

В. Л. Шапошников, А. В. Кривошеева, В. Е. Борисенко

Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники, Минск, Беларусь

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ЗОН И ОПТИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ ДИХАЛЬКОГЕНИДОВ ОЛОВА

Методами квантово-механического моделирования установлены зонная структура и оптические свойства объема и одного мономолекулярного слоя дихалькогенидов олова – SnS_2 , SnSe_2 и SnTe_2 . Показано, что первые два соединения в объеме являются непрямозонными полупроводниками, в то время как SnTe_2 – бесщелевой полупроводник. При увеличении порядкового номера атома халькогена рассмотренные соединения демонстрируют увеличение постоянных решетки и межатомного расстояния, а также уменьшение ширины запрещенной зоны с 2,4 до 0 эВ. При переходе от объемного материала к одному мономолекулярному слою структурные параметры практически не изменяются; наблюдается пропорциональный рост величины энергетического зазора, в результате чего SnTe_2 становится узкозонным полупроводником с шириной запрещенной зоны 0,17 эВ. Из исследованных соединений наиболее интересным с точки зрения практического использования является диселенид олова SnSe_2 благодаря подходящей для применения в фотовольтаике ширине запрещенной зоны (1,0–1,5 эВ) и значениям коэффициента поглощения вблизи края собственного поглощения более 10^5 см^{-1} . Также большой интерес представляют тройные растворы замещения, варьирование химического состава которых позволяет изменять в широком диапазоне электронную структуру и оптические свойства материалов.

Ключевые слова: дихалькогениды олова, зонная структура, ширина запрещенной зоны, коэффициент оптического поглощения, солнечный элемент.

V. L. Shaposhnikov, A. V. Krivosheeva, V. E. Borisenko

Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics, Minsk, Belarus

COMPUTER SIMULATION OF ENERGETIC BANDS AND OPTICAL PARAMETERS OF TIN DICHALCOGENIDES

The band structure and optical properties of the bulk and one monolayer of SnS_2 , SnSe_2 , and SnTe_2 were established by means of *ab initio* theoretical modeling. The first two bulk compounds were found to be indirect gap semiconductors, while SnTe_2 behaves like a gapless semiconductor. As the atomic number of chalcogen is increased, the compounds considered show an increase in lattice constants and interatomic distances, as well as a decrease in the band gap from 2.4 to 0 eV. Upon transition from the bulk material to a single monolayer, the structural parameters remain practically unchanged. There is a proportional increase in the energy gap, whereby SnTe_2 becomes a narrow-gap semiconductor with a band gap of 0.17 eV. The most interesting compound according to a practical use is tin diselenide SnSe_2 due to the band gap (1.0–1.5 eV) and the absorption coefficient near the absorption edge more than 10^5 cm^{-1} that are appropriate for photovoltaics. Ternary tin dichalcogenides are also of great interest as the variation of the chemical composition of the latter allows modifying the electronic structure and the optical properties in a wide range.

Keywords: tin dichalcogenides, band structure, band gap, absorption coefficient, solar cell.

Введение. В последнее время получение, преобразование и хранение энергии стало одним из наиболее динамично развивающихся направлений современной электроники. Для портативных и автономных приборов необходимо искать новые решения по энергоснабжению посредством эффективных фотоэлектрических и термоэлектрических преобразователей [1]. Тонкопленочные солнечные батареи могли бы предложить новые возможности для усовершенствования указанных приборов, в связи с чем определенный интерес представляют соединения олова, такие как SnS_2 , SnSe_2 и SnTe_2 , поскольку они могут быть синтезированы с использованием серийной технологии, такой как атомно-слоевое или плазмохимическое газофазное осаждение. Химические элементы, входящие в состав указанных соединений, характеризуются невысокой стоимостью, широким распространением в природе (сера и олово), а также малой токсичностью компонентов и технологических процессов их производства.

Сульфид олова существует в различных фазах и стехиометриях [2]. Наиболее исследованным является моносульфид SnS , однако также известен дисульфид SnS_2 с шириной запрещенной зоны более 2 эВ. Недавно методом нанесения на стеклянные подложки с помощью газотранспортного осаждения был получен поликристаллический SnS_2 [3]. Особенностью соединений SnX_2 является слоистая структура, аналогичная структуре хорошо известных дихалькогенидов переходных металлов, примером которых может служить MoS_2 . Уже имеются сведения об использовании SnS_2 для литиевых батарей, полевых транзисторов и расщепления воды [4, 5]. Благодаря ширине запрещенной зоны 2,2–2,4 эВ, SnS_2 также рассматривается в качестве кандидата на роль фотокатализатора, чувствительного в видимой области спектра [6, 7]. Было показано, что SnS_2 мономолекулярной толщины обладает улучшенными фотокаталитическими свойствами по сравнению с его трехмерным аналогом. Авторами [8] были синтезированы слои SnS_2 толщиной в три атома, в которых эффективность преобразования видимого света составила 38,7 %, что значительно выше, чем у объемного SnS_2 [8]. В работе [9] описаны наноразмерные листы SnS_2 , у которых фотокаталитическая активность была значительно повышена за счет двумерности структуры листа. В отличие от дисульфида, сведений о двух других соединениях олова (SnSe_2 и SnTe_2) значительно меньше. Кроме того, имеются данные о формировании твердых растворов замещения вида $\text{SnS}_x\text{Se}_{2-x}$ [10]. Таким образом, исследование свойств дихалькогенидов олова является актуальным и представляет практический интерес.

