمیم یافته اسپینی (SGGA) استفاده شده است. با در نظر گرفتن اثر اندازه ابرشبکه [26-28]، یک ابرشبکه $1 \times 2 \times 2$ تک لایه Pd_2S_4 حاوی 8 اتم Pd و 16 اتم S در این کار به کار گرفته شده است. یک اتم S با اتم‌های NM در تمام سیستم‌های دوپ شده جایگزین می‌شود. انرژی قطع بالا برای پایه موج صفحه 500eV تنظیم شد و شبکه نمونه‌برداری نقطه $k-7 \times 7 \times 1$ برای ادغام در منطقه بریلوین اول اعمال شد. یک لایه خلاء 16\AA در امتداد جهت Z برای جلوگیری از فعل و انفعالات بین slabs دوره‌ای استفاده می‌شود. بهینه‌سازی ساختاری تا زمانی ادامه می‌یابد که تحمل



شکل 1. (a) نمای مقابل (b) نمای جانبی از تک لایه Pd_2S_4 (c) ساختار باند Pd_2S_4 بدون دوپینگ (d) نمودار چگالی حالت‌های اسپینی تک لایه خالص Pd_2S_4 .

همگرایی انرژی و حداکثر نیرو به ترتیب کمتر از 10^{-5} eV/atom و 10^{-3} eV/Å باشد. تمام محاسبات تحت معیارهای ریلکس یکسان انجام می‌شود.

مغناطیسی و الکترونیکی Pd_2S_4 مورد بررسی قرار گرفته است [18] اما استفاده از ناخالصی مواد غیرفلزی جهت تولید خاصیت مغناطیسی در ماده فوق تاکنون در مقالات دیده نشده است. دوپینگ غیرفلزات گروه‌های پنج، شش و هفت به طور کامل انجام شده و نتایج با هم مقایسه و بررسی شده‌اند.

جدول 1. مقدار ثابت شبکه، طول پیوند پالادیوم، سولفور با غیر فلزات، لبه باند رسانش و لبه باند ظرفیت و مقدار گاف انرژی ناشی از دوپینگ

system	a(A°)	b(A°)	c(A°)	d _{Pd-NM} (A°)	D _{S-NM} (A°)	E _{CBM} (eV)	E _{VBM} (eV)	E _g (eV)
N doped	5.4833	5.4833	16.335	2.10	1.631	0.01	-0.09	0.24
P doped	5.4833	5.4833	16.335	2.27	2.09	0.03	-0.05	0.090
As doped	5.4833	5.4833	16.335	2.38	2.23	0	0	0
O doped	5.4833	5.4833	16.335	2.20	1.657	0.25	-0.38	0.63
undoped	5.4833	5.4833	16.335	2.31	2.11	0.49	-0.54	1.05
Se doped	5.4833	5.4833	16.335	2.43	2.29	0.44	-0.54	0.98
F doped	5.4833	5.4833	16.335	2.10	1.643	0.17	-0.24	0.41
Cl doped	5.4833	5.4833	16.335	2.34	2.12	0.25	-0.3	0.55
Br doped	5.4833	5.4833	16.335	2.46	1.98	0.26	-0.3	0.56

بحث و بررسی

دارد [20] ولی هنوز تا این زمان هیچ گونه تحقیقی راجع به دوپینگ غیرفلزات روی ماده Pd₂S₄ در مقالات علمی دیده نشده است. به منظور یک پژوهش مستدل، برای انجام این کار از اتم‌های مجاور اتم سولفور استفاده می‌شود تا مقایسه منطقی بین خواص ناشی از دوپینگ غیرفلزات با حالت خالص صورت گیرد. مطابق شکل 1a غیرفلزات گروه‌های پنجم (N, P, As)، گروه ششم (O, Se) و گروه هفتم (F, Cl, Br) به جای یکی از اتم‌های S قرار می‌گیرند به نحوی که با دو اتم پالادیوم و یک اتم S در ارتباط باشند. براساس جدول 2 مقدار مغناطش ناشی از دوپینگ هر یک از غیرفلزات گروه‌های VI، VII و روی ساختار Pd₂S₄ نشان داده شده است.

