

## СТРУКТУРА И ФОТОКАТАЛИТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА УГЛЕРОДНОГО КАТОДА С НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫМ ТОНКОПЛЕНОЧНЫМ ПОКРЫТИЕМ $\text{MoS}_x/\text{WS}_2/\text{WSe}_2$ ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ ВОДОРОДА

© 2026 г. О. В. Рубинковская<sup>а</sup>, \*, Д. В. Фоминский<sup>а</sup>, Р. И. Романов<sup>а</sup>, В. Ю. Фоминский<sup>а</sup>

<sup>а</sup>Национальный исследовательский ядерный университет “МИФИ”, Москва, 115409 Россия

\*E-mail: ovrubinkovskaya@mephi.ru

Поступила в редакцию 06.05.2025 г.

После доработки 06.05.2025 г.

Принята к публикации 12.05.2025 г.

Разработка и применение многослойных полупроводниковых каталитических наноструктур на основе халькогенидов переходных металлов (ХПМ), обладающих заданной энергетической зонной структурой, представляет собой перспективное направление в водородной отрасли. Электрические поля в контактной области гетеропереходов способствуют разделению и ускоренному переносу неравновесных свето-индуцированных носителей в объеме фотоактивного материала нанокатализаторов. В работе исследована наноструктура и фотокаталитические свойства двухступенчатых гетероструктур  $\text{MoS}_2/\text{WS}_2/\text{WSe}_2$ , полученных методом импульсного лазерного осаждения. Достигнуто существенное увеличение фототока в гетероструктуре по сравнению с фотокатодами на основе отдельных пленок, входящих в состав гетероструктуры. Применение высоко информативных методов анализа (просвечивающая электронная микроскопия высокого разрешения, Рамановская спектроскопия), а также квантово-химические расчеты методом функционала плотности позволили выявить факторы, способные оказывать важное влияние на функциональные характеристики созданной гетероструктуры.

**Ключевые слова:** халькогениды переходных металлов, импульсное лазерное осаждение, каталитически активные участки, реакция выделения водорода, DFT

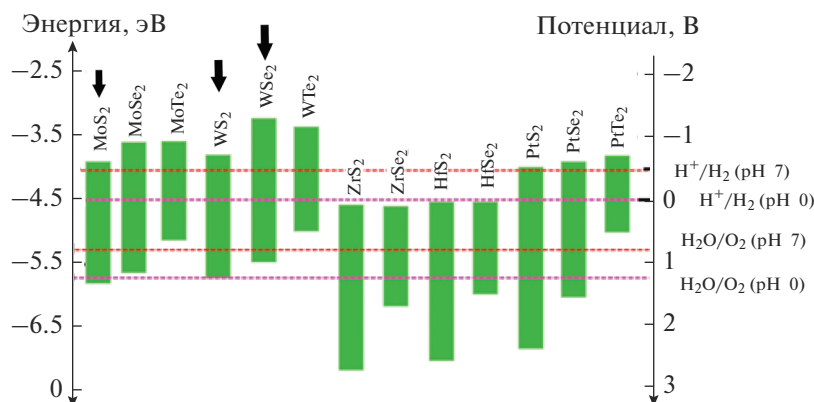
**DOI:** 10.56304/S2079562926010367

### ВЕДЕНИЕ

Проблема устойчивой и экологически чистой генерации водорода с использованием солнечной энергии привлекает все больше внимания в последние годы. Одним из наиболее перспективных направлений является фотокаталитическое расщепление воды с использованием полупроводниковых материалов. В качестве фотокатализаторов активно исследуются наноструктурированные халькогениды переходных металлов (ХПМ), такие как  $\text{MoS}_2$ ,  $\text{WS}_2$  и  $\text{WSe}_2$  [1–4]. Их слоистая структура, наличие активных каталитических центров на краях атомных плоскостей и высокая химическая стабильность делают их перспективной платформой при создании гетероструктур для активирования реакции выделения водорода. Формирование гетеропереходов между различными ХПМ-пленками позволяет реализовать энергетически выгодный перенос электронов и дырок, создавая направленное движение зарядов и повышая эффективность фотокатализа под воздействием света видимого диапазона длин волн.