В настоящей работе с помощью первопринципного метода определены электронная структура и оптические свойства соединений SnX_2 (SnS_2 , SnSe_2 и SnTe_2) как в объемном состоянии, так и в слоях мономолекулярной толщины с целью выявления особенностей и закономерностей изменения их характеристик для возможного применения в фотовольтаике.

Методика исследования. Дихалькогениды олова SnX_2 ($X = \text{S}, \text{Se}, \text{Te}$) кристаллизуются в гексагональной кристаллической решетке (пространственная группа $P3m1$) [2]. В элементарной ячейке содержатся три атома, а кристаллическая решетка напоминает слоистую структуру, характерную для дихалькогенидов тугоплавких металлов вида MoS_2 , к которым в последнее время наблюдается повышенный интерес благодаря их электронным и оптическим свойствам. Плоскость из атомов олова расположена между двумя плоскостями из атомов халькогена. Отличие данной кристаллической структуры от MoS_2 заключается в том, что если в элементарной ячейке последнего содержится два мономолекулярных слоя S-Mo-S, связанных между собой силами Ван-дер-Ваальса, то элементарная ячейка SnX_2 состоит только из одного слоя X-Sn-X, в пределах которого, в отличие от мономолекулярного слоя MoS_2 , атомы халькогена смещены друг относительно друга. Такие свободностоящие слои отличаются стабильностью и могут быть получены в результате механического или химического расщепления, как было показано для SnS_2 [8, 11]. Влияние подложки на двумерные структуры в данной статье не рассматривается.

Атомарную структуру мономолекулярных слоев SnX_2 моделировали путем ограничения объема кристалла плоскостью, перпендикулярной направлению (0001). Для устранения взаимодействия между мономолекулярными слоями использовали разделительный слой вакуума толщиной 17 Å. Позиции всех атомов подвергали релаксации. Полную оптимизацию кристаллической структуры осуществляли в рамках теории функционала плотности, используя первопринципный метод псевдопотенциала (код VASP) с базисом на плоских волнах [12]. Обменно-корреляционное взаимодействие описывали в рамках обобщенного градиентного приближения (ОГП) [13]. Энергия отсечки (параметр ENCUT) была выбрана равной 370 эВ, так как дальнейшее увеличение этого параметра не приводит к существенному изменению полной энергии системы. Интегрирование по зоне Бриллюэна выполняли линейным методом тетраэдров.

Моделирование электронных энергетических зон и оптических спектров исследуемых соединений проводили методом линейаризованных присоединенных плоских волн (пакет WIEN2K [14]) на основе оптимизированных ранее с помощью пакета VASP параметров решеток и атомных позиций. Для вычисления дипольных матричных элементов использовали сетку из 470 к-точек. Межзонные вклады в мнимую часть диэлектрической функции (ϵ_2) вычисляли в приближении хаотических фаз. Эффектами локального поля пренебрегали. Для корректного описания обменно-корреляционного взаимодействия и получения более точных величин энергетических зазоров

использовали модифицированный обменный потенциал Беке – Джонсона (mBJ) [15]. В дальнейшем все зонные спектры и оптические свойства получены с применением mBJ-потенциала.

Результаты и их обсуждение. В ходе полной оптимизации кристаллической структуры были установлены постоянные решеток и межатомные расстояния исследуемых соединений, которые показали хорошую корреляцию с имеющимися экспериментальными данными для объемных материалов. В ряду SnS_2 – SnSe_2 – SnTe_2 первое соединение характеризуется наименьшими величинами постоянных решеток a и c , а также межатомного расстояния Sn-S, в то время как SnTe_2 – наибольшими. При переходе от объемного материала к мономолекулярному слою постоянные решеток и межатомное расстояние Sn-X практически не изменяются. Аналогичная тенденция наблюдалась и для MoS_2 [16].

Рассчитанные электронные энергетические зонные диаграммы исследуемых соединений представлены на рис. 1.

Очевидно, что в обоих случаях SnS_2 и SnSe_2 проявляют полупроводниковые свойства, в то время как соединение SnTe_2 в объеме является бесщелевым полупроводником, поскольку значительная часть нижней зоны проводимости в окрестности точки L пересекает уровень Ферми. При переходе к мономолекулярному слою в SnTe_2 появляется энергетический зазор величиной 0,17 эВ, что превращает данное соединение в узкозонный полупроводник.