Pd₂S₄ یکی از مواد دو بعدی پنج گوشه با شبکه کریستالی از خانواده اورتورمبیک ساده با شماره گروه فضایی 14 Pbca(P2₁/c) و گروه نقطه‌ای (2/m) است [19]. محاسبات طیف فونونی نشان می‌دهد که دوپینگ جایگزینی غیر فلزات به جای اتم غیر فلز سولفور نمی‌تواند تغییرات اساسی در پیکربندی سیستم ایجاد کند و ساختار پایدار باقی می‌ماند [19]. با بهینه کردن ساختار طول ثابت شبکه برابر با مقادیر $a=5.4833\text{A}^\circ$ ، $b=5.4833\text{A}^\circ$ و $c=16.335\text{A}^\circ$ به دست آمده است. همچنین محاسبات طول پیوندهای کوالانسی S-S و Pd-S به ترتیب برابر با مقادیر 2.11A° و

جدول 2. مقدار مغناطش کل، مغناطش اتم غیرفلز، مغناطش اتم‌های سولفور و پالادیوم همسایه‌های اول و دوم اتم دوپینگی و مقدار گاف انرژی.

system	M _{tot} (μB)	M _{NM} (μB)	M _{SI} (μB)	M _S (μB)	M _{Pd1} (μB)	M _{Pd} (μB)
N	0.62	0.40	0.2	0	0.06	0.010
P	0.27	0.13	0.07	0	0.06	0.01
As	0	0	0	0	0	0
O	0	0	0	0	0	0
S(undoped)	0	0	0	0	0	0
Se	0	0	0	0	0	0
F	0.66	0	0.65	0.03	0	0.08
Cl	0.80	0.12	0.68	0.04	0.07	0.06
Br	0.81	0.16	0.64	0	0.087	0.05

همان گونه که از جدول 2 پیدا است، دوپینگ غیرفلزات گروه‌های V و VII سیستم را مغناطیسی می‌کنند در حالی که اتم‌های گروه VI سیستم را مغناطیسی نمی‌کنند. مشاهدات اولیه داده‌های جدول 2 نشان می‌دهد که وجود یا عدم مغناطش دوپینگ اتم‌های فوق در ساختار Pd₂S₄ بستگی به نوع فرد یا زوج بودن تعداد الکترون‌های لایه ظرفیت دارد. غیرفلزات با عدد فرد لایه ظرفیت در سیستم مغناطش تولید می‌کنند، در حالی که وجود عدد زوج الکترون‌های لایه ظرفیت غیرفلزات در ساختار مغناطش ندارد. بنابراین در ادامه می‌توان بحث اصلی را به دو بخش که شامل گروه‌های غیر فلزی با الکترون‌های لایه ظرفیت فرد و زوج تقسیم کرد.

2.33A° برای حالت بدون دوپینگ و در حضور دوپینگ اتم‌های غیرفلزی مطابق جدول 1 است. نمای مقابل و جانبی از شکل تک لایه Pd₂S₄ به ترتیب در شکل 1a و 1b نشان داده شده است که هر اتم سولفور با چهار اتم پالادیوم پیوند برقرار می‌کند. کوچک‌ترین سلول واحد تک لایه Pd₂S₄ دارای چهار اتم پالادیوم و دو اتم سولفور است (شکل 1a مستطیلی قرمز رنگ). Pd₂S₄ از نظر ساختار الکتریکی و مغناطیسی نیمه هادی غیر مغناطش با مقدار گاف انرژی 1.1eV است. شکل 1c و 1d به خوبی نشان می‌دهد که اسپین‌های بالا و پایین بر هم منطبق هستند و ساختار فاقد مغناطش است. مطالعات نشان می‌دهد که دوپینگ فلزات واسطه 3d تأثیر قابل ملاحظه‌ای در ساختار الکتریکی و مغناطیسی سیستم

