

Моделирование воздействия ионов N_2^+ низкой энергии на монослой MoS_2

А.А. Соловых^{1,2*}

¹Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,
физический факультет, кафедра атомной физики, физики плазмы и микроэлектроники
Россия, 119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 2

²Научно-исследовательский институт ядерной физики имени Д.В. Скобельцына
Россия, 119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 2

(Поступила в редакцию 10.06.2024; подписана в печать 10.07.2024)

Квазидвумерный дисульфид молибдена представляет собой перспективный полупроводниковый материал для создания элементов нанoeлектроники благодаря тому, что ширина его запрещенной зоны может изменяться путем приложения механических напряжений, воздействия электрическим полем, а также легированием, которое можно осуществить при обработке. Однако, поскольку ионы плазмы могут приводить к деградации материала и появлению нежелательных изменений структуры, необходимо тщательно исследовать механизмы их взаимодействия с материалом, возникающие при этом эффекты и степень повреждения пленок. В настоящей работе с помощью динамического моделирования методом теории функционала плотности (DFT) с использованием алгоритмов молекулярной динамики было исследовано воздействие ионов N_2^+ с начальной энергией E_0 от 5 до 30 эВ на монослой MoS_2 для различных областей удара и начальных ориентаций налетающих частиц. Полученные результаты показали, что ионы N_2^+ с начальной энергией $E_0 \leq 15$ эВ не создают постоянных дефектов и отражаются от поверхности, в то время как частицы с энергией 20–30 эВ вызывают модификацию материала и образование в нем дефектов. Полученные результаты могут быть использованы для оптимизации технологии обработки квазидвумерных образцов MoS_2 плазмой N_2 .

PACS: 52.40.Nf.

УДК: 533.924.

Ключевые слова: квазидвумерный дисульфид молибдена, азотная плазма, моделирование, теория функционала плотности.

ВВЕДЕНИЕ

Квазидвумерный дисульфид молибдена является перспективным полупроводниковым материалом для создания элементов нанoeлектроники благодаря его уникальным механическим, электрическим и оптическим свойствам [1, 2], а также возможности направленного изменения этих свойств с помощью различных внешних воздействий: например, приложением механического напряжения или электрического поля, изменением числа слоев, а также легированием [3, 4]. При производстве элементов электроники выполняется большое количество технологических операций с использованием низкотемпературной плазмы, которые включают в себя травление, легирование, очистку поверхности и т.д. При этом ионы плазмы способны вызывать значительное повреждение ультратонких материалов, что может приводить к нежелательным изменениям их структуры и свойств [4, 5]. Следовательно, для контролируемого изменения свойств MoS_2 и создания надежной технологии плазменной обработки подобных ультратонких пленок необходимо выполнение тщательного анализа эффектов, возникающих в них под действием ионов.

К настоящему времени в литературе содержится ограниченное число теоретических и экспериментальных работ, в которых рассматривалось воздействие

азотной плазмы на квазидвумерный дисульфид молибдена [6, 7]. Так, например, в НИИЯФ МГУ была проведена серия экспериментов [8], в которых основными воздействующими частицами являлись тепловые атомы N и ионы N_2^+ низкой (~20–25 эВ) энергии. В данных экспериментах было обнаружено, что воздействие азотной плазмы может приводить к модификации и заметному повреждению приповерхностных слоев пленок за счет удаления серы и ее замещения азотом, вследствие чего происходит существенное изменение их свойств.

Целью настоящей работы является компьютерное моделирование воздействия ионов азотной плазмы N_2^+ низкой энергии на ультратонкие пленки MoS_2 для выявления основных механизмов образования дефектов в монослое и возникающих при этом эффектов, связанных, в том числе, с изменением структуры и свойств пленок.