Качественно зонные спектры трех соединений в ряду SnS_2 – SnSe_2 – SnTe_2 подобны и характеризуются схожими зонными спектрами вблизи уровня Ферми как в валентной зоне, так и в зоне проводимости. В объемном состоянии SnS_2 и SnSe_2 являются непрямозонными полупроводниками. В их электронных спектрах имеются по два максимума валентной зоны (МВЗ) (в параллельных направлениях Γ –М и А–L) и два минимума зоны проводимости (МЗП) (в точках М и L), значения энергии между которыми различаются всего на десятки миллиэлектронвольт. Полученные величины энергетического зазора хорошо согласуются с экспериментальными данными, в соответствии с которыми ширина запрещенной зоны (E_g) SnS_2 лежит в пределах от 1,9 до 2,2 эВ. К особенностям зонной структуры можно отнести и нижнюю зону проводимости,

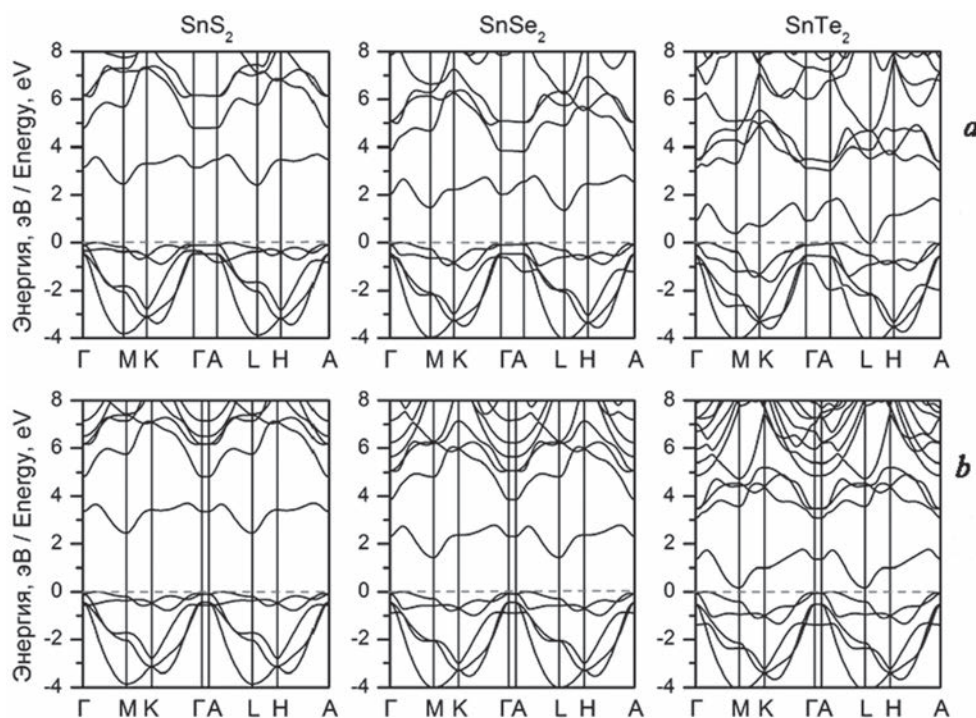


Рис. 1. Энергетическая структура электронных зон в SnX_2 ($X = \text{S}, \text{Se}, \text{Te}$) вдоль направлений высокой симметрии гексагональной зоны Бриллюэна: a – в объемных материалах; b – в слоях мономолекулярной толщины.

Нуль на шкале энергий соответствует уровню Ферми

Fig. 1. Energy band structures of SnX_2 ($X = \text{S}, \text{Se}, \text{Te}$) compounds in some directions of the hexagonal Brillouin zone: a – in bulk materials; b – in one monolayer compounds. Zero on the energy scale corresponds to the Fermi energy

отделенную от остальной зоны проводимости зазором порядка 1,0–1,2 эВ (см. рис. 1). В случае объемных материалов при увеличении порядкового номера халькогена наблюдается понижение величины энергетического зазора в ряду SnS_2 – SnSe_2 – SnTe_2 от 2,42 эВ для SnS_2 до 0 эВ для SnTe_2 .

При переходе от объема к мономолекулярному слою качественно зонная картина практически не изменяется. Наблюдается незначительное увеличение ширины запрещенной зоны, приводящее к тому, что E_g для мономолекулярного слоя SnS_2 составляет 2,45 эВ, а для SnSe_2 – 1,42 эВ. Эта тенденция повторяет поведение дихалькогенидов тугоплавких металлов типа MoS_2 , у которых E_g для мономолекулярного слоя также оказывается немного больше, чем в объемном материале. Это можно объяснить тем, что по мере уменьшения количества слоев расщепление зон, которые ограничивают запрещенную зону, становится менее выраженным, при этом МВЗ и МЗП смещаются соответственно вниз и вверх по энергии. Кроме того, с уменьшением количества слоев взаимодействие между ними также уменьшается, что приводит к меньшей дисперсии зон и большей ширине запрещенной зоны. Отличие от MoS_2 заключается в том, что в последнем при переходе к мономолекулярному слою происходит трансформация непрямозонного полупроводника в прямозонный [16], чего не наблюдается в ряду рассмотренных соединений SnX_2 . В них схожесть зонных структур для объемного соединения и мономолекулярного слоя можно объяснить подобным атомным окружением, а также тем, что элементарная ячейка объемного MoS_2 содержит два смещенных друг относительно друга слоя, в то время как элементарная ячейка SnX_2 – только один слой.