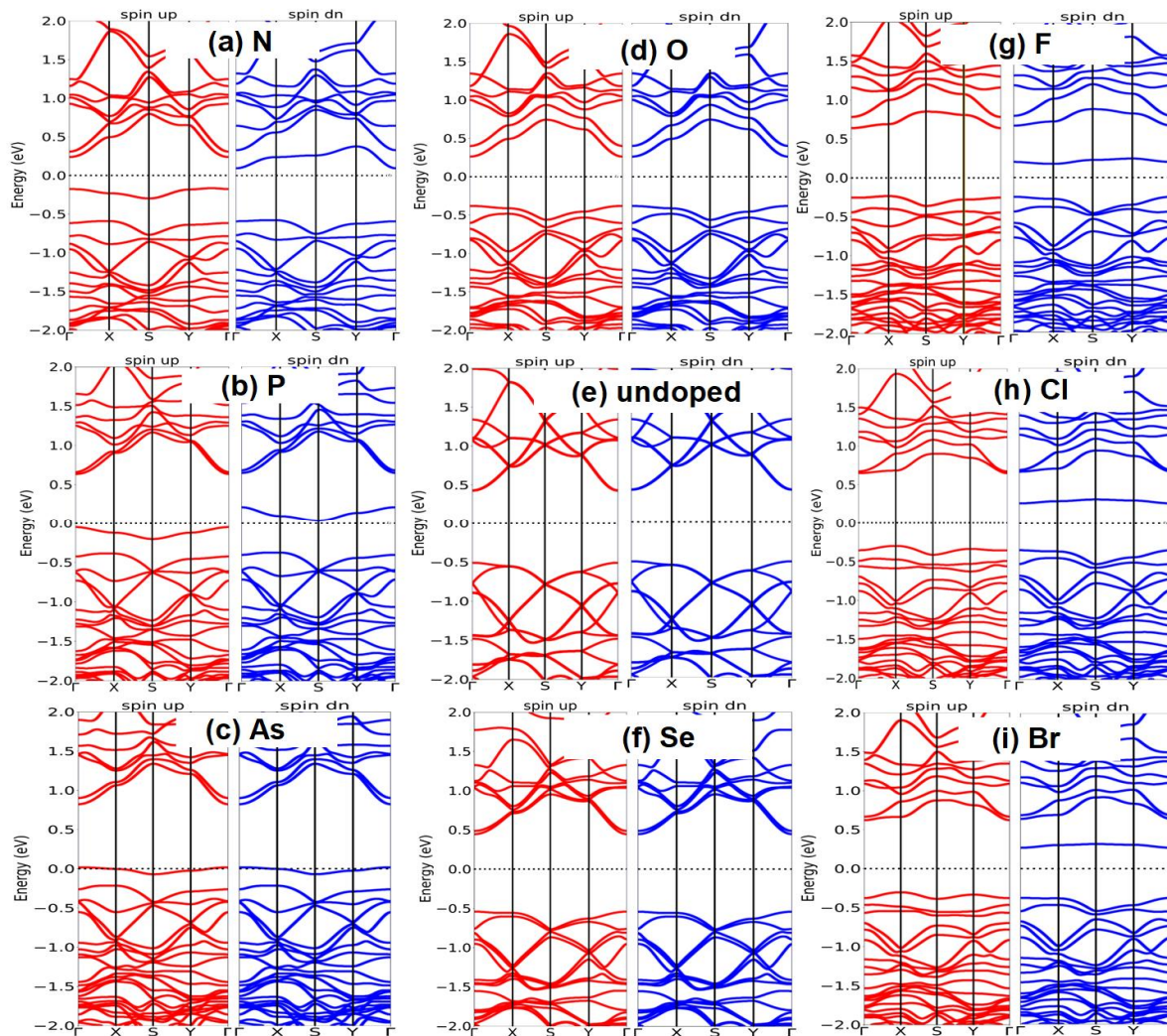
تأثیر مغناطیسی دوپینگ غیر فلزات گروه‌های V و VII

