

ПРОЕКТУВАННЯ І МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ СЕНСОРІВ

SENSORS DESIGN AND MATHEMATICAL MODELING

PACS 71.15.-m

DOI <http://dx.doi.org/10.18524/1815-7459.2019.1.159487>

ДЕТЕКТУВАННЯ КОНЦЕНТРАЦІЇ АТОМІВ Na ШАРУВАТИМИ ХАЛЬКОГЕНІДАМИ ОЛОВА: РОЗРАХУНКИ ІЗ ПЕРШИХ ПРИНЦИПІВ

*Р. М. Балабай, Ю. О. Прихожа, О. Х. Тадеуш**

Кафедра фізики та методики її навчання
Криворізький державний педагогічний університет
пр. Гагаріна 54, Кривий Ріг, Дніпропетровська обл., 50086
067-628-17-35, balabai@ua
067-628-41-16, prihozhaya.yuliya93@gmail.com

*Південноукраїнський національний педагогічний університет імені
К. Д. Ушинського
вул. Старопортофранківська, 26, Одеса, Одеська обл., 65007
olga.tkachuk.46@mail.ru

ДЕТЕКТУВАННЯ КОНЦЕНТРАЦІЇ АТОМІВ Na ШАРУВАТИМИ ХАЛЬКОГЕНІДАМИ ОЛОВА: РОЗРАХУНКИ ІЗ ПЕРШИХ ПРИНЦИПІВ

Р. М. Балабай, Ю. О. Прихожа, О. Х. Тадеуш

Анотація. Методами функціоналу електронної густини та псевдопотенціалу із перших принципів виконано обчислювальні експерименти на атомних моделях, що відтворюють нескінченні моношари SnS_2 з інтеркальованими в їх міжшаровий простір атомів Na у різній кількості. Отримано просторові розподіли густини валентних електронів, що демонструють характер взаємодії між атомами у шаруватому кристалі SnS_2 . Встановлено зміни ширини забороненої зони двох нескінченних моношарів SnS_2 при наявності атомів металу в їх прошарках, котра дозволяє використовувати такий матеріал в якості резистивного детектора атомів певних хімічних елементів.

Ключові слова: детектування концентрації атомів Na, моношари SnS_2 , функціонал електронної густини, псевдопотенціал із перших принципів

DETECTION OF Na ATOMIC CONCENTRATION BY LAYERED CHALCOGENIDES OF TIN: AB INITIO CALCULATION

R. M. Balabai, Yu. O. Prikhozha, O. H. Tadeusz

Abstract. Within the methods of electron density functional and ab initio pseudopotential, we have computational experiments on atomic models that reproduce the infinite monolayers SnS_2 with intercalated atoms in their interlayer space of Na atoms of different quantities are performed. We have obtained the spatial distributions of the density of valence electrons which demonstrate the nature of the interaction between atoms in a layered crystal SnS_2 . Changes in the electron gap energy spectra for two continuous SnS_2 in the presence of metal atoms in their layers have been established, which allows the use of such a semiconductor as a resistive detector of atoms of certain chemical elements.

Keywords: detecting the concentration of Na atoms, SnS_2 monolayers, electronic density functional, pseudopotential ab initio

ДЕТЕКТИРОВАНИЕ КОНЦЕНТРАЦИИ АТОМОВ Na СЛОИСТЫМИ ХАЛЬКОГЕНИДАМИ ОЛОВА: РАСЧЕТЫ ИЗ ПЕРВЫХ ПРИНЦИПОВ

Р. М. Балабай, Ю. А. Прихожая, О. Х. Тадеуш

Аннотация. Методами функционала электронной плотности и псевдопотенциала из первых принципов выполнено численный эксперимент на атомных моделях, что отображает бесконечные монослои SnS_2 с интеркалированными в их межслойное пространство атомов Na разного количества. Получено пространственные распределения плотности валентных электронов, что демонстрирует характер взаимодействия между атомами в слоистом кристалле SnS_2 . Установлено изменение ширины запрещенной зоны двух бесконечных монослоев SnS_2 при наличии атомов металла в их слоях, что позволяет использовать такой полупроводник в качестве резистивного детектора атомов определенных химических элементов.

