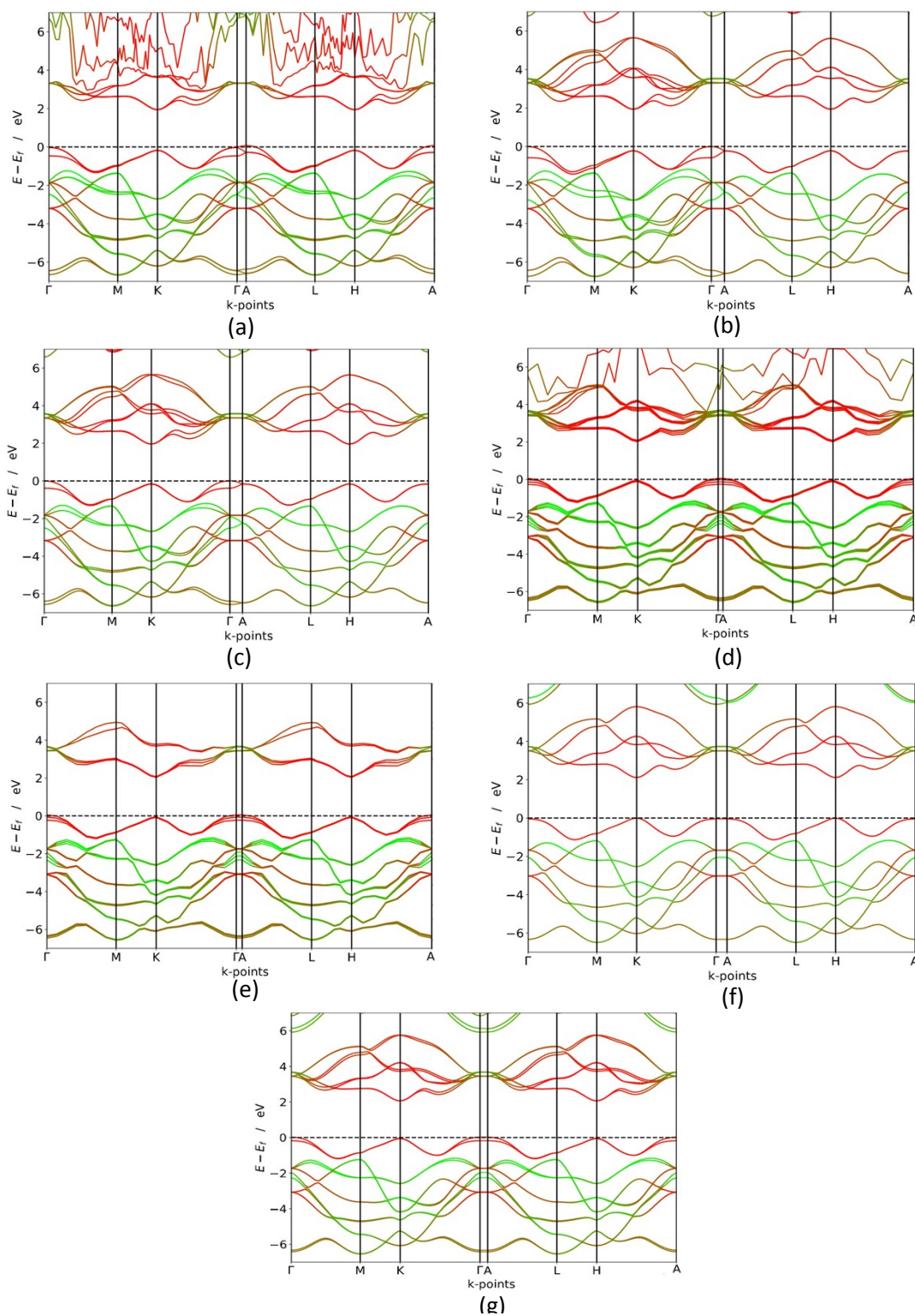


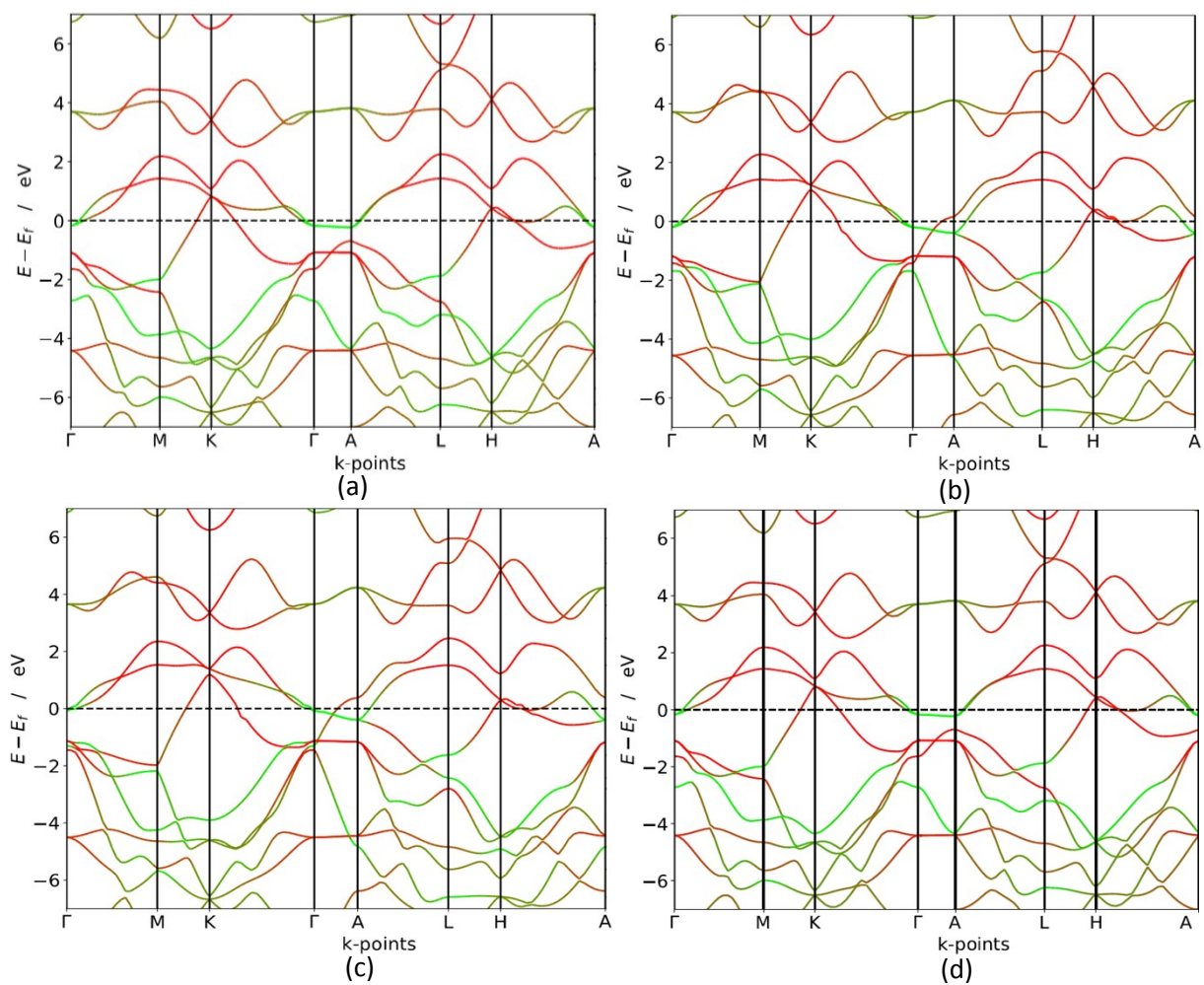
Novel in-depth first-principle stability study of 2H and 1T MoS₂ polymorphs supplementary information

Håkon Eidsvåg^{*a}, Murugesan Rasukkannu^a, Dhayalan Velauthapillai^a and Ponniah Vajeeston^b

Electronic structure:

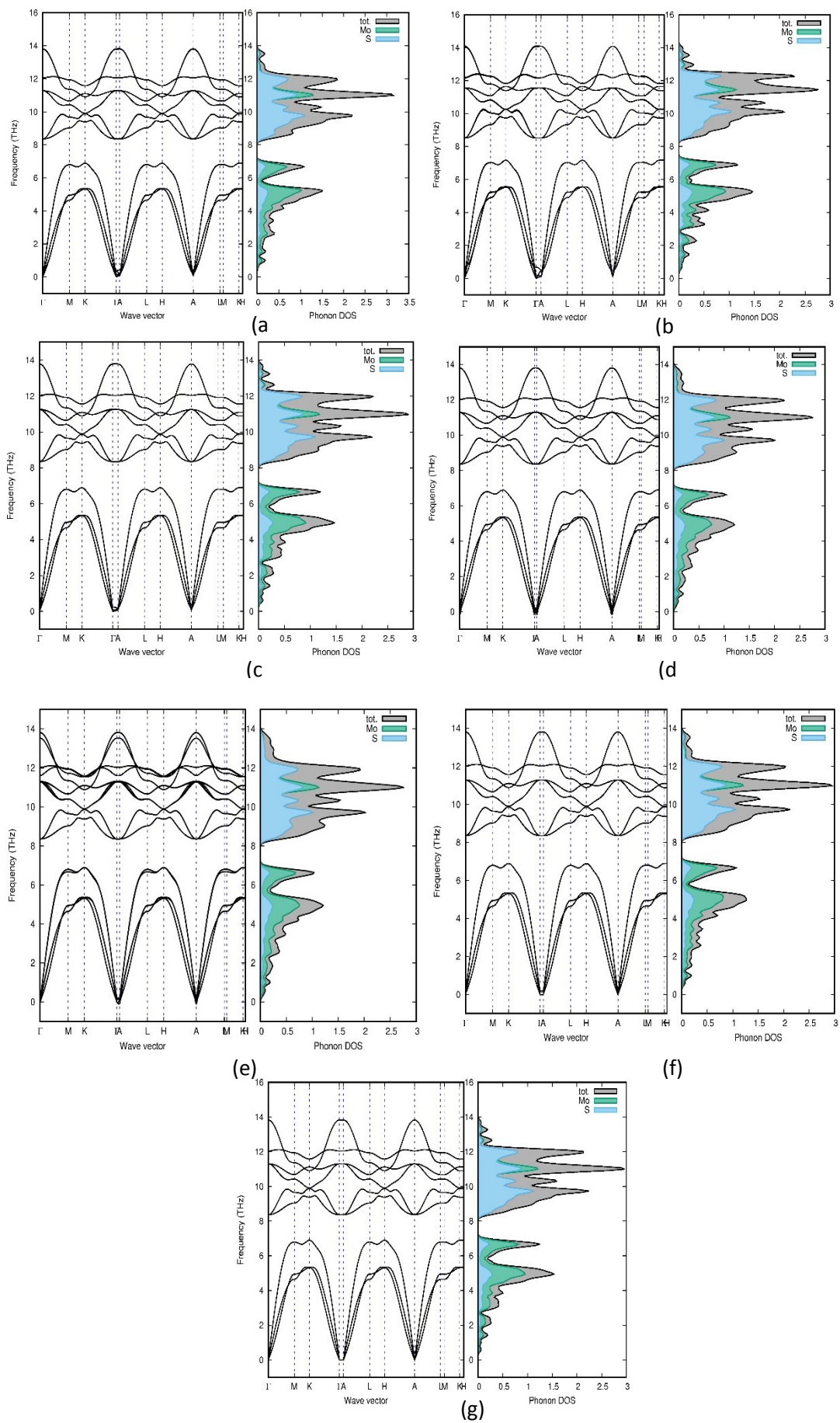


SI 1: Band structure for group A polymorphs (Colour code: green line – S, red line – Mo). (a) 2R₁. (b) 2H. (c) 3H_b. (d) 4T. (e) 3H_a. (f) 2T. (g) 1H