1. МЕТОДИКА

Для изучения процессов воздействия ионов азотной плазмы на материал применялся квантовомеханический метод теории функционала плотности (density functional theory, DFT). Расчеты методом DFT выполнялись в рамках обобщенного градиентного приближения GGA+U [9] с обменно-корреляционным функционалом PBE (Perdew–Burke–Ernzerhof) в базе плоских волн с псевдопотенциалами класса PAW (projector

* solovykh.aa19@physics.msu.ru

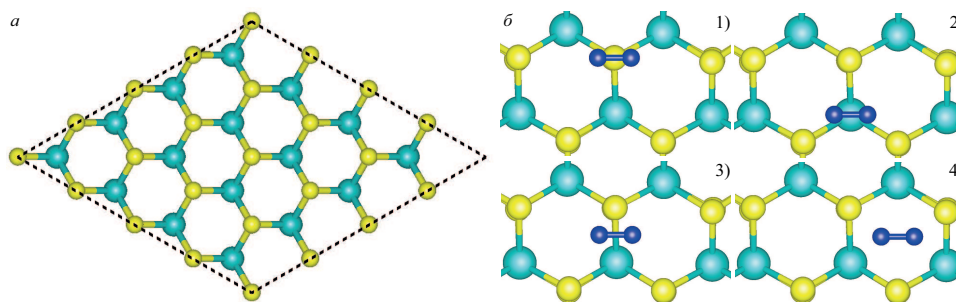


Рис. 1. *a* — Изображение модели MoS_2 , *б* — области удара: 1 — S, 2 — Mo, 3 — Mo-S связь, 4 — центр шестиугольника, образованного атомами Mo и S. Большие зеленые шарики соответствуют атомам Mo, желтые — атомам S, маленькие синие — атомам N

augmented wave) [10]. Эволюция системы моделировалась с использованием алгоритмов молекулярной динамики Борна-Оппенгеймера, реализованных в GPU-версии программного пакета VASP [11] с использованием суперкомпьютера «Ломоносов-2» [12]. В качестве модели монослоя использовалась ячейка размером $12.7 \times 12.7 \text{ \AA}^2$ (4×4 элементарных ячейки) с вакуумным промежутком между слоями порядка 20 \AA (рис. 1, *a*). В связи с высокими вычислительными затратами при динамическом моделировании был выбран ограниченный набор k -точек $2 \times 2 \times 1$. Налетающий ион размещался на высоте 3 \AA над поверхностью монослоя. С целью для более детального анализа возможных эффектов, возникающих в результате воздействия ионов на материал, были рассмотрены различные области удара N_2^+ (рис. 1, *б*) для двух начальных ориентаций ионов: параллельно и перпендикулярно поверхности монослоя (далее горизонтально и вертикально-ориентированные ионы). Начальная энергия частиц E_0 варьировалась от 5 до 30 эВ, а временной шаг выбирался равным 0.01–0.1 фс в зависимости от E_0 . Средняя длительность одной траектории составила до 5×10^2 фс, а время расчета одной траектории — 96 часов.

2. РЕЗУЛЬТАТИВНАЯ ЧАСТЬ

Для выявления основных механизмов образования дефектов в дисульфиде молибдена и возникающих при этом эффектов в настоящей работе были детально изучены различные траектории налетающих частиц. В ходе анализа была обнаружена зависимость между начальной энергией E_0 налетающих частиц и возникающими эффектами. В связи с этим результаты были разделены на три группы в зависимости от E_0 : 1 — 5–10 эВ, 2 — 15 эВ и 3 — 20–30 эВ.

2.1. Ионы низкой (5–10 эВ) энергии

Во всех рассмотренных случаях ионы с начальной энергией $E_0 = 5 - 10$ эВ сразу после удара отражались

от поверхности монослоя, который практически не испытывал повреждений, а параметры, характеризующие движение улетающих молекул, в существенной степени зависели от области удара и начальной ориентации.

Сначала проанализируем расчетные данные, описывающие движение воздействующих частиц. На рис. 2 представлено сравнение временных зависимостей кинетической энергии до и после удара частиц с $E_0 = 5$ эВ в область атома S при различной начальной ориентации, а также показаны изображения моделей в определенные моменты времени. Для каждого случая приведены две кривые, которые соответствуют полной кинетической энергии E и энергии поступательного движения (энергии центра масс) E_{CM} частицы. Как видно из рис. 2, *a*, при горизонтальной ориентации обе кривые близки, что свидетельствует об отсутствии колебательно-вращательного движения улетающей молекулы. Поскольку на достаточном удалении от монослоя энергия поступательного движения частицы становится постоянной (~ 1.9 эВ), то из графика легко определить характерное время взаимодействия $t_{int} = 70$ фс. При вертикальной ориентации частицы (рис. 2, *б*) t_{int} незначительно возрастает (до 85 фс), но более важным отличием от предыдущего случая является заметное расхождение кривых соответствующих полной кинетической и поступательной энергий молекулы N_2 : на больших временах разность этих энергий составляет $\Delta E = E - E_{CM} = 0.46$ эВ, в то время как для горизонтальной ориентации $\Delta E = 0.04$ эВ.