Гетероструктуры, содержащие последовательность тонких слоев  $\text{MoS}_2/\text{WS}_2/\text{WSe}_2$ , представляют особый интерес благодаря возможности контроля состава, ширины запрещенной зоны и положения энергетических уровней. Данные, приведенные на рис. 1, показывают, что положение энергетических уровней электронов на нижней границе зоны проводимости, снижается при последовательном переходе от  $\text{WSe}_2$  к  $\text{WS}_2$  и далее к  $\text{MoS}_2$  [5]. Это может способствовать переносу неравновесных электронов от глубинного слоя  $\text{WSe}_2$  к поверхностному слою  $\text{MoS}_2$  при облучении гетероструктуры солнечным светом на всю толщину. При этом эффективность выделения водорода, например в кислотном электролите, будет во многом зависеть от каталитической активности поверхности пленки сульфида молибдена.

В данной работе исследованы особенности формирования трехслойных гетероструктур  $\text{MoS}_2/\text{WS}_2/\text{WSe}_2$  методом импульсного лазерного осаждения (ИЛО), включая реакционное ИЛО в сероводороде. Методика ИЛО отличается универсальностью, что позволяет формировать вы-



**Рис. 1.** Положение краев запрещенной зоны для характерных халькогенидов переходных металлов относительно термодинамических потенциалов расщепления воды при различной кислотности электролита [4].

бренные гереоструктуры в едином технологическом цикле и избежать влияния загрязнений на формирование контактных областей. При выборе режимов осаждения слоев учитывалась необходимость формирования достаточно совершенной кристаллической структуры фото-активных слоев, обеспечивающей эффективную генерацию электронно-дырочных пар при освещении. Поэтому формирование гетероструктуры реализовано с применением термо-активированных процессов на нагретой подложке.

## МЕТОДЫ И МАТЕРИАЛЫ

Гетероструктуры создавались на полированной поверхности хорошо проводящей стеклоглеродной подложке. В камеру для ИЛО устанавливались три мишени, что позволяло сформировать все слои гетероструктуры без развакуумирования. Первый слой  $\text{WSe}_2$  осаждался методом вакуумного ИЛО при комнатной температуре, а последующие слои  $\text{MoS}_2$  и  $\text{WS}_2$  создавались методом реакционного ИЛО при  $450^\circ\text{C}$ . При получении пленки  $\text{WSe}_2$  проводилась импульсная лазерная абляция мишени  $\text{WSe}_2$ , изготовленной методом прессования микропорошка  $\text{WSe}_2$ . Давление остаточных газов в камере осаждения не превышало  $10^{-3}$  Па. Использовались лазерные импульсы наносекундной длительности с энергией около 100 мДж. Время осаждения составляло 5 мин при частоте следования лазерных импульсов 20 Гц. После создания пленки  $\text{WSe}_2$ , образец нагревался до  $450^\circ\text{C}$ , и в камеру подавался сероводород до давления 18 Па. После стабилизации температуры и давления газа проводилась лазерная абляция мишени  $\text{WO}_2$  в течение 2 мин. Затем лазерный луч направлялся на мишени Mo для получения пленки  $\text{MoS}_2$ . Время абляции мишени Mo также составляло 2 мин.

Структура поперечного сечения слоев в созданных гетероструктурах исследовалась методом сканирующей просвечивающей электронной микроскопии (СПЭМ/STEM) после получения тонких ламелей методом травления сфокусированным ионным пучком. Для получения всесторонней информации о структуре и составе нанослоев применялись такие методики STEM как High resolution/высокого разрешения, HAADF/high angle annular dark-field, SAED/selected area electron diffraction, BF/DF/bright-field/dark-field STEM. Проведено также измерение элементного состава осажденных слоев методом энергодисперсионной рентгеновской спектроскопии (ЭДС/EDS). Для обработки электронно-микроскопических изображений в ряде случаев использовался метод Фурье преобразования. Структурно-фазовое состояние нанослоев также исследовалось методом микроамановской спектроскопии (MPC/MRS) с применением лазерного излучения с длиной волны 532 нм.

Созданные экспериментальные образцы новых наноматериалов подвергались (фото)электрохимическим исследованиям в трехэлектродной ячейке при использовании кислотного ( $0.5\text{M H}_2\text{SO}_4$ ) электролита. Для освещения фотоэлектродов использовалось излучение ксеноновой лампы. Плотность мощности освещения поверхности фотоэлектродов составляла примерно  $100\text{ мВт/см}^2$ . Потенциал электродов определялся относительно обратимого водородного электрода с учетом кислотности электролитов.