Ключевые слова: детектирование концентрации атомов Na, монослои SnS_2 , функционал электронной плотности, псевдопотенциал из первых принципов

Вступ і постановка задачі

Останнім часом збільшився інтерес до 2-D шаруватих халькогенідів металів групи 14, зокрема, до халькогенідів олова (Sn) в різних застосуваннях – від анодів іонних батарей і суперконденсаторів до сонячних елементів. Через відносно низьку вартість та високу чутливість різні типи датчиків на основі SnS_2 широко досліджувались протягом останніх десятиліть. Так, сенсори, які ідентифікують наявність або концентрацію атомів певного хімічного елементу в навколишньому середовищі, привернули величезну увагу в застосуванні у багатьох галузях [1-3].

Халькогеніди Sn визначаються характеристиками окиснення Sn і халькогеном, так в олово-сіркову серію входять сполуки SnS , Sn_2S_3 , Sn_3S_4 , Sn_4S_5 та SnS_2 . Серед них, SnS та SnS_2 походять від одиночного стану окиснення Sn тоді як решта містять змішані фази SnS та SnS_2 . Дисульфід олова кристалізується в гексагональній структурі. В SnS_2 чотиривалентне олово шестикратно координоване атомами сірки. Атоми олова перебувають у центрі ідеальних октаєдрів, останні ув'язані між собою спільними ребрами і формують тришарові «сендвічі» S-Sn-S, які періодично повторюються вздовж осі c [4]. SnS та SnS_2 орторомбічної та гексагональної структури

відповідно – шаруваті халькогеніди, структурно подібні до халькогенідів перехідних металів, таких, що в межах атомних площин існує сильне ковалентне зчеплення, а між шарами відбуваються слабкі Ван-дер-Ваальсові взаємодії. 2-D шарувата структура халькогенідів олова привернула увагу в застосуванні сенсорів атомів певних хімічних елементів, завдяки своїм фізико-хімічним властивостям, а також достатньо великим обсягам для руху інтеркальованих атомів, наприклад, при інтеркаляції йонів Li або Na. Отже, оснащені такими кристалографічними особливостями, халькогеніди Sn важливі як матеріали електродів батарей для акумуляції йонів літію або натрію [5] та для детектування концентрації атомів чи сполук.

Мета даної роботи полягала в дослідженні властивостей шаруватих SnS₂ в залежності від концентрації інтеркальованих у них атомів Na.

Застосовуючи методи функціоналу електронної густини та псевдопотенціалу із перших принципів, виконано обчислювальні експерименти, користуючись авторським програмним комплексом [6], на атомних моделях, що відтворюють моношари SnS₂ з інтеркальованими в їх міжшаровий простір атомів Na в різній кількості.

Моделі та методи обчислення

Розрахункові результати було одержано за допомогою авторського програмного коду, що реалізує алгоритм квантової динаміки, якщо одночасно оптимізуються змінні електронної та ядерних підсистем багатоатомної структури, або алгоритм самоузгодженого розв'язку рівнянь Кона-Шема в локальному наближенні, якщо визначаються тільки електронні змінні при фіксованих атомних остовах. Слідуючи Кону і Шему [7, 8], електронна густина записувалася в термінах зайнятих ортонормованих одночастинкових хвильових функцій:

$$n(\mathbf{r}) = \sum_i |\Psi_i(\mathbf{r})|^2 \quad (1)$$

Точка на поверхні потенціальної енергії в наближенні Борна-Оппенгеймера визначалася мінімумом енергетичного функціоналу по відношенню до хвильових функцій:

$$E[\{\Psi_i\}, \{R_j\}, \{a_v\}] = \sum_i \int_{\Omega} d^3r \Psi_i^*(\mathbf{r}) \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \right] \Psi_i(\mathbf{r}) + U[\{n(\mathbf{r})\}, \{R_j\}, \{a_v\}] \quad (2)$$

де R_j – координати атомних остовів, a_v – всі можливі зовнішні впливи на систему.