Причина такого расхождения заключается в том, что, как хорошо видно из изображений модели на рис. 2, *a*, *б*, при вертикальной начальной ориентации молекула после удара начинает интенсивно вращаться, в то время как при горизонтальной ориентации этого не происходит. Детальный анализ траекторий молекул N_2 позволил оценить энергии вращательного и колебательного движения (E_{rot} и E_{vib} соответственно). Временные зависимости E_{rot} и $E_{rot} + E_{vib}$, приведенные на рис. 2, *в*, наглядно демонстрируют возбуждение колебательно-вращательных степеней свободы молекулы при вертикальной ориентации. В этом случае основной вклад в ΔE вносит энергия вращательного движения ($E_{rot} = 0.42$ эВ), в то время как наличие

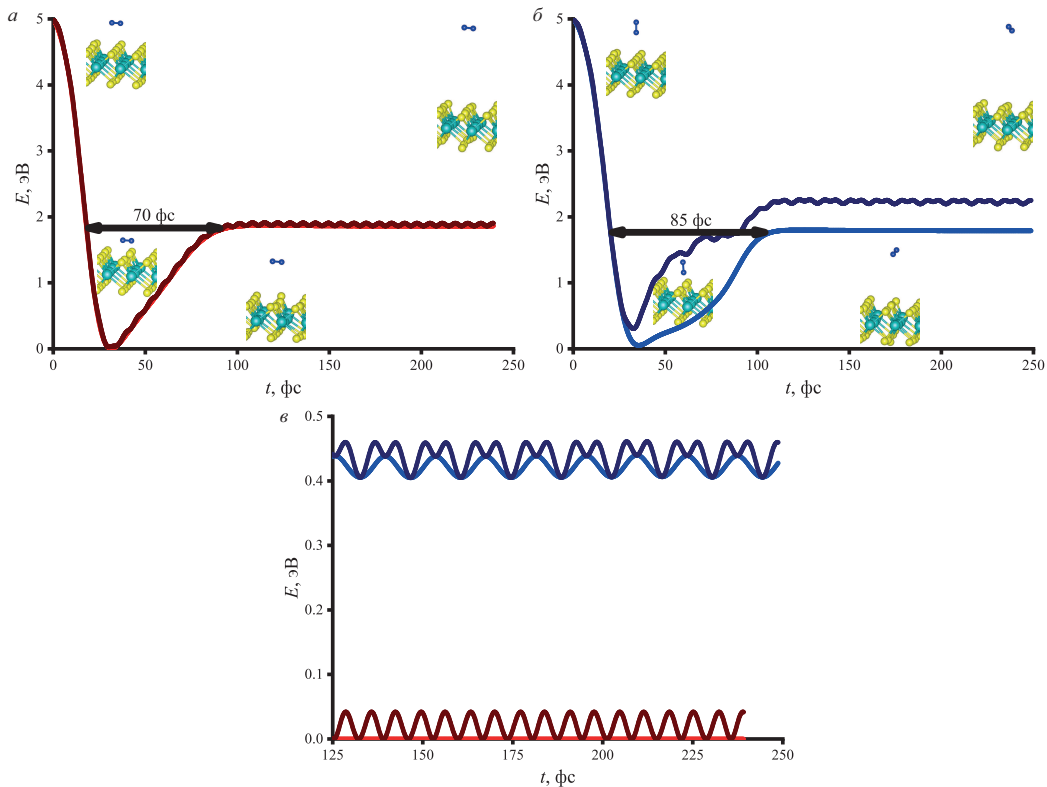


Рис. 2. *a, б* — Временные зависимости полной кинетической энергии E (тонкие темные кривые) и энергии поступательного движения E_{CM} (утолщенные светлые кривые) для удара горизонтально- (*a*) и вертикально-ориентированного (*б*) иона N_2^+ с энергией $E_0 = 5$ эВ в область атома S, *в* — временные зависимости вкладов в кинетическую энергию за счет вращательного (E_{rot} , тонкие кривые) и вращательно-колебательного ($E_{rot} + E_{vib}$, утолщенные кривые) движения для указанных случаев