با قرار گرفتن اتم‌های گروه $V (s^2 p^3)$ به جای یک اتم $S(s^2 p^4)$ ساختار سلول واحد دارای پیوند Pd-Pd-V-S-Pd می‌شود. به عبارتی هر کدام از اتم‌های S و گروه پنجم نه تنها با هم در ارتباط هستند بلکه با دو اتم پالادیوم نیز پیوند کوالانسی برقرار می‌کنند. بنابراین هر کدام دو الکترون از اتم‌های پالادیوم مجاور کسب می‌کنند و صرف نظر از تبادل الکترونی بین آنها به صورت یون‌های $V^{-2}(s^2, S^{-2}(s^2 p^6))$ ظاهر می‌شوند. در نتیجه می‌توان دید که قدرت گشتاور مغناطیسی اتم‌های گروه V به دلیل داشتن اوربیتال نیمه پر بیشتر از اتم S مجاور است (جدول 2). همان طور که از شکل ساختار باند 2(a-c) پیدا است، حالت‌های ناخالصی جدیدی اطراف سطح فرمی در باند رسانش و باند ظرفیت ناشی از وجود اوربیتال‌های p وجود دارد. از نمودار چگالی حالت شکل 3- V(a,b,c) مشاهده می‌شود که اسپین‌های بالا-پایین اوربیتال‌های $(N-2p_z)$ ، $(S-3p_z)$ در اثر میدان کریستالی در اطراف سطح فرمی شکسته می‌شوند و حالت تیهگن خود را از دست می‌دهند. بنابراین کل مغناطش القا شده در سیستم بر عهده همین اوربیتال‌ها است و سایر اوربیتال‌های $(N-2p_x p_y)$ ، $(S-3p_x p_y)$ هیچ نقشی در ممان مغناطیسی سیستم ندارند. همچنین با توجه به جدول 2، اتم‌های همسایه‌های اول و دوم پالادیوم با دادن الکترون به اتم‌های غیر فلزات در مغناطش بودن سیستم سهم دارند و در راستای اسپین‌های اتم‌های غیر فلزات پلاریزه می‌شوند (شکل 4. a, b). فاصله دو اسپین بالا و پایین (جدایی اسپینی) برای دوپینگ غیر فلزات N، P، و As به ترتیب برابر با 0.24، 0.090، و 0 الکترون ولت است. با افزایش عدد دوره گروه V جدایی اسپینی کاهش می‌یابد و مقدار مغناطش دوپینگ اتم‌های P، N و As به ترتیب برابر با 0.62، 0.27 و 0 مگنتون بور می‌شود. اشاره به این نکته لازم است که مقدار گاف انرژی منطبق بر همان مقدار جدایی اسپینی است. به گونه‌ای که در اثر دوپینگ اتم‌های N و P ساختار نیمه هادی می‌ماند ولی دوپینگ اتم As ساختار را تبدیل به فلز می‌کند. مطابق شکل 2(c) در اثر دوپینگ اتم As اوربیتال‌های اسپین بالا و پایین $S-3p_z$ ، $As-4p_z$ و $Pd-d_z^2$ با هم هیبرید شده و سطح فرمی را در نقاط X و Y قطع می‌کنند. براساس شکل‌های 3-V(d,e,f) و 3-V(g,h,i) نمودار چگالی حالت‌های دوپینگ غیر فلزات P و As نشان داده شده است که اسپین‌های بالا و پایین اطراف سطح فرمی به هم نزدیک می‌شوند به طوری که برای اتم As هر دو اسپین بالا-پایین