Для качественного анализа влияния межфазных взаимодействий и структурных особенностей многослойных ХПМ-гетеропереходов на каталитическую активность, были проведены расчеты методом теории функционала плотности (DFT) с использованием программного пакета Quantum ESPRESSO. Целью моделирования было выяснение возможных термодинамически стабильных конфигураций атомов в моделируемой

системе  $\text{MoS}_2/\text{WS}_2/\text{WSe}_2$  и влияние интерфейсов на каталитические свойства. Расчеты выполнялись в базе плоских волн с применением ультрамягких псевдопотенциалов, взятых из библиотеки [\*,UPF], соответствующих элементам W, S и Se. Использовалась обменно-корреляционная аппроксимация в виде локальной плотностной аппроксимации (LDA) с функционалом Пердью–Зангера (Perdew–Zunger). Энергетический порог отсечения для волновых функций был задан равным 30 Ry, параметры плотности и потенциала использовали обрезку 350 Ry, что обеспечивало достаточную точность при моделировании систем с элементами тяжелых переходных металлов. Геометрическая структура многослойной системы была оптимизирована в расчете типа *vc-ge- $\text{relax}$* , при котором допускается как движение ионов, так и релаксация параметров ячейки. Динамика ионов и ячейки рассчитывалась по методу BFGS, с критериями сходимости по силам  $<0.05 \text{ эВ}/\text{\AA}$  и по энергии  $<1 \text{ мэВ}$ . Образец включал 48 атомов (W, S, Se), размещенных в прямоугольной надструктуре, параметры которой определялись вручную. Размер ячейки составлял  $12.29 \times 9.16 \times 17.00 \text{ \AA}^3$ , при этом в направлении оси *z* обеспечен вакуумный зазор, превышающий  $18 \text{ \AA}$ , чтобы исключить взаимодействие между периодическими изображениями слоев. Зона Бриллюэна интегрировалась по сетке  $1 \times 2 \times 1$  с использованием схемы Монхорста–Пака, оптимальной для расчетов сильно анизотропных систем с периодичностью в одной или двух координатах. Были отключены строгие условия сходимости по самосогласованному полю (SCF), поскольку целью служила оценка устойчивых атомных конфигураций и предварительное энергетическое сравнение различных вариантов структур. Полученные результаты обеспечили структурно устойчивую модель многослойного гетероперехода  $\text{MoS}_2/\text{WS}_2/\text{WSe}_2$ , пригодную для последующих расчетов термодинамических характеристик адсорбции водорода ( $\Delta G_{\text{H}^+}$ ) и изучения межфазного взаимодействия при эволюции водорода.

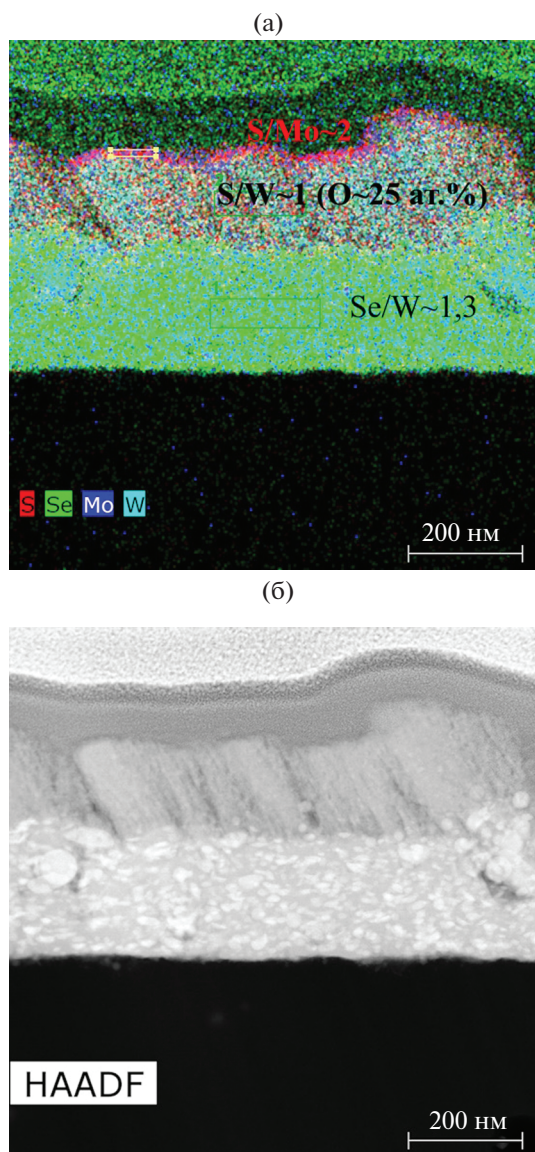
## РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