Анализ полных и парциальных плотностей электронных состояний (ПЭС), представленных на рис. 2, и орбитального состава волновых функций на примере SnS_2 показывает, что валентную зону в диапазоне от –7 до 0 эВ можно разделить на несколько характерных областей. Низколежащие энергетические уровни, расположенные в диапазоне от –7 до –4 эВ, практически полностью сформированы Sn-s электронными состояниями. Вторая область (от –4 до –1 эВ), отделенная от первой зазором в 0,1 эВ, обусловлена состояниями Sn-p и S-p. Третья область (от –1 до 0 эВ) характеризуется преимущественно состояниями S-p с небольшим вкладом состояний Sn-d.

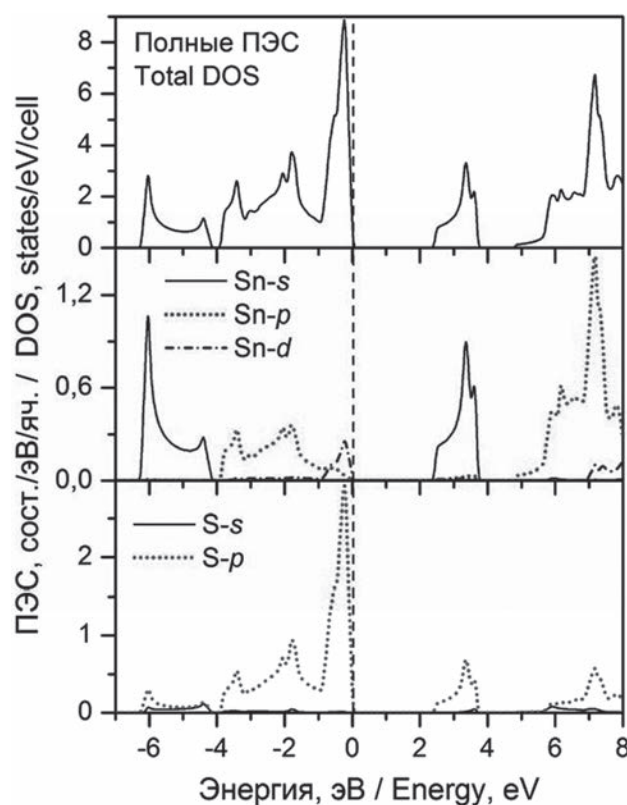


Рис. 2. Полные и парциальные ПЭС объемного SnS_2 . Нуль на шкале энергий соответствует уровню Ферми
 Fig. 2. Total and projected densities of the SnS_2 bulk states. Zero on the energy scale corresponds to the Fermi energy

Нижняя отдельно расположенная зона проводимости вблизи уровня Ферми сформирована в основном за счет состояний Sn-*s* и S-*p*, а последующие уровни зоны проводимости обусловлены в основном *p*-состояниями атомов олова. Аналогичные спектры ПЭС были получены и для двух других соединений. При переходе от объемного материала к мономолекулярному слою характер электронных состояний и орбитальный состав волновых функций не претерпевают существенных изменений.

Анализ оптических свойств дихалькогенидов олова проводили на основании расчетов комплексной диэлектрической функции. Спектральные зависимости мнимой части диэлектрической функции (ϵ_2) для объемных и мономолекулярных структур дихалькогенида олова для двух основных направлений поляризации света представлены на рис. 3.

Полученные спектры характеризуются анизотропией для направлений поляризации света $E||a$ и $E||c$ у всех рассмотренных соединений и типов структур. Однако, несмотря на то, что ширина запрещенной зоны объемного SnTe₂ равна нулю, его спектральная зависимость ϵ_2 схожа со спектрами диэлектрической функции соединений SnS₂ и SnSe₂, которые имеют четко выраженный полупроводниковый характер электронных зон. Это можно объяснить тем, что при моделировании спектров диэлектрической функции учитываются только прямые межзонные переходы, величины которых для SnTe₂ во всех точках зоны Бриллюэна больше нуля.

