**Republic of Iraq**
**Ministry of Higher Education and Scientific Research**
**University of Mosul / College of Science**
**Physics Department**

# A First Principal Study of Properties of $MoS_2$ - Graphene Bilayer Heterostructures.

**Sarmand Jumaa M. Hamad**

M.Sc. Thesis

**Physics**

**Supervised by**

**Prof. Dr. Anwar M. E. Alfaidhi**

**2022 A.D.** **1444 A.H.**

# Abstract

We examine the capabilities of the Ab-initio calculations within (DFT) on the 2D Monolayer $MoS_2$, Graphene, and Gr-$MoS_2$ heterostructure. Some properties of the three hexagonal $MoS_2$, Graphene, and Gr-$MoS_2$ heterostructure such as electronic, mechanical, elastic, stability, thermal and optical properties is presented.

The energy bandgap and both (TDOS and PDOS) are calculated within the PBE functional and are enhanced by the HSE06 functional. Gr-$MoS_2$ hold an indirect bandgap (0.294 eV) while $MoS_2$ is a direct bandgap (1.83eV); moreover, Graphene is used in its metal form in our calculations.

The geometrically optimised relaxed structural parameters are (a=b=3.308 Å, c=11.961 Å), (a=b=3.156 Å, c=12.440 Å), and (a=b=2.450Å, c=7.286Å) for Gr-$MoS_2$, $MoS_2$ and Gr, respectively.

The energy bandgap of the hexagonal crystals is induced in the pressure limit (0-40) GPa. Pressure give rise to the bandgap in Gr and does not affect the $MoS_2$ bandgap significantly, whereas the minimal bandgap for Gr-$MoS_2$ changes drastically under pressure.

The pressure-dependent elastic properties reveal that the three crystals are brittle, and Gr is stiffer than the $MoS_2$.

The pressure-dependent mechanical characteristics are also studied and reported. The optical properties are calculated throughout incident photon energies (0-40) eV. The thermodynamic characteristics of the three crystals are examined and evaluated.

Most of the reported properties show agreement with the cited literature. However, we were unable to find results for the Gr-$MoS_2$ heterostructure to compare with , furthermore, to the best of the author's knowledge, many of the results of Gr-$MoS_2$ are reported first in our study.

جمهورية العراق
وزارة التعليم العالي و البحث العلمي
جامعة الموصل / كلية العلوم
قسم الفيزياء

# دراسة اولية لخصائص الهياكل غير المتجانسة ثنائية الطبقة ل الجرافين-$MoS_2$

**سرمند جمعه مرعان حمد**

رسالة ماجستير

علوم الفيزياء

**باشراف**

**أ.د. أنور مصطفى عزت الفيضي**

1444 هـ

2022 م

## الملخص

قمنا بدراسة امكانية حسابات المبادئ الاولية من خلال استخدام نظرية (DFT) على الطبقة الاحادية ($MoS_2$) والجرافين والهيكل غير المتجانس (Gr- $MoS_2$). وقد تم دراسة الاستقرارية و الخواص المرنة و الميكانيكية و الالكترونية و البصرية للتراكيب السداسية الثلاث الجرافين و ($MoS_2$) و الهيكل غير المتجانس (Gr- $MoS_2$).

تم حساب فجوة الطاقة وكل من كثافة المستويات الجزئية والكلية من خلال ( PBE Functional) و التي تم تعزيزها بـ (HSE06 Functional). وقد وجد أن (Gr- $MoS_2$) يمتلك فجوة طاقة غير مباشرة مقدارها (0.294 eV) بينما ($MoS_2$) يمتلك فجوة طاقة مباشرة مقدارها (1.83 eV). وفي حساباتنا تم استخدام الجرافين بهيئته المعدنية.

وقد وجد ان معاملات الاسترخاء الهيكلية المحسنة هندسيا كانت ( a=b=3.308 Å, c=11.961 Å) (a=b=3.156 Å, c=12.440 Å) و (a=b=2.450Å, c=7.286Å) (Gr- $MoS_2$ و $MoS_2$ و Gr)على التوالي. تم ايجاد فجوة الطاقة للبلورات السداسية الثلاث تحت ضغط يتراوح بين (0-40 GPA). اثّر الضغط المسلط على زيادة فجوة الطاقة في الجرافين و لم يأثر على فجوة الطاقة لل ($MoS_2$) بشكل واضح ,بينما الحد الادنى لفجوة الطاقة (Gr-$MoS_2$) تغير بشكل جذري تحت تأثير الضغط .أظهرت خواص المرونة المعتمدة على الضغط بأن البلورات الثلاث كانت هشة و ان الجرافين اصلب من ($MoS_2$).

تم ايضا حساب الخواص الميكانيكة للبلورات الثلاث. وكذلك تم حساب الخواص البصرية من خلال طاقات الفوتون الساقط بمدى (0-40 eV). وقد تم ايضا دراسة وحساب الخواص الثيرموداينميكية للبلورات الثلاث.

وكما أظهرت معظم الخواص التي تم دراستها توافقا مع البحوث المنشورة في هذا المجال. علاوة على ذلك, لم نتمكن من العثور على اي نتائج عملية ولا نظرية لل (Gr-$MoS_2$) غير المتجانس توافق بحثنا. وتوصلنا الى أن العديد من نتائج ال (Gr-$MoS_2$) تم حسابها لأول مرة في هذة الرسالة.