

ORIGINAL ARTICLE**Electronic, Optical and Thermoelectric Properties of WSe<sub>2</sub>(8,0) and WSeS(8,0) Nanotubes****Correspondence**

Email:

**How to cite****ABSTRACT**

Based on density functional theory calculations, the electronic, optical and thermoelectric properties of WSe<sub>2</sub>(8,0) and WSeS(8,0) nanotubes have been investigated. The WSe<sub>2</sub>(8,0) nanotube has 0.2eV energy gap, and this gap is reduced by adding a Se atom in it. The band structure shows that WSe<sub>2</sub>(8,0) nanotube is p-type semiconductor and WSeS(8,0) compound is n-type. The imaginary part of the dielectric function shows that these two structures in the infrared region have main response to the light and have small optical gaps, while the optical energy loss functions have the lowest values in this energy region. At a temperature of 200 K, the figure of merit coefficient of WSeS(8,0) nanotube is larger than WSe<sub>2</sub>(8,0) one, but at high temperatures, the power factor coefficient of WSe<sub>2</sub>(8,0) nanotube is higher, which shows that this case is suitable for power generators.

**KEYWORDS**

DFT, WSe<sub>2</sub>(8,0) and WSeS(8,0) Nanotubes, Electronic, Optic, Thermoelectric.

فصلنامه علمی  
اپتوالکترونیک

«مقاله پژوهشی»

# بررسی خواص الکترونی، اپتیکی و ترموالکتریکی نانو لوله‌های (0, 8) WSe<sub>2</sub> و WSeS(0, 8)

1

## چکیده

بر اساس محاسبات تئوری تابعی چگالی، خواص الکترونیکی، نوری و ترموالکتریکی نانولوله‌های (0, 8) WSe<sub>2</sub> و WSeS(0, 8) بررسی شده‌اند. نانولوله (0, 8) WSe<sub>2</sub> دارای شکاف انرژی 0/2 الکترون ولت است و این شکاف با افزودن یک اتم Se در آن کاهش می‌یابد. ساختار نوار نشان می‌دهد که نانولوله (0, 8) WSe<sub>2</sub> نیمه هادی نوع p و ترکیب WSeS(0, 8) از نوع n است. بخش موهومی تابع دی‌الکتریک نشان می‌دهد که این دو ساختار در ناحیه مادون قرمز پاسخ اصلی به نور دارند و دارای شکاف‌های نوری کوچکی هستند، در حالی که توابع اتلاف انرژی نوری کمترین مقدار را در این ناحیه انرژی دارند. در دمای 200 کلوین، رقم ضریب مریت نانولوله WSeS(0, 8) بزرگ‌تر از (0, 8) WSe<sub>2</sub> است، اما در دماهای بالا ضریب توان نانولوله WSe<sub>2</sub>(0, 8) بیشتر است. که نشان می‌دهد این مورد برای ژنراتورهای برق مناسب است.

## واژه‌های کلیدی

نظریه تابعی چگالی، نانو لوله (0, 8) WSe<sub>2</sub> و WSeS(0, 8)، الکترونیک، اپتیک، ترموالکتریک.

نویسنده مسئول:  
رایانامه:

استناد به این مقاله:

## مقدمه

از زمان کشف گرافن<sup>1</sup>، مواد دو بعدی و یک بعدی به دلیل خواص منحصر به فردشان توجه روزافزونی را به خود جلب کرده‌اند. در سال‌های گذشته مواد دوبعدی به دلیل استفاده بالقوه آنها در دستگاه‌های الکترونیکی و نوری جدید مانند، ترانزیستورهای اثر میدان تونل‌زنی در مقیاس نانو<sup>2</sup> TEFT، دیودها، آشکارسازهای عکس، کانون اصلی تحقیقات تبدیل شده‌اند [1-3].