На рис. 2 показаны СПЭМ-изображения поперечного сечения многослойной пленки, созданной на углеродном носителе. Хорошо видна слоистая архитектура тонкопленочного покрытия на стеклоуглероде. По данным ЭДС-исследований выбранный режим реакционного ИЛО обеспечивал стехиометрический состав пленки  $\text{MoS}_2$ . Применение мишени из тугоплавкого металла — молибдена обуславливало низкую скорость осаждения дисульфида молибдена, так что толщина этой пленки составляла 20–30 нм. Толщина W-содержащих слоев составляла примерно 200 нм. Специфика импульсной лазерной абляции ми-

шени  $\text{WSe}_2$  обуславливала “насыщение” слоя диселенида вольфрама наночастицами метастабильной фазы  $\beta\text{-W}$  [6], что обеспечивало полное поглощение падающего светового потока в объеме тонкопленочного фотокатализатора. При этом отношение Se/W составляло 1.3. Наличие наночастиц вольфрама, как сообщалось в литературе [7], может усиливать локальные электрические поля и влиять на формирование последующих слоев, формируя предпочтительные пути роста  $\text{WS}_2$  и  $\text{MoS}_2$ . Можно оценивать как положительный эффект — это формирование неровностей поверхности при осаждении наночастиц вольфрама, так как это способствовало увеличению физической поверхности катализатора. Применение мишени оксида вольфрама позволяло повысить скорость роста покрытия сульфида вольфрама, однако при этом снижалась эффективность насыщения осаждаемой пленки серой. ЭДС-исследования выявили относительно высокое содержание атомов кислорода, что указывало на двухфазный состав этой пленки, содержащей как нанофазу  $\text{WS}_2$ , так и нанофазу оксида вольфрама.

Нагрев пленки  $\text{WSe}_2$ , изначально осажденной при комнатной температуре, на стадиях формирования пленок сульфидов вольфрама и молибдена, обуславливал кристаллизацию структуры и формирование слоистой упаковки атомов, характерной для фазы  $2\text{H-WSe}_2$  (рис. 3) Осаждение пленки  $\text{WS}_2$  на  $\text{WSe}_2$  вызывало формирование сильно разупорядоченной структуры, в которой выявлены нанокристаллы  $2\text{H-WS}_2$  и столбчатая морфология матрицы (рис. 4). Внешний слой  $\text{MoS}_2$  состоял из нанокристаллов. Кристаллиты ориентированы произвольно, включая ориентации с выходом краевых состояний на поверхность [8], которые являются активными центрами в реакции выделения водорода. Характерная столбчатая морфология матрицы указывает на ориентированный рост в условиях сильной температурной градиентности, что согласуется с результатами [9], где подобная структура ассоциировалась с улучшенным транспортом носителей заряда через нанослой.

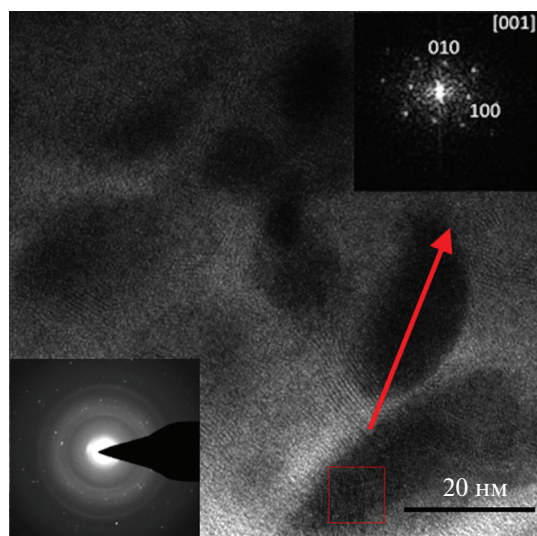
Микрорамановские спектры (рис. 6) выявили появление новых пиков, характерных для фазы  $\text{WS}_2$ , в системе, где пленки сульфидов вольфрама и молибдена осаждались на предварительно сформированный слой  $\text{WSe}_2$ . Наблюдаемое смещение пиков  $\text{WSe}_2$  и появление полос на  $350$  и  $419 \text{ см}^{-1}$  указывает на внедрение атомов серы в  $\text{WSe}_2$ , а также на формирование промежуточного соединения  $2\text{H-WS}_2$ . Это подтверждает данные [10], согласно которым температурное осаждение S-содержащих соединений может инициировать межфазную диффузию халькогенов, особенно в случае недостаточной кристалличности подложки. Хи-



**Рис. 2.** Результаты СПЕМ-исследования поперечного сечения трехслойной пленки  $\text{MoS}_2/\text{WS}_2/\text{WSe}_2$  на стеклоглере: (а) картирование элементов в поперечном сечении трехслойной системы  $\text{MoS}_2/\text{WS}_2/\text{WSe}_2$  на стеклоглере, (б) HAADF-изображение поперечного сечения этой системы. Поверхность исследуемой пленки защищена пленкой Pt/C.