У загальноприйнятому формулюванні мінімізація енергетичного функціоналу (2) по відношенню до одночастинкових орбіталей при накладених на них додаткових умовах ортонормування приводить до одночастинкових рівнянь Кона-Шема [9]:

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \frac{\partial U}{\partial n(\mathbf{r})} \right\} \Psi_i(\mathbf{r}) = \varepsilon_i \Psi_i(\mathbf{r}) \quad (3)$$

У розв'язку цих рівнянь можна використовувати формалізм псевдопотенціалу [10, 11], згідно якого тверде тіло розглядається як набір валентних електронів та іонних остовів. У псевдопотенціальному наближенні оператор псевдопотенціалу V_{PS} , що описує взаємодію валентних електронів з остовом, є малим, а відповідна йому псевдохвильова функція гладкою. Псевдохвильові одноелектронні функції розкладалися в ряд за плоскими хвилями:

$$\Psi_j(\vec{k}, \vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{N_0} \sqrt{\Omega}} \sum_{\vec{G}} b_j(\vec{k} + \vec{G}) \exp(i(\vec{k} + \vec{G})\vec{r}) \quad (4)$$

де \vec{G} – вектори оберненої решітки, \vec{k} – хвильовий вектор із зони Бриллюена кристала або штучної суперрешітки, Ω – об'єм одиничних комірок, з яких складається періодичний кристал або штучна суперрешітка при відтворенні неперіодичних об'єктів.

Повний кристалічний потенціал конструюється як сума іонних псевдопотенціалів, які не перекриваються та пов'язані з іонами (ядра + основні електрони), розташовані в позиціях \vec{R}_S :

$$V_{\text{крист}}(\vec{r}) \rightarrow V_{\text{ПС}}(\vec{r}) = \sum_{\vec{p}} \sum_S \overline{V_S^{PS}}(\vec{r} - \vec{p} - \vec{R}_S) \quad (5)$$

Рівняння (3) після Фур'є-перетворення в обернений простір має вигляд:

$$\sum_{\vec{g}} \left[\left\{ \frac{\hbar^2}{2m} (\vec{k} + \vec{G})^2 - \varepsilon_j \right\} \delta_{\vec{g}, \vec{G}} + V_{KS}(\vec{k} + \vec{G}, \vec{k} + \vec{G}') \right] b_j(\vec{k} + \vec{G}) = 0 \quad (6)$$

де V_{KS} – потенціал Кона-Шема, що визначається як

$$V_{KS}(\vec{k} + \vec{G}, \vec{k} + \vec{G}') = V_{ps}(\vec{k} + \vec{G}, \vec{k} + \vec{G}') + V_H(\vec{G}' - \vec{G}) + V_{xc}(\vec{G}' - \vec{G}) \quad (7)$$

У загальному випадку вирази, що описують потенціали взаємодій, є комплексними. Використання атомних базисів, які містять у точковій групі симетрії операцію інверсії, приводить до того, що Фур'є-компоненти в розкладі всіх виразів є дійсними [12].

Основною величиною у формалізмі функціоналу електронної густини є густина заряду. Її оцінюють із самоузгодженого розв'язку рівнянь (6), який має бути проведений у всіх точках не приведеної частини зони Бриллюена:

$$\rho(\vec{G}) = \frac{2}{N_T} \sum_k \sum_j \sum_{\alpha \in T} \sum_G b_j^*(k + \vec{G} + \alpha \vec{G}) b_j(k + \vec{G}) \quad (8)$$

де j означає додавання по всім зайнятим станам, N_T – число операторів α в точковій групі T атомного базису та множник 2 враховує виродження по спіну.