تیهگن متقارن هستند. بنابراین انتظار می‌رود که تمام مؤلفه‌های مربوط به اتم As مطابق جدول 2 صفر باشد. با توجه به جدول 2 و همچنین شکل 4(a,b,c) نتیجه می‌شود که تمام اسپین اوربیتال‌های اتم‌های مجاور NM دوپینگی در راستای اسپین اتم NM پلاریزه می‌گردند. دومین گروه از غیر فلزاتی که دارای شماره فرد اعداد الکترون‌های لایه ظرفیت هستند، گروه هفتم $VII(s^2 p^5)$ است. با دوپینگ فلزات F، Cl، و Br به جای یک اتم S در Pd_2S_4 و با کسب الکترون از اتم‌های مجاور تمایل دارد که آرایش الکترونی خود را به صورت یون $VII^{-1}(s^2 p^6)$ تکمیل کند. از طرفی فرم آرایش الکترونی اتم S به صورت $S^{-2}(s^2 p^6)$ است اما رقابت تبادل الکترونی میان پیوند اتم‌های $S(p)-VII(p)$ با توجه به الکترونگاتیوی‌تر بودن اتم‌های گروه VII غالباً در جهت تمایل الکترون به سمت اتم‌های گروه هفتم انجام می‌پذیرد. از این رو انتظار داریم که مغناطش اتم‌های مهمان در ساختار ناچیز باشد و سهم عمده مغناطش سیستم بر عهده اتم S باشد. مطابق جدول 2 مقدار مغناطش ناشی از دوپینگ اتم F برابر با $0.66 \mu_B$ است که کاملاً بر عهده اتم S است. نمودار ساختار باند شکل 2(g) نشان می‌دهد که حالت‌های جدید ایجاد شده در ناحیه ممنوعه دارای اسپین‌های بالا-پایین نامتقارن هستند و از اوربیتال‌های $S-3p$ نشأت می‌گیرند (شکل 3-VII(a,b)). حالت ناخالصی که در باند رسانش ظاهر شده ناشی از اوربیتال‌های $S-3p$ با اسپین پایین هستند. نکته‌ای که لازم است توضیح داده شود، مقدار مغناطش اتم‌های پالادیوم همسایه اول است که صفر است اما اتم‌های پالادیوم همسایه دوم پلاریزه شده و مطابق جدول 2 و شکل 4(g) دارای اسپین بالا هستند. مقدار گاف انرژی تحت دوپینگ اتم F تا مقدار $0.41 eV$ کاهش می‌یابد. همان گونه که از جدول 2 پیدا است، با افزایش عدد دوره گروه هفتم مقدار مغناطش در ساختار زیاد می‌شود. دلیل اصلی افزایش مقدار مغناطش، افزایش فاصله بین اسپین‌های بالا و پایین اوربیتال p است که برخلاف رفتار جدایی اسپینی اتم‌های گروه پنجم است. وجود دو زوج الکترون جفت شده در گروه هفتم نسبت به گروه پنجم از دلایل اصلی افزایش جدایی اسپینی در ساختار است. بنابراین مقدار مغناطش ناشی از اتم‌های Cl و Br از اتم F بیشتر است. براساس شکل‌های 2(h,i) و جدول 2 مقدار ساختار باند اتم‌های Cl و Br به ترتیب برابر با مقادیر 0.56 و 0.57 الکترون ولت است که متناسب با جدایی اسپینی اوربیتال‌ها است. نمودار چگالی حالت شکل‌های 3-VII(d,e,f) و 3-VII(g,h,i) نشان می‌دهد که علاوه بر

یکسانی دارند. همچنین مطابق 2(d-f) ساختار باند سیستم نیمه هادی باقی مانده و مقدار گاف ناشی از دوپینگ اتم‌های O و Se به ترتیب برابر با 0.63 و 0.98 الکترون ولت است. شکل 2- VI (a-f) نشان می‌دهد که اوربیتال‌های 2p، 3p و S-2p دارای اسپین بالا و پایین یکسان هستند. مطابق شکل 4(d-f) هیچ یک از اتم‌های ناخالصی (O, Se)، اتم S و اتم Pd در میدان کریستالی جدید پلاریزه

اوربیتال‌های p_z سایر اوربیتال‌های p_x و p_y در اطراف سطح فرمی دارای اسپین‌های بالا و پایین غیر تبهگن هستند. بنابراین برخلاف اوربیتال‌های گروه پنجم که مغناطش غالباً ناشی از اوربیتال p_z است، در اینجا هر سه اوربیتال p مغناطش سهیم هستند. شکل چگالی اسپینی 4(h.i) به وضوح مقادیر اعداد داده شده در جدول 2 مربوط به پلاریزاسون را توجیه می‌کند.