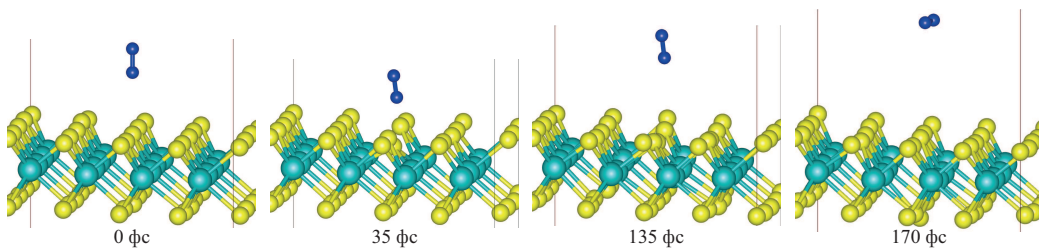


Рис. 3. Последовательные изменения положений атомов монослоя и налетающей частицы для случая начального удара вертикально-ориентированного иона с $E_0 = 5$ эВ в область атома S в отмеченные моменты времени

пренебрежимо малого вклада, связанного с колебаниями ($E_{vib} \sim 0.02 - 0.05$ эВ) обусловлено отсутствием квантования движения ядер в пакете VASP.

В таблице представлены основные рассчитанные параметры покидающих поверхность молекул: минимальное расстояние до центра монослоя z_{min} , отношение полной кинетической энергии улетающей молекулы E_{fin} и начальной энергии E_0 , относительные вклады в E_{fin} кинетической энергии за счет вращательного (E_{rot}) и колебательного (E_{vib}) движения, а также угол отражения N_2 от монослоя, т.е. угол между нормалью к поверхности материала и вектором скорости улетающей молекулы. Несмотря на то, что при различной начальной энергии E_0 (5 и 10 эВ) значения этих

параметров различаются, общий характер взаимодействия ионов с поверхностью в этих случаях не меняется, поэтому более важным является сравнение данных для разных областей удара и ориентаций ионов. Указанные факторы значительно влияют на минимальное расстояние между одним из налетающих атомов и центральной плоскостью монослоя z_{min} и на угол отражения, поскольку для воздействующих частиц поверхность монослоя не является идеально ровной. Например, при ударе вертикально-ориентированного иона с $E_0 = 5$ эВ в атом S расстояние z_{min} равно ~ 3.1 Å, а в центр шестиугольника — 2.2 Å. Углы вылета молекул N_2 в основном не превышают 10–15°, но удар в область Mo–S связи при вертикальной начальной ори-

Таблица. Параметры отраженных от поверхности монослоя молекул N_2 с $E_0 = 5$ и 10 эВ

Область удара	Начальная ориентация	E_0 , эВ	z_{min} , Å	Угол отражения	E_{fin}/E_0 , %	E_{rot}/E_{fin} , %	E_{vib}/E_{fin} , %
Mo-S	Горизонтальная	5	3.0	14.1	55	0.2	1.5
		10	2.5	5.5	45	1.5	1.1
Mo-S	Вертикальная	5	2.8	23.5	79	8.3	0.9
		10	2.3	18.8	63	17.2	0.4
Mo	Горизонтальная	5	2.8	10.3	65	0	1.4
		10	2.4	11.5	50	0	0.8
Mo	Вертикальная	5	2.5	11.2	64	0	1.3
		10	1.9	4.2	29	0.5	1.4
S	Горизонтальная	5	3.3	4.5	38	0	2.2
		10	2.4	4.8	59	2.9	1.4
S	Вертикальная	5	3.1	16.0	45	18.6	1.6
		10	2.4	11.9	54	17.1	6.9
Центр шестиугольника	Горизонтальная	5	3.3	7.6	38	0.1	2.1
		10	2.2	5.5	57	0	0.7
Центр шестиугольника	Вертикальная	5	2.2	2.4	67	1.3	0
		10	1.7	2.1	46	0.6	0