мическая диффузия серы в матрицу  $\text{WSe}_2$  приводит к формированию градиентного барьера и возможному изменению встроенных электрических полей на границах раздела, что важно для управления эффективностью пространственного разделения носителей заряда.

Синтезированные гетероструктуры демонстрируют потенциал применения в фотоэлектрохимическом водородном восстановлении (рис. 7). Однослойный  $\text{WSe}_2$ , несмотря на наличие 2H-фазы, характеризуется высокой плотностью дефектов,



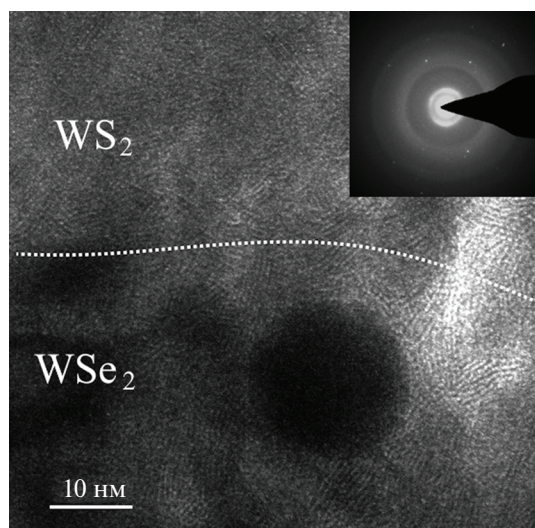
**Рис. 3.** HRTEM и SAED (слева внизу) для слоя  $\text{WSe}_2$  указывали на формирование нанокристаллической структуры, содержащей фазу со слоистой упаковкой 2H- $\text{WSe}_2$ . Анализ Фурье преобразования (справа вверх) подтверждало образование наночастиц  $\beta\text{-W}$ .

что подтверждается снижением фототока по сравнению с системами, содержащими  $\text{MoS}_2$ . Однако, за счет краевых состояний в  $\text{MoS}_2$  и многоступенчатого распределения зон, достигается улучшенная эффективность разделения и переноса фотогенерированных носителей. Это соответствует современным представлениям о роли ступенчатых гетеропереходов в водородной энергетике [11].

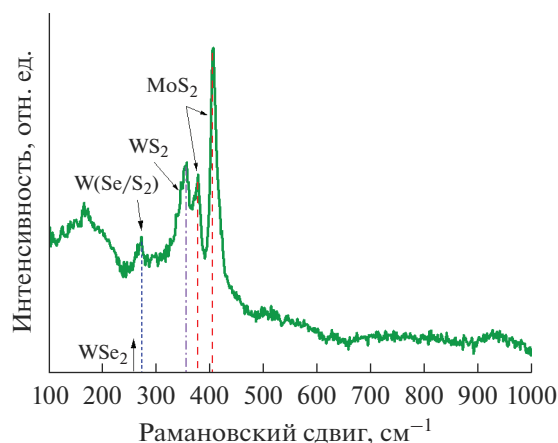
Ранее полученные экспериментальные кривые фототока были пересчитаны с учетом новой морфологии: в представленной работе наблюдается явное улучшение фотоотклика в многослойной структуре по сравнению с монослойным  $\text{WSe}_2$ , что подтверждает эффективность архитектуры  $\text{MoS}_2/\text{WS}_2/\text{WSe}_2$ . Тем не менее, высокий уровень дефектов в  $\text{WSe}_2$  ограничивает общую эффективность, указывая на необходимость дальнейшей оптимизации подложечного слоя. Гетероструктуры демонстрируют более высокий фототок по сравнению с отдельными компонентами, благодаря эффективному переносу зарядов.