شکل 2. ساختار باند غیزفلزات ناشی از دوپینگ اتم‌های N، P، As، O، Se، F، Cl، Br در ساختار Pd₂S₄

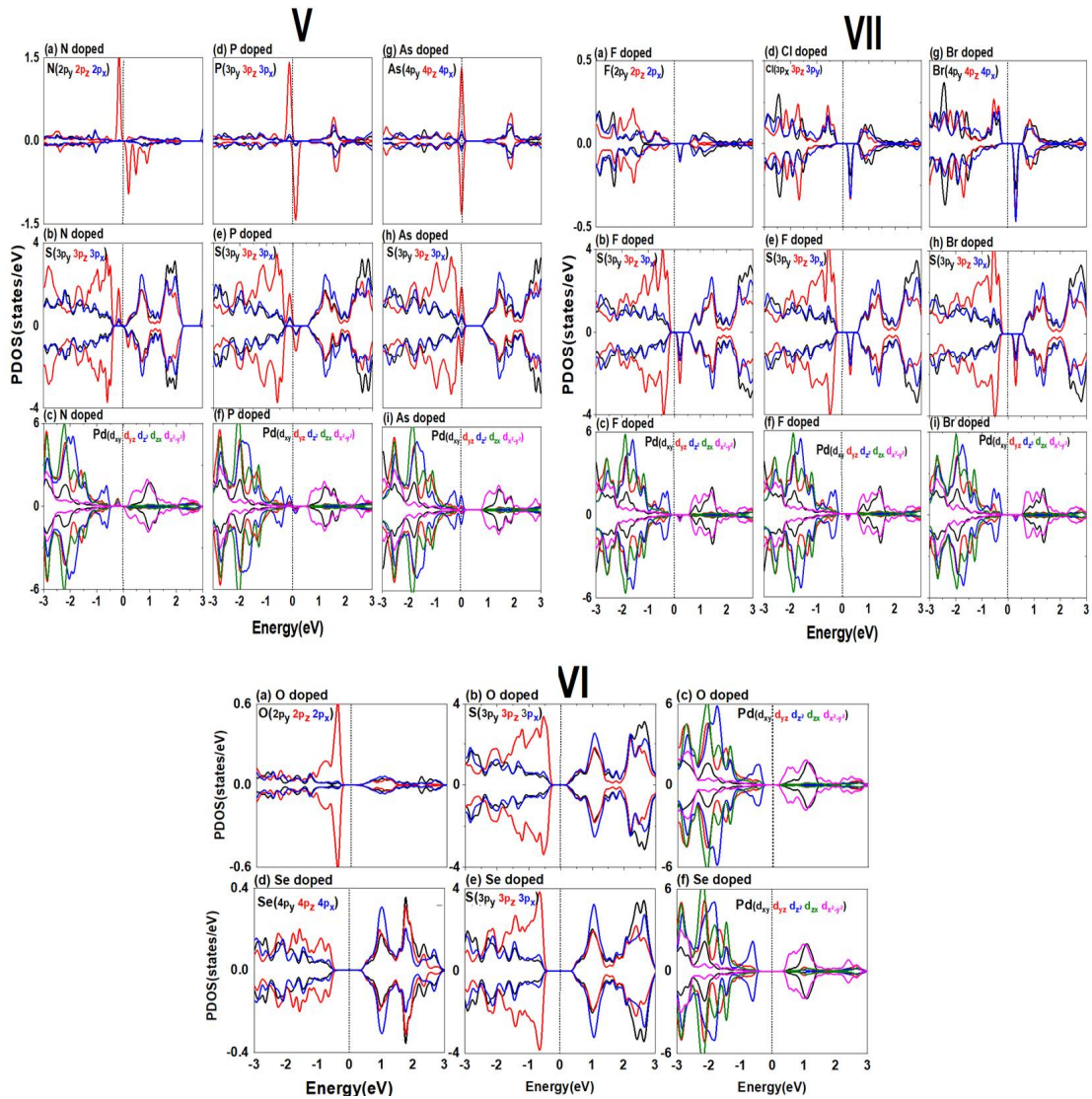
نمی‌شوند.