ентации характеризуется углом отражения $\sim 20-25^\circ$, поскольку эта связь расположена под углом к плоскости монослоя. Отношение E_{fin}/E_0 в среднем составляет 55% и в большей степени определяется областью удара иона, не демонстрируя явную зависимость от E_0 или начальной ориентации N_2^+ . Доля вращательной энергии E_{rot}/E_{fin} оказывается значительно выше при вертикальной ориентации, поскольку именно в этом случае силы, действующие со стороны монослоя на атомы N, вызывают появление большого вращательного момента. Отметим, что только в нескольких рассчитанных траекториях, а именно при ударе вертикально-ориентированного иона в область атома S, в отлетающей молекуле N_2 возникали заметные колебания с энергией ~ 0.37 эВ (поскольку квант колебаний молекулы N_2 равен 0.29 эВ [13], то можно приближенно считать, что полученная энергия соответствует нижнему возбужденному колебательному состоянию).

Как было отмечено выше, при обработке результатов было выяснено, что в рассматриваемом случае монослой практически не испытывал повреждений — под действием налетающих частиц происходило смещение атомов S из узлов решетки, инициирующее колебания атомов в монослое, но возникающие деформации были локализованы в ближайшей окрестности области удара (рис. 3). Как видно из данных табл. 1, энергия, передаваемая мишени, могла достигать 60–70% от начальной энергии иона E_0 , что приводило к повышению температуры монослоя до 500–650 K в зависимости от области удара (эта оценка сделана для $E_0 = 10$ эВ). Однако характерный масштаб времени для процессов диссипации энергии и релаксации монослоя составля-

ет $10^{-11} - 10^{-6}$ с, что на несколько порядков меньше, чем время между последовательными ударами ионов в область ячейки с площадью $\sim 140 \text{ \AA}^2$ в экспериментах при плотности потока ионов $10^{14} - 10^{15} \text{ см}^{-2} \cdot \text{с}^{-1}$ [8], т.е. примерно 0.1–1.0 с. Благодаря этому можно считать, что структурные изменения и некоторый нагрев монослоя, выявленные при моделировании, исчезнут в результате релаксации за интервал времени между последовательными ударами.

2.2. Ионы с энергией 15 эВ

В случае $E_0 = 15$ эВ энергии налетающих частиц становится достаточно для приближения к поверхности материала на расстояние порядка 1.5–1.6 Å, при котором начинает происходить более активный обмен энергией между атомами материала и N_2 . Благодаря этому возникающие в монослое деформации оказываются существенно больше, чем при $E_0 = 5 - 10$ эВ, однако в большинстве рассчитанных траекторий энергии иона оказалось недостаточно для образования дефектов материала. Однако в отдельных случаях такое взаимодействие приводило к диссоциации молекулы на атомы N, которые могли проникнуть под слой атомов S и вызвать их смещение из узлов решетки.

При анализе расчетных данных было обнаружено, что время взаимодействия t_{int} для большинства траекторий значительно возрастает по сравнению с рассмотренным выше случаем и заметно отличается для различных областей удара и начальной ориентации ионов. Поскольку горизонтально-ориентированные ча-

стицы активнее обмениваются энергией с атомами монослоя, а при ударе в область атома Mo и центра шестиугольника частицы проникают на максимальную глубину, время взаимодействия t_{int} , например, при ударе горизонтально-ориентированного N_2^+ в область атома Mo может достигать 300 фс. При ударе горизонтально-ориентированной молекулы в область Mo-S связи и S, когда N_2 не может проникнуть под приповерхностный слой материала, значение t_{int} оказывается равным ~ 160 и 140 фс соответственно (рис. 4). В случае вертикальной ориентации налетающих частиц (удар в область Mo и центра шестиугольника) t_{int} оказывается сопоставимым со случаем $E_0 = 5 - 10$ эВ.