Розрахункові зусилля можна скоротити, якщо використовувати метод спеціальних точок. Існують різні підходи щодо вибору цих точок. Так, можуть використовуватись рівномірні або нерівномірні сітки \vec{k} -точок, можна з прийнятною точністю замінити сумування за кінцевим числом спеціальних точок до однієї точки в зоні Бриллюена. Можна обмежитись лише Γ -точкою в зоні Бриллюена, особливо це стосується штучних періодичних систем [13].

Розподіл електронів по енергіям отримувався шляхом числового обчислення похідної $\lim_{\Delta E \rightarrow 0} \Delta N / \Delta E$, де ΔN – кількість дозволених станів, що припадають на проміжок енергії ΔE , із отриманого під час діагоналізації матриці Кона-Шема одночастинкового енергетичного спектра, кількість значень в якому контролюється розміром розкладу хвильової функції. Відповідно до ідеології функціонала електронної густини кількість зайнятих станів при $T = 0\text{K}$ визначалися половиною кількістю електронів у атомному базисі (в зв'язку з неврахуванням спіну електрона).

У зв'язку з тим, що алгоритм обчислень передбачає наявність трансляційної симетрії в досліджуваній атомній системі, нами моделювалася суперкомірка тетрагонального типу $a \neq b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$, параметри та атомний базис якої визначалися об'єктом дослідження.

Для відтворення двох нескінчених в площині a, b моношарів SnS_2 , що складаються із двох атомних шарів сірки, розділених атомним шаром олова, атомний базис примітивної комірки складався з 8 атомів сірки та 16 атомів олова. При цьому в міжшаровому просторі SnS_2 могли знаходитися від 0 до 16 атомів натрію на комірку, розміщених відповідно до їх розташування в твердому тілі при низьких температурах, що відповідала двовимірній концентрації від 0 до 100% (рис. 1).

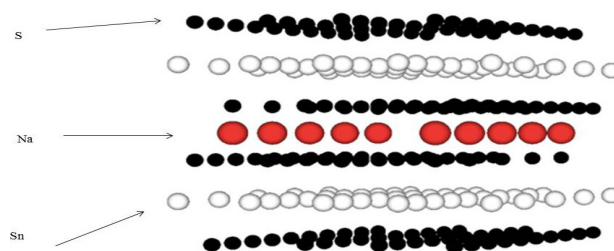


Рис. 1. Моношари SnS_2 з інтеркальованими в міжшаровий простір атомами Na.

Результати обчислення та їх обговорення

У ході проведення розрахункового експерименту із перших принципів, отримано самоузгоджені за певну кількість ітерацій про-

сторів розподіли валентних електронів, ширини заборонених зон, встановлено зв'язок зміни провідності матеріалу в залежності від концентрації інтеркальованих атомів натрію.

На рис. 2, рис. 3 наведено просторові розподіли валентних електронів для моношарів SnS_2 з атомами Na різної кількості в їх про-

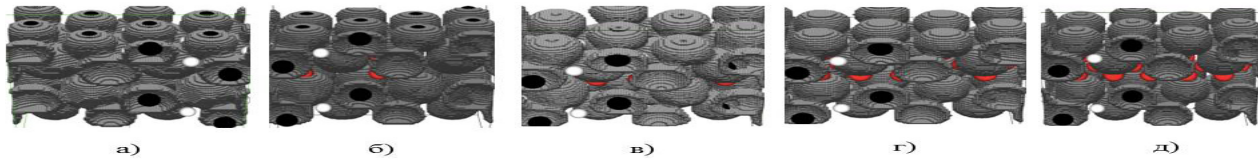


Рис. 2. Просторові розподіли валентних електронів для ізозначень 0.2-0.1 від максимального у межах комірки суперрешітки, атомний базис якої відтворює два нескінчених у площині a, b моношари SnS_2 з атомами Na у їх прошарку з концентрацією 0% (а); 25% (б); 50% (в); 75% (г); 100% (д).