Для оценки влияния межфазного взаимодействия, внедрения атомов серы и структурной упорядоченности на каталитическую активность были рассчитаны изменения свободной энергии Гиббса адсорбции водорода ( $\Delta G_{\text{H}^*}$ ) на четырех различных конфигурациях кластеров, соответствующих экспериментально реализованным структурам:

- $\text{MoS}_2/\text{WS}_2/\text{WSe}_2$ :  $\Delta G_{\text{H}^*} = -1.14$  эВ
- 2H- $\text{WSe}_2$  (упорядоченный слой):  $\Delta G_{\text{H}^*} = -1.06$  эВ



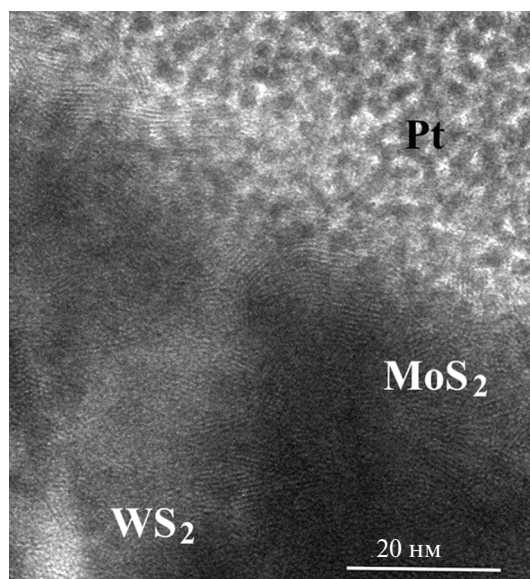
**Рис. 4.** HRTEM для интерфейса  $\text{WSe}_2/\text{WS}_2$ . Структура слоев  $\text{WSe}_2$  и  $\text{WS}_2$  нанокристаллическая, однако она не упорядочена и местами выглядит аморфно. Это также подтверждается SAED-исследованиями, на которых кольца имеют слабый и местами диффузный контраст.



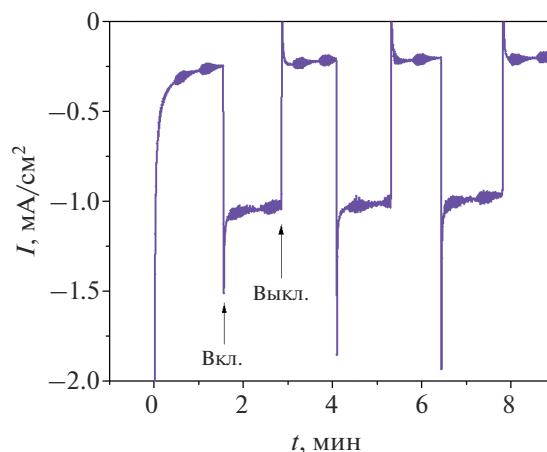
**Рис. 6.** Микрорамановские спектры, иллюстрирующие изменение фазового состава пленки  $\text{WSe}_2$  после осаждения пленок  $\text{WS}_2$  и  $\text{MoS}_2$ .

- $\text{WSe}_2/\text{WS}_2$  (двухслойная структура с признаками аморфизации):  $\Delta G_{\text{H}^*} = +3.36$  эВ
- $\text{WSe}_2/\text{MoS}_2$  (двуслойная структура):  $\Delta G_{\text{H}^*} = -0.13$  эВ

Конфигурация  $\text{MoS}_2/\text{WS}_2/\text{WSe}_2$  моделирует полностью сформированный гетеропереход, включающий три слоя: нанокристаллический  $\text{MoS}_2$ , разупорядоченный  $\text{WS}_2$  и базовый слой  $\text{WSe}_2$ . Расчеты показывают высокую термодинамиче-

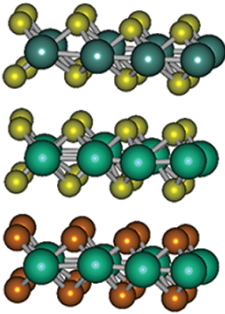
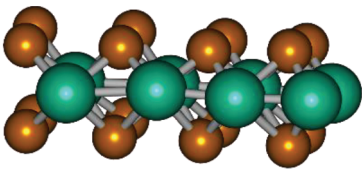
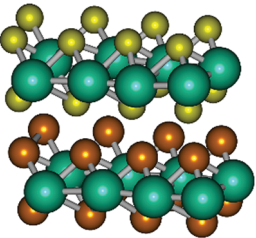
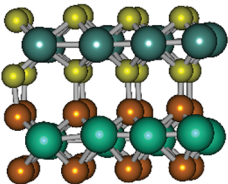


**Рис. 5.** HRTEM для интерфейса  $\text{MoS}_2$  с платиной, использованной для защиты поверхности пленки. Видна нанокристаллическая структура поверхностного слоя  $\text{MoS}_2$ . Кристаллиты размером 10–20 нм ориентированы произвольным образом относительно поверхности, в том числе, с выходом краевых состояний на поверхность катализатора.



