

Teorētiskā izpēte par ierosinātā stāvokļa īpašībām divdimensiju nanokompozītiem ūdens sadalīšanai

Yin-Pai Lin, Dmitrijs Bočarovs and Sergejs Piskunovs
Latvijas Universitātes Cietvielu fizikas institūts

Struktūrām, ko veido pārejas metālu dikalkogenīds (TMD) un grafēnam līdzīgs substrāts, pēdējā laikā ir pievērsta liela uzmanība, jo tās ievērojami uzlabo optiskās īpašības. Ņemot vērā ūdens sadalīšanu, nanokompozītmateriāli ne tikai pārņemto substrāta īpašības ūdens sadalīšanai, bet arī pastiprina TMD absorbciju, kas uzlabo sliktu saules enerģijas ieguvu. Mūsu skaitļošanas darbs parāda TMD (WS_2 , MoS_2) elektroniskās, optiskās un ierosinātā stāvokļa īpašības, kas nogulsnētas virs ZnO substrāta no grafēnam līdzīgās fāzes līdz wurtzīta fāzei. Joslu malu pozīcijas attiecībā uz ūdens sadalīšanas kritērijiem atklāj, ka $MoS_2@ZnO$ 2D nanokompozīti parasti nav piemēroti spontānai ūdeņraža ražošanai salīdzinājumā ar $WS_2@ZnO$. Tiek prognozēts, ka, veicot turpmāku optisko īpašību analīzi, ZnO substrāts ar TMD demonstrēs platjoslas optisko reakciju, lai uzlabotu ūdens sadalīšanas spēju redzamā gaismā. Mūsu teorētiskais pētījums ir tāds, ka biezāks masveida ZnO substrāts nespēj uzlabot absorbciju pie $MoS_2@ZnO$ un $WS_2@ZnO$ 2D nanokompozītiem saules spektru redzamajā reģionā, kā paredzēts, savukārt grafēnam līdzīgo ZnO substrātu var ieteikt kā labāko kandidātu, lai uzlabotu nanokompozītu fotoreakciju, ko rada redzamā gaisma. Funding from M-ERA.NET project CatWatSplit is greatly acknowledged.

Theoretical investigation on excited state properties of Two-Dimensional Nanocomposites for Water-Splitting Applications

Yin-Pai Lin, Dmitry Bocharov, and Sergei Piskunov
Institute of Solid State Physics, University of Latvia

The structures formed by transition metal dichalcogenide (TMD) and graphene-like substrate have got considerable attention recently due to their significant enhancement for optical properties. With the consideration of watersplitting, the nanocomposites not only inherit the properties of the substrate for water-splitting, but also strengthen the absorption by the TMDs which improve harvesting of solar irradiation. In this study we have calculated the electronic, optical and excited state properties of the TMDs (WS_2 , MoS_2) deposited atop of ZnO substrate in its graphene-like and wurtzite phases. The band edge positions calculated with respect to the watersplitting redox levels reveal that $MoS_2@ZnO$ 2D nanocomposites is generally not suitable for spontaneous production of the hydrogen in comparison with $WS_2@ZnO$. Further analysis of optical properties allows us to conclude that the ZnO substrate with TMDs demonstrates the broadband optical response enhancing visible-light-driven watersplitting. We predict that the thicker bulk-like ZnO substrate can fail to enhance absorption at $MoS_2@ZnO$ and $WS_2@ZnO$ 2D nanocomposites in the visible region of solar spectra, while the graphene-like ZnO substrate can be suggested as the best candidate to improve visible-light-driven photoresponse necessary for efficient watersplitting. Funding from M-ERA.NET project CatWatSplit is greatly acknowledged.