نتیجه‌گیری

نتایج حاصل از تحقیق به صورت زیر خلاصه می‌شود:

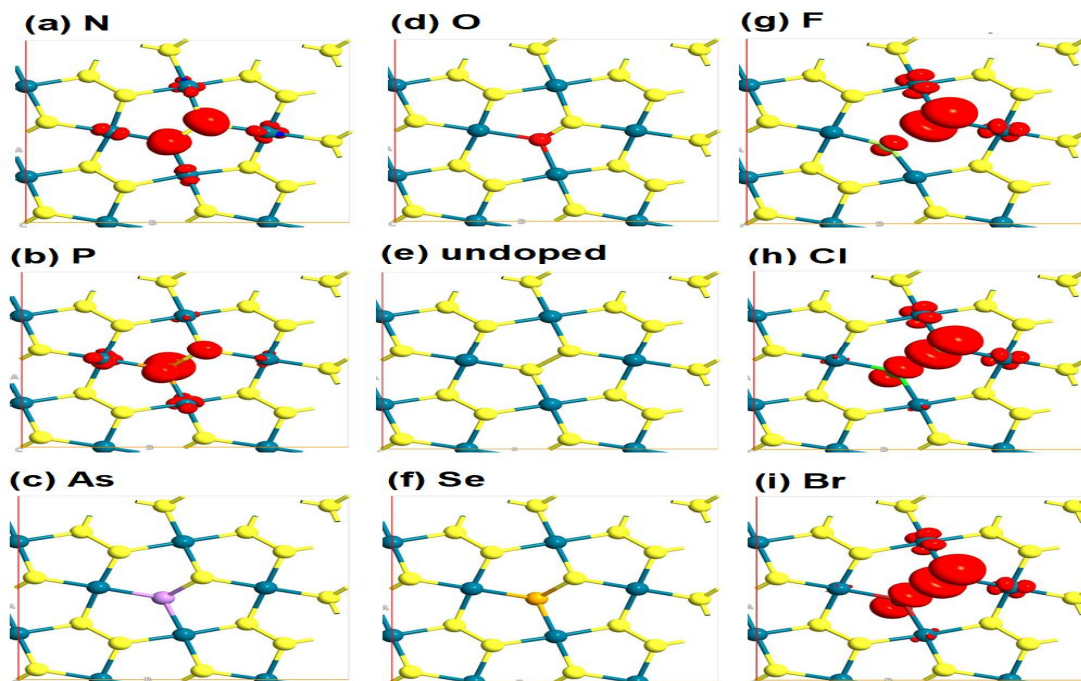
تأثیر مغناطیسی دوپینگ غیر فلزات گروه VI

دوپینگ اتم‌های گروه VI (s² p⁴) شامل O و Se مانند اتم S (بدون دوپینگ) هیچ تأثیری روی خواص مغناطیسی ساختار ندارد. هر سه اتم دارای یک زوج الکترون در لایه ظرفیت هستند و بنابراین رفتار مغناطیسی و الکترونیکی



شکل 3. نمودار چگالی حالت ناشی از دوپینگ اتم‌های گروه پنجم (N,P,As) VII. نمودار چگالی حالت ناشی از دوپینگ اتم‌های گروه هفتم (O,Se) VI. نمودار چگالی حالت ناشی از دوپینگ اتم‌های گروه ششم (F,Cl,Br) در ساختار Pd_2S_4