**Рис. 7.** Хроноамперометрические зависимости при облучении светом (открытии/Вкл. и закрытии/Выкл. затвора) для фотокатода из стеклоглерода с трехслойной пленкой  $\text{WSe}_2/\text{WS}_2/\text{MoS}_2$ .

скую стабильность адсорбции водорода, что указывает на наличие активных центров с сильным сродством к  $\text{H}^*$ . Однако такая энергия адсорбции немного превышает оптимальное значение (близкое к 0 эВ), что потенциально может ограничивать десорбцию  $\text{H}_2$ . Тем не менее, структура демонстрирует улучшенный перенос заряда за счет каскадного выравнивания энергетических уровней в направлении  $\text{MoS}_2 \rightarrow \text{WS}_2 \rightarrow \text{WSe}_2$ .

|                                                                                   |                                                                                    |
|-----------------------------------------------------------------------------------|------------------------------------------------------------------------------------|
| (a)<br>$\Delta G = -1.14$ эВ                                                      | (б)<br>$\Delta G = -1.06$ эВ                                                       |
|  |  |
| (в)<br>$\Delta G = 3.36$ эВ                                                       | (г)<br>$\Delta G = -0.13$ эВ                                                       |
|  |  |

**Рис. 8.** Сравнение изменений свободной энергии Гиббса  $\Delta G_H$  при адсорбции водорода на нескольких комбинациях каталитических кластеров: (а) кластер  $\text{MoS}_2/\text{WS}_2/\text{WSe}_2$ , (б) кластер  $2\text{H-WSe}_2$ , (в) кластер  $\text{WSe}_2/\text{WS}_2$ , и (г) кластер  $\text{WSe}_2/\text{MoS}_2$ .

Рассчитанный базовый слой  $\text{WSe}_2$  в фазе  $2\text{H}$  демонстрирует близкое к полной структуре родство к водороду. Однако, по сравнению с трехслойной системой, отсутствует дополнительный вклад межфазных взаимодействий и переносов заряда через ступенчатую схему.

Структура  $\text{WSe}_2/\text{WS}_2$  соответствует промежуточной стадии, полученной методом реакционного ИЛО, при котором наблюдается частичная аморфизация и внедрение S в Se-содержащую подрешетку. Высокое положительное значение  $\Delta G_H$  указывает на отсутствие стабильной адсорбции водорода. Это, вероятно, связано с разрушением кристаллической упорядоченности и блокировкой активных центров вследствие дефектов и аморфизации. Таким образом, структура сама по себе малоэффективна как катализатор водорода, несмотря на потенциально интересные эффекты при формировании трехслойной системы.

Структура  $\text{WSe}_2/\text{MoS}_2$  моделирует гетеропереход, полученный при осаждении  $\text{MoS}_2$  на  $\text{WSe}_2$ . Наблюдаемое значение  $\Delta G_H$  близко к термодинамически оптимальному, что говорит о высокой потенциальной активности. Снижение энергии адсорбции объясняется внедрением атомов S в

подрешетку  $\text{WSe}_2$  при реакционном осаждении, что подтверждено смещением пиков в рамановских спектрах.

## ВЫВОДЫ

Разработан метод получения многоступенчатых ХПМ-гетероструктур на проводящей подложке стеклоуглерода с использованием последовательного вакуумного и реакционного ИЛО. Впервые установлены эффекты межфазного взаимодействия между слоями: внедрение серы в селенидную подложку и образование промежуточных соединений. Эти процессы влияют на фазовую и электронную структуру гетеропереходов.

Гетероструктура  $\text{MoS}_2/\text{WS}_2/\text{WSe}_2$  демонстрирует повышенную фотоэлектрохимическую активность в реакции выделения водорода по сравнению с отдельными компонентами, что связано с многоступенчатой передачей зарядов и активностью краевых состояний. Квантово-механический анализ влияния контактных областей в гетеропереходах на эффективность реакции выделения водорода показал, что реальные характеристики фотокатода определяются в конкуренции не-

скольких процессов, включающих как электронное взаимодействие ХПМ-нанослоев на интерфейсах, так и процессы генерации и переноса свето-индуцированных носителей заряда через гетеропереходы к поверхности каталитически активного слоя.