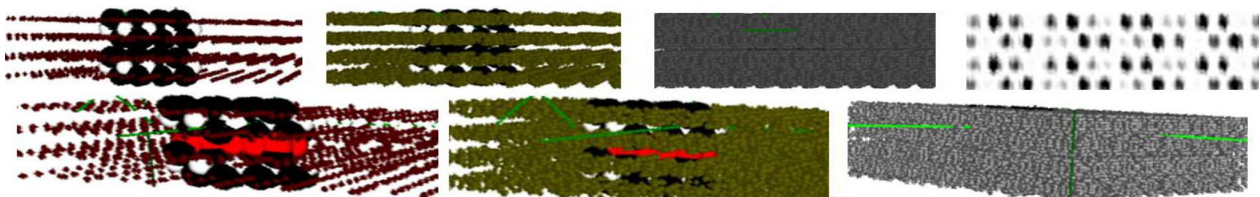


Рис. 3. Фрагменти просторового розподілу валентних електронів та їх перетину двох нескінчених у площині a, b моношарів SnS_2 : з концентрацією атомів Na 0% верхній ряд: просторові розподіли для ізозначень 1.0-0.9, 0.6-0.5, 0.2-0.1 від максимального та переріз просторового розподілу в площині [110] зліва направо; з концентрацією атомів Na 100% нижній ряд: для ізозначень 1.0- 0.9, 0.6-0.5 та 0.2-0.1 від максимального зліва направо.

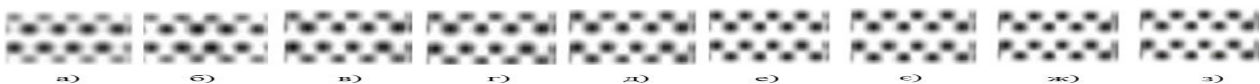


Рис. 4. Перетини площиною [110] просторових розподілів валентних електронів у межах комірки суперрешітки, атомний базис якої відтворює два нескінчених у площині a, b моношари SnS_2 з атомами Na в їх прошарку з концентрацією 0% (а); 12.5% (б); 25% (в); 37.5% (г); 50% (д); 62.5% (е); 75% (є); 87.5% (ж); 100% (з).

шарку. На рис. 4 наведено перетини площиною [110] просторових розподілів валентних електронів у межах комірки суперрешітки, атомний базис якої відтворює два нескінчених у площині a, b моношари SnS_2 з атомами Na у їх прошарку з концентрацією від 0 до 100%. Видно з рис. 4 (а), (б) особливості розподілу валентних електронів між двома моношарами SnS_2 , які не містять атомів натрію або їх мінімальну кількість, котрі полягають в наявності більшої інтенсивності густини

валентних електронів в околі атомів сірки, що належать внутрішнім шарам, тобто тих, що обмежують прошарок між моношарами SnS_2 . Такий перерозподіл густини валентних електронів демонструє певний характер взаємодії між атомами в кристалі SnS_2 : всередині моношару видні області спільної електронної густини між атомними шарами олова та сірки, що відповідають ковалентному типу зв'язку між атомами олова та сірки з певною долею йонності, та відсутність електронних

«хмар» в прошарку між моношарами, але з наявністю характерних для диполів перерозподілів густини, що відповідають Ван-дер-Ваальсовим взаємодіям між атомами сірки та сірки з різних моношарів. З рис. 4 (в) – рис. 4 (д), що містять просторові розподіли електронної густини моношарів SnS_2 з більшою кількістю атомів натрію в прошарку, видно зникнення характерних для диполів перерозподілів густини і формування рівномірного розподілення валентних електронів у межах моношару, тобто Ван-дер-Ваальсова взаємодія між атомами сірки та сірки з різних моношарів ослаблюється.

В табл. 1 та на рис. 5 приведено значення енергій стелі валентної зони та дна зони провідності, які дали змогу розрахувати ширину забороненої зони двох нескінчених моношарів SnS_2 , що містять атоми Na у їх прошарку в залежності від їх концентрації.