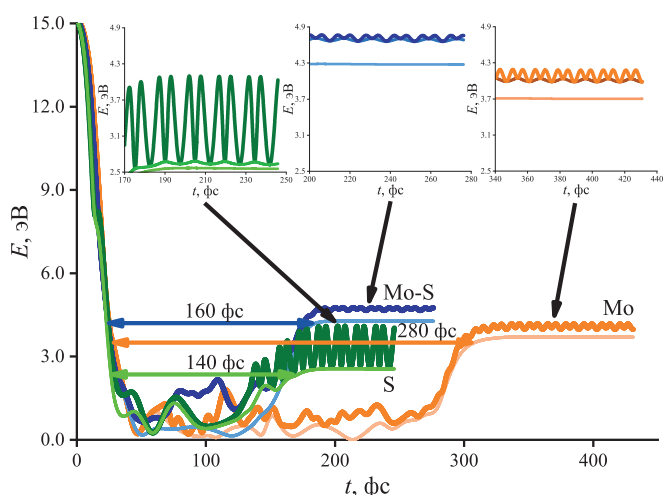


Рис. 4. Временные зависимости полной кинетической энергии E (утолщенные темные кривые) и энергии поступательного движения E_{CM} (тонкие светлые кривые) при ударе горизонтально-ориентированных ионов вблизи атома Mo (желтые), S (зеленые кривые) и в область Mo-S связи (синие кривые). На врезках для каждого из рассматриваемых случаев приведены зависимости E_{CM} , $E_{CM} + E_{rot}$ и $E_{fin} = E_{CM} + E_{rot} + E_{vib}$

В силу того, что происходит активный обмен энергией между N_2 и монослоем в течение $t_{int} \sim 100-300$ фс, в монослой возбуждаются более интенсивные колебания, что, в частности, проявляется в значительном увеличении температуры монослоя вплоть до ~ 1000 К. Для улетающей молекулы N_2 отношение E_{fin}/E_0 оказывается значительно меньше по сравнению с $E_0 = 5 - 10$ эВ и составляет около 20–30%. Отметим, что теперь энергия вращения молекулы E_{rot} в среднем равна $\sim 0.3-0.4$ эВ и в большинстве случаев значительно превышает колебательную энергию, однако удар в область атома S при вертикальной начальной ориентации иона N_2^+ приводит к возбуждению интенсивных колебаний с характерной энергией $E_{vib} \sim 1.4$ эВ (она приближенно соответствует возбужденному колебательному состоянию с $\nu = 4 - 5$).

Отдельно стоит выделить удар в область центра шестиугольника. В данном случае вертикально-

ориентированный ион в результате удара теряет большую часть своей начальной энергии ($\sim 94\%$) и застревает в монослое. При горизонтальной ориентации иона происходит его диссоциация на атомы N с последующим замещением атомов S и их вытеснением из узлов решетки, в результате чего образуются поверхностные группы –NS.

2.3. Ионы с энергией 20–30 эВ

При последующем увеличении E_0 и переходе в область энергий от 20 до 30 эВ для большинства рассмотренных случаев наблюдалась диссоциация налетающего иона на атомы N и интенсивное образование дефектов в монослое. При этом возможны разнообразные физико-химические процессы, такие как, формирование вакансий за счет удаления серы в составе радикала SN или модификация поверхности монослоя за счет вытеснения атомов серы азотом. При этом механизм взаимодействия и его результат, как и в случае более низких энергий, определяется величиной E_0 , областью удара иона и его начальной ориентацией.

Рассмотрим сначала взаимодействие, приводящее к модификации материала, а именно к замещению серы атомами N. Такие процессы происходят преимущественно при E_0 в диапазоне от 20 до 25 эВ. Рис. 5 иллюстрирует возможный механизм взаимодействия иона с монослоем при ударе горизонтально-ориентированного N_2^+ с $E_0 = 20$ эВ в область атома Mo. Налетающая частица проникает под приповерхностный слой материала и распадается на атомы N, которые легко вытесняют атомы S из узлов решетки, что приводит к образованию на поверхности монослоя атомов S, т.е. поверхностных групп –NS. Стоит отметить, что в ряде случаев вытесненные атомы могут образовывать молекулу S_2 и покидать поверхность, однако, для траектории на рис. 5 энергии S_2 оказывается недостаточно для разрыва S–N связи, вследствие чего на поверхности образуется группа N–S–S–N (скорее всего, она распадется со временем, но в рассчитанных траекториях длительностью $\sim 10^3$ фс этого не происходило).