### БЛАГОДАРНОСТИ

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках госзадания на НИР (проект FSWU-2023-0070).

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ/REFERENCES

1. Grigoriev S.N., Fominski V.Yu., Romanov R.I., Volosova M.A., Shelyakov A.V. // *Thin Solid Films*. 2015. V. 592. P. 175–182.  
<https://doi.org/10.1016/j.tsf.2015.09.024>
2. Taberna P.L., Barros Barbosa J., Balocchi A., Gerber I., Urita K., Barnabé A., Marie X., Chane-Ching J.Y. // *J. Chem. Engin.* 2021. V. 424. P. 130433.  
<https://doi.org/10.1016/j.cej.2021.130433>
3. Yu X., Prevot M.S., Guijarro N., Sivula K. // *Nature Commun.* 2015. V. 6. P. 7596.  
<https://doi.org/10.1038/ncomms8596>
4. Nevolin V.N., Rubinkovskaya O.V., Fominski D.V., Romanov R.I., Fominski V.Yu. // *Inorg. Mater.: Appl. Res.* 2024. V. 15 (2). P. 251–258.  
<https://doi.org/10.1134/S2075113324020345>
5. Bonomo M., Dini D. // *Energies*. 2016. V. 9. P. 373.  
<https://doi.org/10.3390/en9050373>
6. Fominski V., Fominski D., Demin M., Romanov R., Gorkhman A. // *Nanomaterials*. 2023. V. 13. P. 1122.  
<https://doi.org/10.3390/nano1306112>
7. Zhang Y., Liu X., Wang Z., Li H., Chen J. // *J. Mater. Chem. A*. 2020. V. 8. P. 6957–6983.  
<https://doi.org/10.1039/D0TA00556H>
8. Lin L., Xing S., Huo J., Zou G., Sheng X., Liu L., Zhou Y.N. // *ACS Appl. Mater. Interfaces*. 2019. V. 11 (9). P. 9326–9332.  
<https://doi.org/10.1021/acsami.8b20860>
9. Scott G.I., Lionti K., Volksen W., Magbitang T.P., Matsuda Y., Dauskardt H.R., Dubois G. // *Nature Mater.* 2016. V. 15. P. 294–298.  
<https://doi.org/10.1038/nmat4475>
10. Kinz-Thompson C.D., Palma M., Pulukkunat D.K., Chenet D., Hone J., Wind S.J., Gonzalez R.L. // *ACS Nano*. 2013. V. 7 (9). P. 8158–8166.  
<https://doi.org/10.1021/nn403447s>
11. Aralekallu S., Lokesh K.S., Singh V. // *Fuel*. 2024. V. 357. P. 129753.  
<https://doi.org/10.1016/j.fuel.2023.129753>

## Structure and Photocatalytic Properties of Carbon Cathode with Nanostructured Thin-Film MoS<sub>x</sub>/WS<sub>2</sub>/WSe<sub>2</sub> Coating for Hydrogen Production

O. V. Rubinkovskaya<sup>1, \*</sup>, D. V. Fominski<sup>1</sup>, R. I. Romanov<sup>1</sup>, and V. Yu. Fominski<sup>1</sup>

<sup>1</sup>National Research Nuclear University MEPhI (Moscow Engineering Physics Institute), Moscow, 115409 Russia

\*e-mail: ovrubinkovskaya@mephi.ru

Received May 6, 2025; revised May 6, 2025; accepted May 12, 2025

**Abstract**—Development and application of multilayer semiconductor catalytic nanostructures based on transition metal chalcogenides with a given energy band structure is a promising direction in the hydrogen industry. Electric fields in the contact region of heterojunctions promote separation and accelerated transfer of nonequilibrium light-induced carriers in the volume of photoactive material of nanocatalysts. The paper studies the nanostructure and photocatalytic properties of two-stage MoS<sub>2</sub>/WS<sub>2</sub>/WSe<sub>2</sub> heterostructures obtained by pulsed laser deposition. A significant increase in the photocurrent in the heterostructure was achieved compared to photocathodes based on individual films included in the heterostructure. The use of highly informative analysis methods (high-resolution transmission electron microscopy, Raman spectroscopy), as well as quantum-chemical calculations using the density functional theory method, allowed us to identify factors that can have an important effect on the functional characteristics of the created heterostructure.

**Keywords:** transition metal chalcogenides, pulsed laser deposition, catalytically active sites, hydrogen evolution reaction, DFT