Все спектральные зависимости ϵ_2 характеризуются отсутствием резкого роста кривой при энергиях, соответствующих ширине запрещенной зоны или первому прямому переходу. В частности, для объемного SnS₂ в зависимости от направления поляризации света энергия первого пика составляет 4,53 и 4,59 эВ. На зонной структуре это соответствует переходам между верхней валентной зоной и второй зоной проводимости в направлении Г–А, перпендикулярном плоскости пленки (0001), что можно объяснить орбитальным составом волновых функций. Поскольку нижняя зона проводимости образована состояниями Sn-*s*, а в верхней валентной зоне присут-

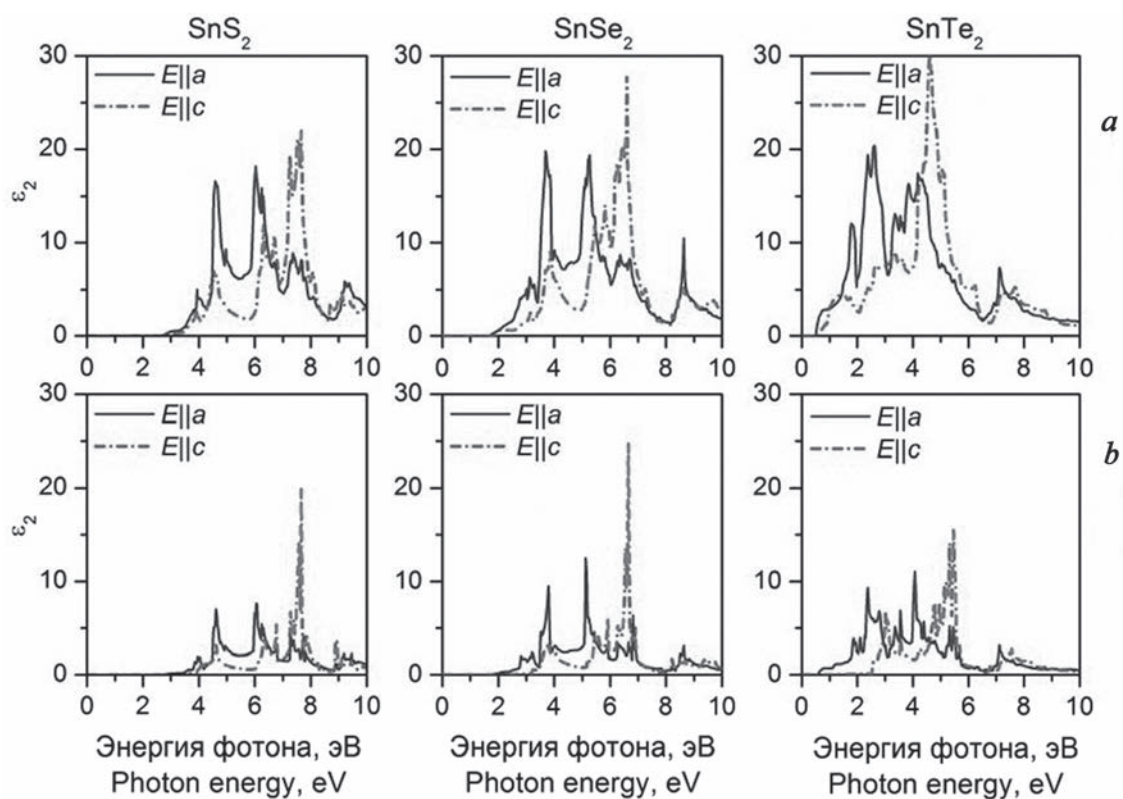


Рис. 3. Мнимая (ϵ_2) часть диэлектрической функции для объемных (а) и мономолекулярных (б) соединений SnX₂ (X = S, Se, Te) при различных направлениях поляризации света

Fig. 3. Imaginary part (ϵ_2) of the dielectric function of bulk (a) and one monolayer (b) of SnX₂ compounds (X = S, Se, Te) in different directions of light polarization

ствуют состояния Sn-*d*, переходы между ними являются запрещенными, так же как и переходы между состояниями S-*p*, формирующими обе зоны. Таким образом, можно заключить, что дихалькогениды олова в объемном состоянии не будут эффективны для создания светоизлучающих элементов.

Спектры ϵ_2 для мономолекулярных слоев SnS₂ и SnSe₂ аналогичны соответствующим спектрам для объемных соединений. Более того, несмотря на некоторое увеличение ширины запрещенной зоны, в SnS₂ и SnSe₂ положение основных пиков у мономолекулярного слоя практически совпадает с положением пиков у объемных соединений. Для SnTe₂ имеет место некоторое смещение пиков. Анализ статической диэлектрической проницаемости ϵ_0 для объемных дихалькогенидов олова показывает понижение ее значений в ряду SnS₂–SnSe₂–SnTe₂ от 13,5 для SnTe₂ до 5 для SnS₂. В случае мономолекулярных слоев наблюдается аналогичная ситуация, однако численные значения оказываются примерно в два раза меньше. Кроме того, если для SnS₂ значения ϵ_0 для двух направлений поляризации света практически равны, то в случае SnTe₂ они существенно различаются, при этом у объемных соединений это различие больше, чем у мономолекулярного слоя.

Для оценки применимости исследуемых материалов в солнечных элементах был проанализирован коэффициент оптического поглощения. На рис. 4 представлены спектральные зависимости коэффициента поглощения света дихалькогенидами олова, усредненные по двум направлениям поляризации света, в сравнении с теоретически рассчитанным спектром для GaAs.