Зміна ширини забороненої зони двох нескінчених моношарів SnS_2 при наявності атомів металу в їх прошарках дозволяє використовувати такий матеріал у якості детектування атомів певних хімічних елементів, як приклад, атомів натрію. При відсутності атомів натрію у прошарку ширина забороненої зони є найбільшою, рівною 1.29 eV, що наближена до величин 0.81-3.38 eV [14], характерних для кристалу SnS_2 . Із збільшенням концентрації атомів натрію, що проникли в прошарок моношарів SnS_2 величина ширини забороненої зони монотонно знижується до концентрації 40%. При подальшому збільшенню концентрації атомів натрію в прошарку така монотонність зникає, що знижує однозначність резистивної реакції моношарів SnS_2 на вміст ними атомів натрію.

Табл.1.

Енергії стелі валентної зони (E_v) та дна зони провідності (E_c), ширина забороненої зони двох нескінчених моношарів SnS_2 , що містять атоми Na у їх прошарку в залежності від їх концентрації.

E_v , а.о.е.	E_c , а.о.е.	E_{gap} , а.о.е.	E_{gap} , eV	концентрація, %
-13.07136	-13.02412	0.05	1.29	0.00
-13.11121	-13.07773	0.03	0.91	12.50
-12.78998	-12.76737	0.02	0.62	25.00
-12.42919	-12.42357	0.01	0.15	37.50
-12.30386	-12.28248	0.02	0.58	50.00
-12.41589	-12.38198	0.03	0.92	62.50
-12.12000	-12.10680	0.01	0.36	75.00
-11.79050	-11.76121	0.03	0.80	87.50
-11.58910	-11.56930	0.02	0.54	100.00

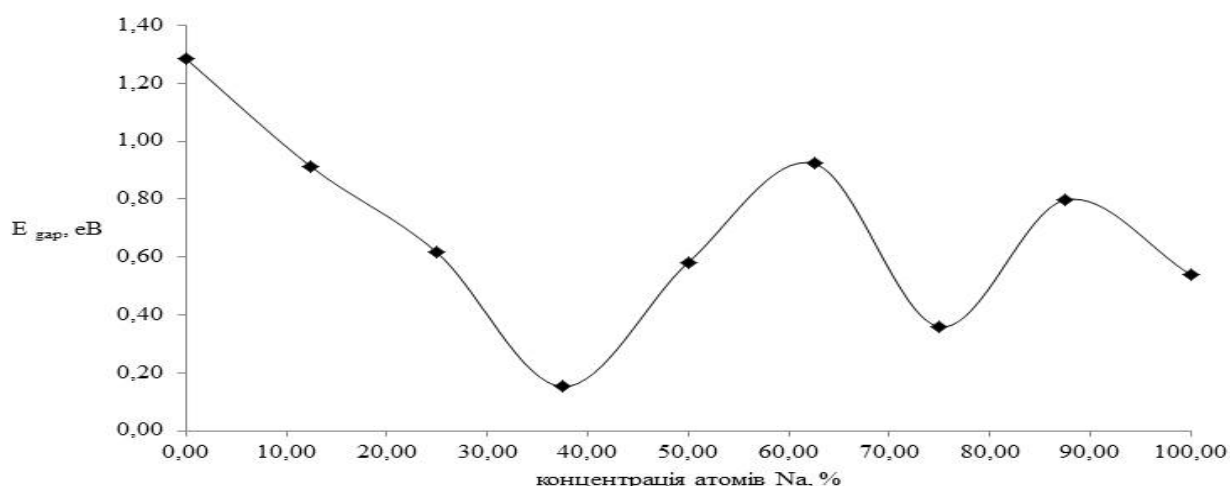


Рис. 5. Залежність ширини забороненої зони двох нескінчених моношарів SnS_2 , що містять атоми Na у їх прошарку, від концентрації атомів Na.