1. دوپینگ غیر فلزات گروه ششم (O,Se) با عدد زوج در لایه ظرفیت، در ساختار خاصیت مغناطیسی القا نمی‌کند و همچنین نیمه هادی خاصیت الکترونی خود را حفظ می‌کند.
2. تأثیر غیرفلزات گروه‌های پنج و شش کاملاً مشهود است؛ به گونه‌ای که نه تنها خاصیت مغناطیسی به سیستم می‌دهند بلکه اتم‌های گروه پنجم مقدار گاف را نیز از بین می‌برند و ساختار تبدیل به رسانا می‌شود.
3. با افزایش دوره غیرفلزات گروه پنجم مقدار جدایی اسپینی کاهش یافته و خاصیت مغناطیسی نیز از بین می‌رود ولی در غیر فلزات گروه هفتم با افزایش عدد دوره مقدار مغناطش به تبع افزایش جدایی اسپینی زیاد می‌شود.
4. مغناطش ناشی از اتم‌های دوپینگی گروه هفتم از اتم سولفور همسایه اول بیشتر است در حالی که برای اتم‌های گروه پنجم وضعیت برعکس است.



شکل 4. چگالی اسپینی الکترون‌های ناشی از دوپینگ اتم‌های N، O، As، P، N، Se، undoped، O، As، P، N، F، Se، undoped، O، As، P، N، Br و Cl در ساختار Pd_2S_4 .

References

- [1] Gjerding, M. N. et al. Recent progress of the computational 2D materials database (C2DB). *Materials* 8, (2021)044002.
- [2] X.B. Yuan, Y.L. Tian, X.W. Zhao, W.W. Yue, G.C. Hu, J.F. Ren, *Appl. Surf. Sci.* (2018), 439, 1158-1162.
- [3] Schwierz F (2010) Graphene transistors. *Nat Nanotechnol* 5:487-496.
- [4] Fiori G, Bonaccorso F, Iannaccone G, Palacios T, Neumaier D, Seabaugh A, Banerjee SK, Colombo L (2014) Erratum, *Nat Nanotechnol* 9(12):768-779.
- [5] Ryder CR, Wood JD, Wells SA, Hersam MC (2016) *ACS Nano* 10:3900-3917.
- [6] Jariwala D, Sangwan VK, Lauhon LJ, Marks TJ, Hersam MC (2014) *ACS Nano* 8(2):1102-1120
- [7] K.S. Novoselov, A.K. Geim, S.V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S.V. Dubonos, I.V. Grigorieva, A.A. Firsov, *Science* 306 (2004) 666-669.
- [8] B. Radisavljevic, A. Radenovic, J. Brivio, V. Giacometti, A. Kis, Single-layer MoS₂ transistors, *Nat. Nanotechnol.* 6 (2011) 147-150.
- [9] G.Q. Li, W.L. Wang, W.J. Yang, Y.H. Lin, H.Y. Wang, Z.T. Lin, S.Z. Zhou, a critical review, *Rep. Prog. Phys.* 79 (2016), 056501.
- [10] N. Ikeda, Y. Niiyama, H. Kambayashi, Y. Sato, T. Nomura, S. Kato, S. Yoshida, P, *IEEE* 98 (2010) 1151-1161.
- [11] X. Li, J. Yang, First-principles design of spintronics materials, *Natl. Sci. Rev.* 3 (2016) 365e381.
- [12] Lv .H.Y, Lu. W J, Shao .DF, Liu. Y, Sun. YP. *Phys. Rev. B* 92, 214419;2015
- [14] Avsar. A, et al. *Nat Nanotechnol* 7, 674-678.2019
- [15] Ma. Y, et al.,. *Phys. Chem. Chem. Phys* 13, 15546-15553;2011
- [16] Zhang. J, Zheng. H, Han. R, Du. X, Yan. Y. *Journal of Alloys and Compounds* 647, 75-81;2015
- [17] Yue. Q, Chang. Sh, Qin. Sh, Li. J. *Physics Letters A* 377, 1362-1367;2013
- [18] Yang. B, Zheng. H, Han. R, Du. X, Yan. Y.,. *RSC Adv* 4, 54335-54343.2014
- [19] Hashemi. D, Lizuka. H. *RSC Adv* 11, 6182-6187.2021.
- [20] Mojtaba Gholami, Zahra Golsanamlou & H. Rahimpour Soleimani *Scientific Reports*, 12: 10838, 2022.
- [21] Gjerding, M. N. et al. *Materials* 8, 044002, 2021.