Очевидно, что поскольку объемный дисульфид олова SnS₂ характеризуется значительной шириной запрещенной зоны (2,42 эВ), он не эффективен для использования в солнечных элементах, однако может найти применение в качестве материала, обладающего фотокаталитической активностью под действием видимого излучения. В то же время у диселенида олова SnSe₂ ширина запрещенной зоны составляет порядка 1,50 эВ, что привлекательно для его применения в солнечной энергетике. Следует также отметить, что все три соединения как в виде мономолекулярного слоя, так и в объемном состоянии имеют значения коэффициента оптического поглощения вблизи края собственного поглощения более 10^5 см^{-1} , что сравнимо со значениями коэффициента поглощения для арсенида галлия. Более того, сера, селен и теллур принадлежат одной группе периодической таблицы элементов, а сами материалы являются изоструктурными. Помимо этого, имеются экспериментальные данные о формировании твердых растворов замещения SnS_xSe_{2-x} при варьировании концентрации атомов халькогена [10]. Таким образом, на их основе возможно получать тройные соединения с заданными электронными и оптическими свойствами, в частности с требуемой шириной запрещенной зоны. Все это делает дихалькогениды олова, не содержащие

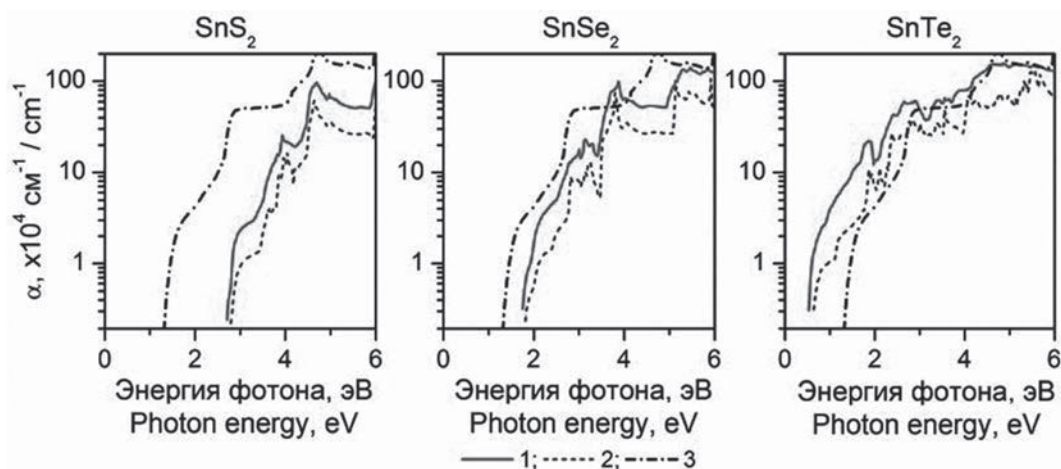


Рис. 4. Зависимость усредненного коэффициента оптического поглощения света (α) объемными (кривая 1) и монослойными (кривая 2) дихалькогенидами олова от энергии фотонов в сравнении с GaAs (кривая 3)

Fig. 4. Averaged absorption coefficient (α) of bulk (curve 1) and one monolayer (curve 2) tin dichalcogenides versus the photon energy as compared to GaAs (curve 3)

дорогостоящих и токсичных компонентов, привлекательными для создания многослойных солнечных элементов и фотокатализаторов.

Заклучение. Путем теоретического моделирования определены электронная структура и оптические свойства объемных дихалькогенидов олова и их изменение при уменьшении толщины до одного мономолекулярного слоя. В то время как SnS_2 и SnSe_2 являются непрямозонными полупроводниками с шириной запрещенной зоны 2,42 и 1,50 эВ соответственно, SnTe_2 в объемном состоянии является бесщелевым полупроводником, а в виде мономолекулярного слоя – узкозонным полупроводником. Такое сочетание свойств в зависимости от состава исследуемых материалов и их размерности открывает важные перспективы их практического использования в солнечной энергетике и для фотокатализа.

Благодарности

Работа выполнена в рамках задания 2.1.02 Государственной программы научных исследований «Фотоника, опто- и микроэлектроника» (2016–2020 гг.).

Acknowledgments

This work was supported by the State Research Program of the Republic of Belarus “Photonics, Opto- and Microelectronics”, grant 2.1.02 (2016–2020).

