**Квантово-химическое исследование влияния примесных атомов азота, ниобия и вакансий серы в дисульфиде молибдена на взаимодействие с литием**

***Алексеев В.А.1,2***

*Студент, 5 курс специалитета*

*1ИНХ СО РАН, Россия 630090, г. Новосибирск, Проспект Академика Лаврентьева, д.3*

*2Новосибирский государственный университет, Россия 630090, г. Новосибирск, ул. Пирогова, д.2*

*E-mail: v.alekseev@g.nsu.ru*

Дисульфид молибдена (MoS2) является интересным анодным материалом. Однако, из-за низкой электропроводности и плохой обратимости реакции конверсии чистый MoS2 требует модификации, простейшей из которых является допирование.

Влияние допирования на проводимость, фазовую стабильность MoS2 и взаимодействие с Li слабо изучено в литературе. Задачей данной работы является исследование этих свойств на примере дефектов замещения NS и NbMo, образующихся при допировании по существующим методикам [2,3]. Методом исследования был выбран квантово-химический расчёт, позволяющий ответить на эти вопросы и объяснить экспериментальные явления, не поддающиеся простой интерпретации.



Рис. 1. Парциальное плотности состояний дефектных монослоев MoS2

С помощью квантово-химического расчета в данной работе было показано, что атомы Nb и N модифицируют электронную структуру MoS2, приводя к p-допированию или появлению металлических свойств в зависимости от концентрации. Атомы Li сильнее связываются с допированным материалом, что влечет за собой увеличение потенциала по сравнению с чистым MoS2. В ходе работы были обозначены актуальные вопросы для дальнейшего исследования.

Расчеты были выполнены с помощью программы Quantum ESPRESSO [3], использующей формализм плоских волн и теорию функционала плотности. Расчеты на тестовых системах показали, что с учетом выбранных параметров программа хорошо воспроизводит экспериментальные структурные параметры, способна предсказывать свойства материалов.

**Литература**

1. Azcatl, A. et al. Covalent Nitrogen Doping and Compressive Strain in MoS2 by Remote N2 Plasma Exposure.// Nano Letters. 2016. V. 16. №. 9. P. 5437–5443.
2. Gao, H. et al. Tuning Electrical Conductance of MoS2 Monolayers through Substitutional Doping.// Nano Letters. 2020. V. 20. №. 6. P. 4095–4101.
3. https://www.quantum-espresso.org/