

Project title:**English: Functionalization of ultrathin MoS₂ by defect engineering****German: Funktionalisierung von ultradünnem MoS₂ durch maßgeschneiderte Defekte**

Marika Schleberger Universität Duisburg-Essen (Principal Investigator)

Arkady Krashennikov, Helmholtz-Zentrum Dresden-Rossendorf (Co-Principal Investigator)

The overall goal of this project is to develop strategies to functionalize 2D materials by means of ion-induced electronic excitations. The energy deposition via electronic excitations gives rise to defects which clearly differ from those created by conventional (i.e. singly charged keV) ion beams with respect to type, size and efficiency. The ion-induced defects will be further modified e.g. by the adsorption of precursor gases or molecules. Our objective is to identify and quantify the relevant defect creation mechanisms by systematic experiments on single layer MoS₂ - as a representative of the material class of transition metal dichalcogenides - in combination with theoretical modelling. This approach builds the basis for efficient defect engineering strategies, i.e. it will enable us to predict and choose the optimum parameters for the controlled fabrication of a certain defect structure in a given sample. In particular, we will focus our attention on the functionalization of single layer MoS₂ for three different applications, each of which is based on a specific defect type. Based on our preliminary work these are: nanosized pores with a small size distribution suitable for water desalination or DNA sequencing, desulfurized MoS₂ nanostructures suitable for the hydrogen evolution reaction (HER), and defect engineered MoS₂ field effect transistors which may be used as optoelectronic switches.

Ziel des Projektes ist es, Strategien zur Funktionalisierung von 2D-Materialien mittels ioneninduzierter elektronischer Anregung zu entwickeln. Die Energiedeposition über elektronische Anregung verursacht Defekte, die sich in Bezug auf Art, Größe und Effizienz klar von solchen unterscheiden, die mit konventionellen Ionenstrahlen (d.h. einfach geladen, kinetische Energien bis einige keV) erzielt werden können. Die ioneninduzierten Defekte sollen weiterhin z.B. über die Adsorption von Precursor-Gasen oder Molekülen modifiziert werden. Unser Ziel ist es, die relevanten Mechanismen anhand systematischer Experimente an MoS₂ Einzellagen - stellvertretend für die Gruppe der zweidimensionalen Übergangsmetalldichalcogenide - in Kombination mit theoretischer Modellierung zu identifizieren und zu quantifizieren. Dieser Zugang bildet die Basis für effiziente "defect engineering"-Strategien, d.h. optimale Parameter für die kontrollierte Erzeugung einer gegebenen Defektstruktur in einem Material. Insbesondere sollen MoS₂-Einzellagen im Hinblick auf drei Anwendungen funktionalisiert werden, die jeweils auf einem spezifischen Defekttyp basieren. Diese sind: Nanoskalige Poren mit schmaler Größenverteilung für die Umkehrosmose oder die DNA-Sequenzierung, schwefelarme MoS₂-Nanostrukturen für die katalytische Umsetzung von Wasser zu Wasserstoff, und defektreiche MoS₂-Feldeffekttransistoren, die als optoelektronische Schalter fungieren.