Список использованных источников

1. High-efficient low-cost photovoltaics: recent developments / ed. V. Petrova-Koch, R. Hezel, A. Goetzberger. Springer-Verlag: Berlin-Heidelberg. – 2008. – Vol. 140. – 228 p.
2. Madelung, O. Semiconductors: data handbook / O. Madelung. – Springer Berlin Heidelberg, 2004. – 691 p.
3. Thermoelectrics with earth abundant elements: low thermal conductivity and high thermopower in doped SnS / Q. Tan [et al.] // *J. Mater. Chem. A*. – 2014. – Vol. 2. – P. 17302–17306.
4. Monodisperse SnS_2 nanosheets for high-performance photocatalytic hydrogen generation / J. Yu [et al.] // *ACS Appl. Mater. Interfaces*. – 2014. – Vol. 6. – P. 22370–22377.
5. Interconnected tin disulfide nanosheets grown on graphene for Li-ion storage and photocatalytic applications / P. Chen [et al.] // *ACS Appl. Mater. Interfaces*. – 2013. – Vol. 5, N 22. – P. 12073–12082.
6. Controlled synthesis and possible formation mechanism of leaf-shaped SnS_2 nanocrystals / D. Ma [et al.] // *Mater. Chem. Phys.* – 2008. – Vol. 111, N 2. – P. 391–395.
7. Novel synthesis and high visible light photocatalytic activity of SnS_2 nanoflakes from $\text{SnCl}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ and S powders / Y. C. Zhang [et al.] // *Appl. Catal. B*. – 2010. – Vol. 95, N 1. – P. 153–159.
8. Freestanding tin disulfide single-layers realizing efficient visible-light water splitting / Y. Sun [et al.] // *Angew. Chem. Int. Ed.* – 2012. – Vol. 51, N 35. – P. 8727–8731.
9. Ultrathin SnS_2 nanosheets with exposed {0 0 1} facets and enhanced photocatalytic properties / R. Wei [et al.] // *Acta Mater.* – 2014. – Vol. 66. – P. 163–171.
10. Field effect transistors with layered two-dimensional $\text{SnS}_{2-x}\text{Se}_x$ conduction channels: effects of selenium substitution / T. Pan [et al.] // *Appl. Phys. Lett.* – 2013. – Vol. 103, N 9. – P. 093108 (5 pp).
11. High-performance top-gated monolayer SnS_2 field-effect transistors and their integrated logic circuits / H. S. Song [et al.] // *Nanoscale*. – 2013. – Vol. 5, N 20. – P. 9666–9670.
12. Kresse, G. Efficient interactive schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set / G. Kresse, J. Furthmüller // *Phys. Rev. B*. – 1996. – Vol. 54, N 16. – P. 11169–11186.
13. Perdew, J. P. Generalized gradient approximation made simple / J. P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof // *Phys. Rev. Lett.* – 1996. – Vol. 77, N 18. – P. 3865–3868.
14. WIEN2k, An augmented plane wave + local orbitals program for calculating crystal properties / P. Blaha [et al.]. – Karlheinz Schwarz, Techn. Universität Wien, Austria, 2001. – 258 p.
15. Tran, F. Accurate band gaps of semiconductors and insulators with a semilocal exchange-correlation potential / F. Tran, P. Blaha // *Phys. Rev. Lett.* – 2009. – Vol. 102, N 22. – P. 226401 (4 pp).
16. Theoretical study of defect impact on two-dimensional MoS_2 / A. V. Krivosheeva [et al.] // *J. Semiconductors*. – 2015. – Vol. 36, N 12. – P. 122002 (6 pp).

References

1. Petrova-Koch V., Hezel R., Goetzberger A. (eds.) *High-efficient low-cost photovoltaics: recent developments*. Berlin-Heidelberg, Springer-Verlag, 2008, vol. 140. 228 p.
2. Madelung O. *Semiconductors: data handbook*. Berlin-Heidelberg, Springer, 2004. 691 p.
3. Tan Q., Zhao L.-D., Li J.-F., Wu C.-F., Wei T.-R., Xing Z.-B., Kanatzidis M. G. Thermoelectrics with earth abundant elements: low thermal conductivity and high thermopower in doped SnS . *Journal of Materials Chemistry A*, 2014, vol. 2, no. 41, pp. 17302–17306. doi: 10.1039/C4TA04462B.
4. Yu J., Xu C.Y., Ma F.X., Hu S.P., Zhang Y.W., Zhen L. Monodisperse SnS_2 nanosheets for high-performance photocatalytic hydrogen generation. *ACS applied materials & interfaces*, 2014, vol. 6, no. 24, pp. 22370–22377. doi: 10.1021/am506396z.