Висновки

Методами функціоналу електронної густини та псевдопотенціалу із перших принципів виконано обчислювальні експерименти на атомних моделях, що відтворюють нескінченні моношари SnS_2 з інтеркальованими в їх міжшаровий простір атомів Na у різній кількості.

Отримано просторові розподіли густини валентних електронів, що демонструють певний характер взаємодії між атомами в шаруватому кристалі SnS_2 : всередині моношарів реалізується ковалентний тип зв'язку між атомами олова та сірки з певною долею йонності, та Ван-дер-Ваальсові взаємодії між атомами сірки та сірки з різних моношарів. При наявності атомів натрію в прошарку Ван-дер-Ваальсові взаємодії між моношарами SnS_2 послаблюються.

Зафіксовано монотонне зменшення ширини забороненої зони при збільшенні кількості атомів натрію в прошарку моношарів SnS_2 до концентрації 40%. При концентрації атомів натрію в прошарку більше 40% монотонність зникає, що знижує однозначність резистивної реакції моношарів SnS_2 на вміст ними атомів натрію.

Встановлена зміна ширини забороненої зони двох нескінчених моношарів SnS_2 при наявності атомів металу в їх прошарках, котра дозволяє використовувати такий матеріал

у якості резистивного детектора атомів певних хімічних елементів.

Список використаної літератури

- [1] Su S., Wu W., Gao J., Luand J., Fan C., Mater J. Chem., 2012, 22, 18101-18110.
- [2] Sun Y., Liu S., Meng F., Liu M., Jin Z., Kongand L., Liu J., Sensors, 2012, 12, 2610-2631.
- [3] Fine G., Cavanagh L., Afonja A., Binions R., Sensors, 2010, 10, 5469-5502.
- [4] Bleckan D. I. Vpliv metody ta umovy viroshyvannia na electriczni vlastivosti cristaliv SnS_2 / D. I. Bleckan, V. V. Frolova // Naukoviy visnic Uzhogodskogo universitetu. Seria Phisika. Vipusk 37. – 2015.
- [5] Li Z., Ding J., Mitlin D. Tin and Tin Compounds for Sodium Ion Battery Anodes: Phase Transformations and Performance // Acc. Chem. Res. – 2015. – 16; 48(6):1657-65.
- [6] Ab initio calculation [Electronniy resurs]: Internet-portal. Reshim dostypa: <http://sites.google.com/a/kdpu.edu.ua/calculationphysics/>. – Zagolovok z ekrana.
- [7] W. Kohn, L.J. Sham, Phys.Rev., 140 (4A), A1133 (1965).
- [8] P. Hohenberg, W. Kohn, Phys.Rev., 136 (3B), B864 (1964).
- [9] R.M. Dreizler, E.K. Gross, Density functional theory (1990).

- [10] Bachelet, G. B., D. R. Hamann, and M. Schlüter. "Pseudopotentials that work: From H to Pu." *Physical Review B* 26.8 (1982): 4199.
- [11] Hamann, D. R., M. Schlüter, and C. Chiang. "Norm-conserving."
- [12] P. J. H. Denteneer and W. van Haeringen. *J. Phys. C: Solid State Phys.* 18 (1985).
- [13] G. Makov, R. Shah and M. C. Payne. Periodic boundary conditions in ab initio calculations. II. Brillouin-zone sampling for aperiodic systems. *Phys. Rev. B* 53, 15513–15517 (1996).
- [14] S. Acharya, O. N. Srivastava. *Phys. Stat. Sol. (a)* 65, 2, 717 (1981).

Стаття надійшла до редакції 24.09.2018 р.