С ростом энергии вероятность модификации материала становится существенно меньше по сравнению с процессом отрыва радикала SN. При E_0 более 25 эВ энергия атомов N, образующихся в результате диссоциации налетающего иона, оказывается настолько большой, что образуются радикалы SN, которые покидают поверхность с относительно высокой энергией. Так, в случае удара горизонтально-ориентированного N_2^+ с $E_0 = 30$ эВ в область атома Mo (рис. 6), полная кинетическая энергия радикалов SN составила 2.8 и 2.9 эВ со значениями $E_{rot} + E_{vib}$ равными 0.2 и 0.8 эВ соответственно, где колебательная энергия второго радикала составила $E_{vib} = 0.4$ эВ, что примерно соответствует энергии второго возбужденного колебательного состояния.

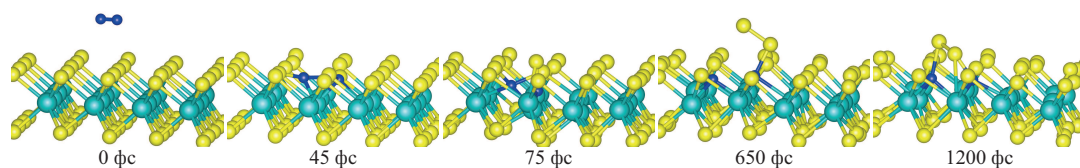


Рис. 5. Последовательные изменения положений атомов в отмеченные моменты времени для случая удара горизонтально-ориентированного N_2^+ с $E_0 = 20$ эВ в область Mo–S связи

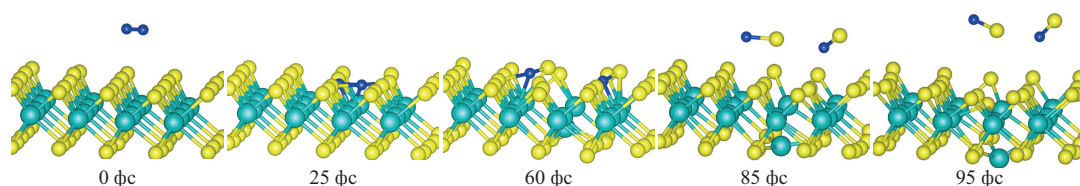


Рис. 6. Последовательные изменения положений атомов в отмеченные моменты времени для случая удара горизонтально-ориентированного N_2^+ с $E_0 = 30$ эВ в область атома Mo

Поверхность материала в результате воздействия ионов с энергией 20–30 эВ испытывает сильные деформации, что проявляется в значительном смещении атомов монослоя из их равновесного положения. Так, из рис. 5 видно, что при $E_0 = 20$ эВ происходит сдвиг не только находящихся на поверхности атомов S, но и более глубоко лежащих атомов Mo, также атомов S в нижнем слое. С увеличением E_0 до 30 эВ энергии, которая передается атому Mo (~6 эВ), оказывается достаточно для того, чтобы сместить его из узла решетки и, возможно, вынудить покинуть монослой.

В зависимости от области удара в рассматриваемом диапазоне энергий возможны также процессы, в которых один из атомов N замещает серу, а второй улетает в составе радикала SN. Для областей удара в атомы Mo и S, а также в центр шестиугольника при вертикальной ориентации ионов механизмы взаимодействия отличаются от описанных выше. Так, при ударе в центр шестиугольника оказывается возможным проникновение N_2 в более глубоко лежащие слои материала, а в атом Mo или S — рассеяние налетающих частиц с передачей 75–85% от E_0 атомам, в которые

приходится удар, в результате чего атомы Mo или S проникают в более глубокие слои материала.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

На основании полученных результатов можно сделать следующие выводы. Ионы N_2^+ с начальной энергией $E_0 \leq 15$ эВ не создают постоянных дефектов и отражаются от поверхности материала, а при увеличении E_0 могут происходить процессы, связанные с модификацией материала и образованием в нем дефектов, наиболее вероятными из которых являются внедрение атомов N в структуру монослоя и удаление атомов S в составе летучих молекул SN. Представленные в настоящей работе результаты могут быть использованы для оптимизации технологии обработки квазидвумерных образцов MoS_2 плазмой N_2 .