5. Chen P. Su Y., Liu H., Wang Y. Interconnected tin disulfide nanosheets grown on graphene for Li-ion storage and photocatalytic applications. *ACS applied materials & interfaces*, 2013, vol. 5, no. 22, pp. 12073–12082. doi: 10.1021/am403905x.
6. Ma D., Zhou H., Zhang J., Qian Y. Controlled synthesis and possible formation mechanism of leaf-shaped SnS₂ nanocrystals. *Materials Chemistry and Physics*, 2008, vol. 111, no. 2, pp. 391–395. doi: 10.1016/j.matchemphys.2008.04.035.
7. Zhang Y.C., Du Z.N., Li S.Y., Zhang M. Novel synthesis and high visible light photocatalytic activity of SnS₂ nanoflakes from SnCl₂·2H₂O and S powders. *Applied Catalysis B: Environmental*, 2010, vol. 95, no. 1, pp. 153–159. doi: 10.1016/j.apcatb.2009.12.022.
8. Sun Y., Cheng H., Gao S., Sun Z., Liu Q., Liu Q., Lei F., Yao T., He J., Wei S., Xie Y. Freestanding tin disulfide single-layers realizing efficient visible-light water splitting. *Angewandte Chemie International Edition*, 2012, vol. 51, no. 35, pp. 8727–8731. doi: 10.1002/anie.201204675.
9. Wei R., Hu J., Zhou T., Zhou X., Liu J., Li J. Ultrathin SnS₂ nanosheets with exposed {0 0 1} facets and enhanced photocatalytic properties. *Acta Materialia*, 2014, vol. 66, pp. 163–171. doi: 10.1016/j.actamat.2013.11.076.
10. Pan T., De D., Manongdo J., Guloy A., Hadjiev V., Lin Y., Peng H. Field effect transistors with layered two-dimensional SnS_{2-x}Se_x conduction channels: effects of selenium substitution. *Applied Physics Letters*, 2013, vol. 103, no 9, p. 093108. doi: 10.1063/1.4819072.
11. Song H.S., Li S.L., Gao L., Xu Y., Ueno K., Tang J., Cheng Y B. High-performance top-gated monolayer SnS₂ field-effect transistors and their integrated logic circuits. *Nanoscale*, 2013, vol. 5, no. 20, pp. 9666–9670. doi: 10.1039/c3nr01899g.
12. Kresse G., Furthmüller J. Efficient interactive schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set. *Physical review B*, 1996, vol. 54, no. 16, pp. 11169–11186. doi: 10.1103/PhysRevB.54.11169.
13. Perdew J.P., Burke K., Ernzerhof M. Generalized gradient approximation made simple. *Physical review letters*, 1996, vol. 77, no. 18, pp. 3865–3868. doi:10.1103/PhysRevLett.77.3865.
14. Blaha P., Ma K., Madsen G. K. H., Kvasnicka D., Luitz J. *WIEN2k, an augmented plane wave + local orbitals program for calculating crystal properties*. Wien, Vienna University of Technology, 2001. 258 p.
15. Tran F., Blaha P. Accurate band gaps of semiconductors and insulators with a semilocal exchange-correlation potential. *Physical review letters*, 2009, vol. 102, no 22, p. 226401. doi: 10.1103/PhysRevLett.102.226401.
16. Krivosheeva A.V., Shaposhnikov V.L., Borisenko V.E., Lazzari J.-L., Waileong Ch., Gusakova J., Tay B.K. Theoretical study of defect impact on two-dimensional MoS₂. *Journal of Semiconductors*, 2015, vol. 36, no. 12, p. 122002. doi: 10.1088/1674-4926/36/12/122002.

Информация об авторах

Шапошников Виктор Львович – кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник, Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники (ул. П. Бровки, 6, 220013, г. Минск, Республика Беларусь). E-mail: victor.shaposhnikov@gmail.com

Кривошеева Анна Владимировна – кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник, Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники (ул. П. Бровки, 6, 220013, г. Минск, Республика Беларусь). E-mail: anna@nano.bsuir.edu.by

Борисенко Виктор Евгеньевич – доктор физико-математических наук, профессор, заведующий кафедрой микро- и нанoeлектроники, Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники (ул. П. Бровки, 6, 220013, г. Минск, Республика Беларусь). E-mail: borisenko@bsuir.by

Для цитирования

Шапошников, В. Л. Компьютерное моделирование энергетических зон и оптических параметров дихалькогенидов олова / В. Л. Шапошников, А. В. Кривошеева, В. Е. Борисенко // Вес. Нац. акад. навук Беларусі. Сер. фіз.-мат. навук. – 2016. – № 4. – С. 90–97.

Information about the authors

Shaposhnikov Victor L'vovich – Ph. D. (Physics and Mathematics), Senior researcher, Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics (6, P. Brovka Str., 220013, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: victor.shaposhnikov@gmail.com

Krivosheeva Anna Vladimirovna – Ph. D. (Physics and Mathematics), Senior researcher, Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics (6, P. Brovka Str., 220013, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: anna@nano.bsuir.edu.by

Borisenko Victor Evgenievich – Dr. Sc. (Physics and Mathematics), Professor, Head of the Department of Micro- and Nanoelectronics, Belarusian State University of Informatics and Radioelectronics (6, P. Brovka Str., 220013, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: borisenko@bsuir.by

For citation

Shaposhnikov V.L., Krivosheeva A.V., Borisenko V.E. Computer simulation of energetic bands and optical parameters of tin dichalcogenides. *Vestsi Natsyional'nei akademii navuk Belarusi. Seryia fizika-matematychnykh navuk* [Proceedings of the National Academy of Sciences of Belarus. Physics and Mathematics series], 2016, no. 4, pp. 90–97. (in Russian)