UDC PACS 71.15.–m

DOI <http://dx.doi.org/10.18524/1815-7459.2019.1.159487>

DETECTION OF Na ATOMIC CONCENTRATION BY LAYERED CHALCOGENIDES OF TIN: AB INITIO CALCULATION

*R. M. Balabai, Yu. O. Prikhozha, O. H. Tadeusz**

Department of Physics and Teaching Metodology, Kryvyi Rih Pedagogical University, 54, Gagarina Ave., Krivyi Rih, Dnipropetrovsk region, 50085

* Southern Ukrainian National Pedagogical University named after K. D. Ushinsky 26, Staroportofrankovskaya Str., Odessa, Odessa region, 65007

Summary

The purpose of this work was to study the properties of layered SnS_2 , depending on the concentration of Na atoms intercalated in them. Within the methods of electron density functional and ab initio pseudopotential, we have computational experiments on atomic models that reproduce the infinite monolayers SnS_2 with intercalated atoms in their interlayer space of Na atoms of different quantities are performed. To reproduce two infinite in a plane *a, b* monolayers SnS_2 , consisting of two atomic layers of sulfur separated by an atomic layer of tin, the atomic basis of the primitive cell consisted of 8 sulfur atoms and 16 tin atoms. In this case, in the interlayer space SnS_2 could be from 0 to 16 sodium atoms per cell placed according to their location in a solid body at low temperatures, which corresponded to a two-dimensional concentration of 0 to 100%.

We have obtained the spatial distributions of the density of valence electrons and the electron gap energy spectra, the bond of change in the conductivity of the material has been established, depending on the concentration of the intercalated sodium atoms. A monotonous decrease in the band gap width with an increase in the number of sodium atoms in the layer of SnS_2 monolayers to a concentration of 40% was recorded. At concentrations of sodium atoms in the layer more than 40% monotony disappears, which reduces the uniqueness of the resistive reaction of monolayers SnS_2 on the content of their sodium atoms.

Keywords: detecting the concentration of Na atoms, SnS_2 monolayers, electronic density functional, pseudopotential ab initio

ДЕТЕКТУВАННЯ КОНЦЕНТРАЦІЇ АТОМІВ Na ШАРУВАТИМИ ХАЛЬКОГЕНІДАМИ ОЛОВА: РОЗРАХУНКИ ІЗ ПЕРШИХ ПРИНЦИПІВ

*Р. М. Балабай, Ю. О. Прихожа, О. Х. Тадеуш**

Кафедра фізики та методики її навчання
Криворізький державний педагогічний університет
пр. Гагаріна 54, Кривий Ріг, Дніпропетровська обл., 50086

*Південноукраїнський національний педагогічний університет імені К. Д. Ушинського
вул. Старопортофранківська, 26, Одеса, Одеська обл., 65007

Реферат

Мета даної роботи полягала в дослідженні властивостей шаруватих SnS_2 в залежності від концентрації інтеркальованих у них атомів Na. Застосовуючи методи функціоналу електронної густини та псевдопотенціал із перших принципів, виконано обчислювальний експеримент, користуючись авторським програмним комплексом, на атомних моделях, що відтворюють моношари SnS_2 з інтеркальованими в їх міжшаровий простір атомів Na різної кількості. Для відтворення двох нескінчених в площині a, b моношарів SnS_2 , що складаються із двох атомних шарів сірки, розділених атомним шаром олова, атомний базис примітивної комірки складався з 8 атомів сірки та 16 атомів олова. При цьому в міжшаровому просторі SnS_2 могли знаходитися від 0 до 16 атомів натрію на комірку, розміщених відповідно до їх розташування в твердому тілі при низьких температурах, що відповідала двовимірній концентрації від 0 до 100%.

Отримано просторові розподіли валентних електронів, ширини заборонених зон, встановлено зв'язок зміни провідності матеріалу в залежності від концентрації інтеркальованих атомів натрію. Зафіксовано монотонне зменшення ширини забороненої зони при збільшенні кількості атомів натрію в прошарку моношарів SnS_2 до концентрації 40%. При концентрації атомів натрію в прошарку більше 40% монотонність зникає, що знижує однозначність резистивної реакції моношарів SnS_2 на вміст ними атомів натрію.

Ключові слова: детектування концентрації атомів Na, моношари SnS_2 , функціонал електронної густини, псевдопотенціал із перших принципів