Автор выражает благодарность профессору Е. Н. Ворониной за консультацию в процессе подготовки работы и плодотворные обсуждения.

Работа выполнена при поддержке фонда «Базис» (грант № 23-2-9-53-1).

- [1] Samy O., Zeng S., Birowosuto M.D., Moutaouakil A.El. // Crystals. **11**, N 4. (2021).
- [2] Li X., Zhu H. // Journal of Materiomics. **1**, N 1. 33. (2015).
- [3] Wang Z.M. MoS_2 . Materials, Physics, and Devices. Springer, 2014.
- [4] Чернозатонский Л.А., Артюх А.А. // УФН. **188**, № 1. 3. (2018).
- [5] Gupta D., Chauhan V., Kumar R. // Inorganic Chem. Comm. **121**, 108200. (2020).
- [6] Azcatl A., Qin X., Prakash A. et al. // Nano Letters. **16**, 5437. (2016).
- [7] Jiang J., Yang P., Liou J.J. et al. // J. Phys. D. **50**, 154001. (2017).
- [8] Мележенко Д.Е., Лопачев Д.В., Зотович А.И., Ворониная Е.Н. // Письма в ЖТФ. **48**, № 22. 28. (2022).
- [9] Dudarev S.L., Botton G A., Savrasov S.Y. et al. // Phys. Rev. B. **57**, 1505. (1998).
- [10] Kresse G., Joubert D. // Phys. Rev. **59**, N 3. 1758. (1999).
- [11] Kresse G., Furthmüller J. // Phys. Rev. B. **54**, 11169. (1996).
- [12] Voevodin V.V., Antonov A.S., Nikitenko D.A. et al. // Supercomp Frontiers and Innov. **6**, N 2. 4. (2019).
- [13] Хьюбер К.П., Герцберге Г. Константы двухатомных молекул. Мир, 1984.

Modeling the effect of low-energy N_2^+ ions on MoS_2 monolayers**A.A. Solovykh^{1,2}**¹*Department of Atomic Physics, Plasma Physics and Microelectronics, Faculty of Physics, Lomonosov Moscow State University
Moscow 119991, Russia*²*Skobeltsyn Institute of Nuclear Physics, Lomonosov Moscow State University
Moscow 119991, Russia**E-mail: solovykh.aa19@physics.msu.ru*

Quasi-two-dimensional molybdenum disulfide is a promising semiconductor material for creating nanoelectronics elements due to the fact that the width of its band gap can be changed by applying mechanical stresses, exposure to an electric field, as well as doping, which can be carried out during processing. However, since plasma ions can lead to degradation of the material and the appearance of undesirable structural changes, it is necessary to carefully investigate the mechanisms of their interaction with the material, the resulting effects and the degree of damage to the films. In this paper, the effect of N_2^+ ions with an initial energy E_0 from 5 to 30 eV on a MoS_2 monolayer for various impact regions and initial orientations of incoming particles was studied with the help of density functional theory (DFT) dynamic modeling with molecular dynamics algorithms. The results showed that N_2^+ ions with an initial energy of $E_0 \leq 15$ eV do not create permanent defects and are reflected from the surface, while particles with energy of 20-30 eV cause modification of the material and the formation of defects in it. The presented results can be used for optimization of the quasi-two-dimensional MoS_2 samples processing technology with N_2 plasma.

PACS: 52.40.Hf.

Keywords: quasi-two-dimensional molybdenum disulfide, nitrogen plasma, modeling, density functional theory.*Received 10 June 2024.***Сведения об авторе**

Соловых Александр Алексеевич — студент; e-mail: solovykh.aa19@physics.msu.ru.