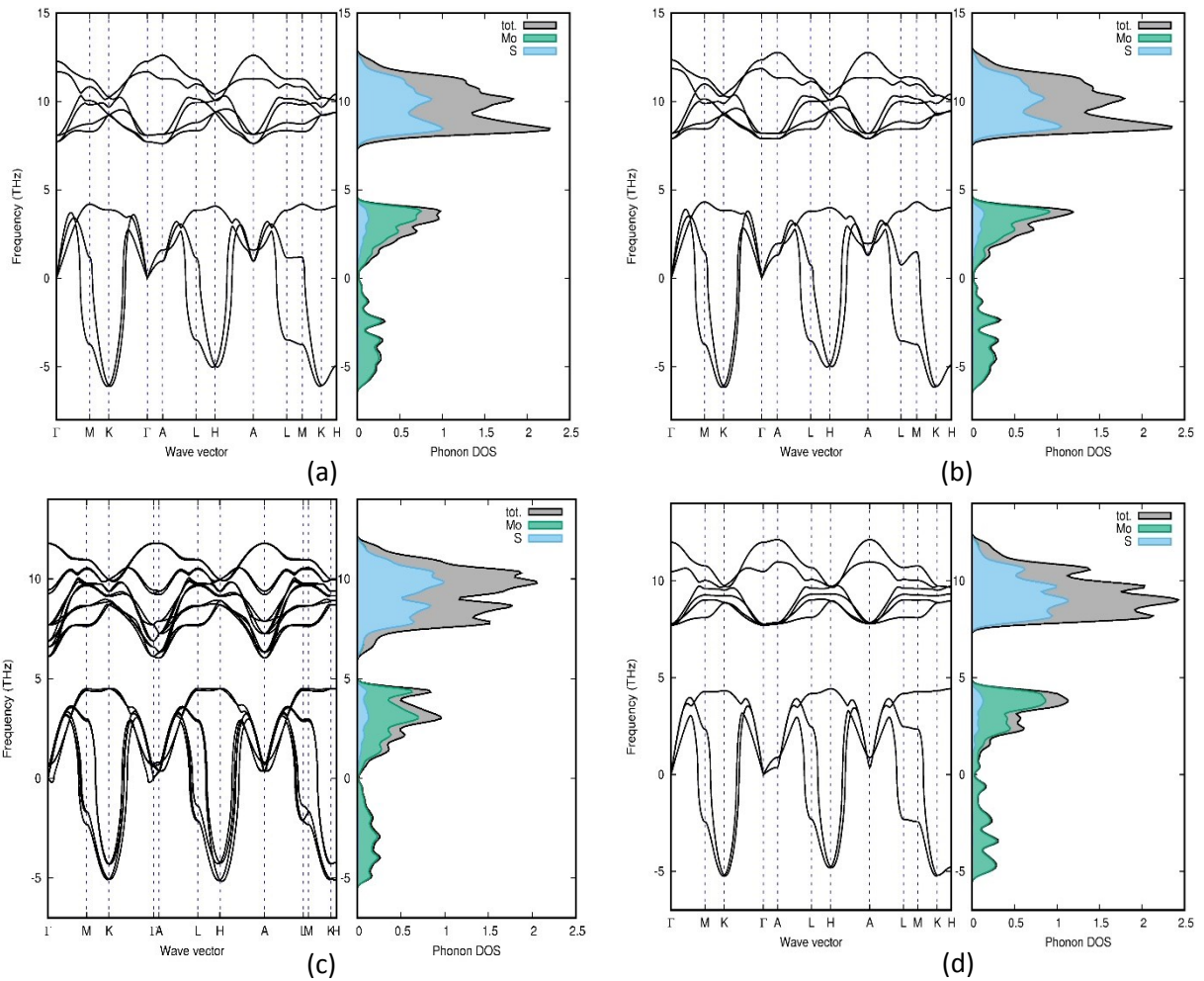


SI 2: Band structure for the group B polymorphs (Colour code: green line – S, red line – Mo). (a) $2R_2$. (b) $1T_1$. (c) $1T_2$. (d) $3T$.

Phonon DOS and band structures



SI 3: Phonon density of states calculations for the group A polymorphs. (a) 2R₁. (b) 2H. (c) 3H_b. (d) 4T. (e) 3H_a. (f) 2T. (g) 1H.



SI 4: Phonon density of states calculations for the group B polymorphs. (a) 1T₁. (b) 1T₂. (c) 3T. (d) 2R₂.

Optimised structures:

Poscar:

R3m (1, 1434, 2R₁)

```

Mo3 S6
1.0
    7.3491001129      0.0000000000      0.0000000000
    6.6573448829      3.1127209286      0.0000000000
    6.6573448829      1.4794943865      2.7386361459
Mo      S
1      2
Direct
    0.000200000      0.000200000      0.000200000
    0.593800008      0.593800008      0.593800008
    0.740000010      0.740000010      0.740000010

```

P-3m1 (4, 1027525, 4T)

```

Mo4 S8
3.18890000
    0.86602540      -0.50000000      0.00000000

```

	0.00000000	1.00000000	0.00000000
	0.00000000	0.00000000	12.47903666
Mo Mo S S S S			
2 2 2 2 2 2			

Direct

0.33333333	0.66666667	0.09356000
0.66666667	0.33333333	0.90644000
0.33333333	0.66666667	0.71932000
0.66666667	0.33333333	0.28068000
0.33333333	0.66666667	0.31991000
0.66666667	0.33333333	0.68009000
0.33333333	0.66666667	0.94568000
0.66666667	0.33333333	0.05432000
0.33333333	0.66666667	0.24145000
0.66666667	0.33333333	0.75855000
0.33333333	0.66666667	0.86720000
0.66666667	0.33333333	0.13280000

P63/mmc (2, 2815, 2H);

Mo2 S4

1.0

3.1889998913	0.0000000000	0.0000000000
-1.5944999456	2.7617549185	0.0000000000
0.0000000000	0.0000000000	14.8915996552

Mo S
2 4

Cartesian

1.594499993	0.920585000	3.722899914
0.000000000	1.841169836	11.168699741
1.594499993	0.920585000	12.730828582
0.000000000	1.841169836	2.160771073
0.000000000	1.841169836	5.285028755
1.594499993	0.920585000	9.606570901

P-6m2 (3, 1025874, 3H_a);

Mo3 S6

3.18900000

0.86602540	-0.50000000	0.00000000
0.00000000	1.00000000	0.00000000
0.00000000	0.00000000	10.14302289

Mo S Mo S S
2 2 1 2 2

Direct

0.33333333	0.66666667	0.76980000
0.33333333	0.66666667	0.23020000
0.33333333	0.66666667	0.04827000
0.33333333	0.66666667	0.95173000
0.66666667	0.33333333	0.00000000
0.66666667	0.33333333	0.27846000
0.66666667	0.33333333	0.72154000
0.66666667	0.33333333	0.81807000
0.66666667	0.33333333	0.18193000

P-3m1 (3, 1023939, 2T);

Mo2 S4

3.18910000
 0.86602540 -0.50000000 0.00000000
 0.00000000 1.00000000 0.00000000
 0.00000000 0.00000000 7.80743784

Mo S S
 2 2 2

Direct
 0.33333333 0.66666667 0.85049000
 0.66666667 0.33333333 0.14951000
 0.33333333 0.66666667 0.21222000
 0.66666667 0.33333333 0.78778000
 0.33333333 0.66666667 0.08682000
 0.66666667 0.33333333 0.91318000

P63/mmc (6, 1018809, 3H_b),

Mo2 S4
 1.0

3.1779000759 0.0000000000 0.0000000000
 -1.5889500380 2.7521421964 0.0000000000
 0.0000000000 0.0000000000 14.1155996323

Mo S
 2 4

Direct
 0.000000000 0.000000000 0.250000000
 0.000000000 0.000000000 0.750000000
 0.666666687 0.333333343 0.360799998
 0.333333313 0.666666627 0.639199972
 0.333333313 0.666666627 0.860800028
 0.666666687 0.333333343 0.139200002

P-6m2 (1, 1023924, 1H),

Mo S2
 3.18810000

0.86602540 -0.50000000 0.00000000
 0.00000000 1.00000000 0.00000000
 0.00000000 0.00000000 5.47783947

Mo S
 1 2

Direct
 0.00000000 0.00000000 0.00000000
 0.33333333 0.66666667 0.08937000
 0.33333333 0.66666667 0.91063000

R-3m (1, 558544, 3T),

Mo S2
 3.20600000

0.57735027 0.00000000 2.05065502
 -0.28867513 0.50000000 2.05065502
 -0.28867513 -0.50000000 2.05065502

Mo S
 1 2

Direct
 0.00000000 0.00000001 0.00000000
 0.25339000 0.25339000 0.25339000

0.74661000 0.74661000 0.74661000

P-3m1(1, 1238797, 2R₂)

Mo S2

3.17980000

0.86602540	-0.50000000	0.00000000
0.00000000	1.00000000	0.00000000
0.00000000	0.00000000	2.06736273

Mo S

1 2

Direct

0.00000000	0.00000000	0.50000000
0.33333333	0.66666667	0.25751000
0.66666667	0.33333333	0.74249000

P-3(1, 1T₂)

Mo S2

3.19000000

0.86602540	-0.50000000	0.00000000
0.00000000	1.00000000	0.00000000
0.00000000	0.00000000	1.86363636

Mo S

1 2

Direct

0.00000000	0.00000000	0.00000000
0.33333333	0.66666667	0.24880000
0.66666667	0.33333333	0.75120000

P-3m1(1, 1T₁)

Mo S2

3.19000000

0.86602540	-0.50000000	0.00000000
0.00000000	1.00000000	0.00000000
0.00000000	0.00000000	1.86363636

Mo S

1 2

Direct

0.00000000	0.00000000	0.00000000
0.33333333	0.66666667	0.24880000
0.66666667	0.33333333	0.75120000