ویژگی‌های جذاب الکترونیکی و نوری آنها با داشتن یک گاف نواری مستقیم در ناحیه مادون قرمز و مرئی از آنها برای کاربردهای فوتونیک و اپتوالکترونیک گزینه‌های مناسبی برای کاربردهای صنعتی ساخته است. علاوه بر گاف نواری مستقیم آنها، به دلیل تقارن وارونگی در آنها، الکترون‌ها در این ساختار کریستالی دارای درجه آزادی زیادی هستند که در بحث دره‌های الکترونیکی<sup>3</sup> می‌توانند استفاده شوند. همچنین، جفت شدن اسپین مدار در این تک‌لایه‌ها منجر به شکاف‌های اسپین مدار می‌شود که منجر به اسپین قابل کنترل الکترون در تنظیم فوتون‌های لیزری برانگیخته می‌شود. همه این ویژگی‌ها تک‌لایه‌های TMDC<sup>4</sup> را به نسل جدیدی تبدیل می‌کند به طوری که نانو مواد TMDC مانند دیسولفید تنگستن WS<sub>2</sub>، دی‌سلنید تنگستن [4WS<sub>2</sub>Se<sub>2</sub>]، دیسولفید مولیبدن [5MoS<sub>2</sub>] و دی‌سلنید مولیبدن MoSe<sub>2</sub> به عنوان یک نسل نانو مواد فوتونی جدید در حال ظهور است [9]، که به دلیل خاصیت نوری، کاتالیزوری، الکترونیکی و روان کننده [6-8] آنها منجر به تولید دستگاه‌هایی نظیر سوئیچ کننده، محدود کننده نوری، تابشگر، آشکارساز، دیود و ترانزیستور با کارایی بالا شده‌اند [10-14]. در سال‌های اخیر چندین کار در مورد مطالعه نانولایه‌های دی‌کالکوژنید مولیبدن و تنگستن و نانولوله‌های مربوطه بر اساس [15] MX<sub>2</sub> (M=Mo, W; X, Y=S, Se) منتشر شده، در میان آنها توجه بیشتری به محاسبات ساختار الکترونیکی و پایداری نانولوله‌های مخلوط دی‌کالکوژنید مولیبدن معطوف شد و کارهای نسبتاً کمتری به نانولوله‌های دی‌کالکوژنید تنگستن مشابه اختصاص یافت. برای موارد نانولوله‌های TMD، دو مزیت منحصر به فرد وجود دارد، از جمله فاصله باند مناسب در محدوده نور مرئی و جفت شدن بین گرادیان کرنش و پلاریزاسیون، که می‌تواند به طور گسترده در نیمه هادی‌ها تحقق یابد [16].

مواد ترموالکترونیک در گرادیان حرارتی از طریق انتشار حامل‌های بار، گرما را به جریان الکتریکی تبدیل می‌کنند (الکترون‌ها و حفره‌ها) بنابراین، سیستم‌های قدرت ترموالکترونیک به طور مستقیم گرما را به برق مفید تبدیل می‌کند و این می‌تواند راه حلی برای بحران انرژی و محیط زیست باشد. پیشرفت‌های اخیر که توسط روش‌های نوین نانوتکنولوژی به ما کمک کرده‌اند تا به دستگاه‌های ترموالکترونیک بسیار کارآمد دست پیدا کنیم. این مواد نه تنها برای تولید گرما بلکه به عنوان سرد کننده‌های ترموالکترونیک مبتنی بر پلیر نیز استفاده می‌شود. ضریب سیبیک یک ماده ولتاژ بزرگتر موالتکترونیک القایی است که به دما و ساختار کریستال بستگی دارد. علامت ضریب سیبیک بیانگر نوع حامل‌های بار در تراورد الکترونیک است. در نیمه هادی نوع n که حاملان بار الکترون هستند، ضریب سیبیک منفی و در نیمه هادی نوع p که حاملان بار حفره‌ها هستند، ضریب سیبیک مثبت است. ضریب سیبیک بزرگ نشان می‌دهد که یک اختلاف دمایی کوچک، ولتاژ بزرگی را در دو طرف ماده به وجود می‌آورد. بنابراین برای یک ماده ترموالکترونیک، ضریب سیبیک بزرگ ضروری است. کارایی ترموالکترونیک مواد از طریق محاسبه شاخص بدون بعد مریت<sup>5</sup> (ZT) قابل اندازه گیری است که می‌توان با استفاده از فرمول زیر آنرا محاسبه کرد.

$$ZT = \frac{s^2 \sigma T}{K} \quad (1)$$

که در آن T دمای مطلق، S ضریب سیبیک،  $\sigma$  رسانندگی الکتریکی و K مقدار رسانندگی گرمایی شامل سهم شبکه و الکترون ( $K=K_{el}+K_{latt}$ ) هستند [17, 18].

## روش محاسبات

محاسبات ساختاری الکترونی و اپتیکی، ترموالکترونیک شبه گرافن WSe<sub>2</sub> و WSeS بر پایه نظریه تابع چگالی با روش امواج تخت بهبود یافته با پتانسیل کامل [19] با استفاده از کدهای محاسباتی Boltztrap [20-24] محاسبه شده است. در نوع محاسبه پتانسیل تبدیلی همبستگی از تقریب GGA<sup>6</sup> و [25] mBJ استفاده کردیم. همچنین در بخش اپتیکی از تقریب‌های RPA استفاده شده است [26, 27]. برای محاسبات ساختاری و الکترونی،  $K_{point}=100$ ،  $R_{Kmax}=7.0$ ،  $L_{max}=10$  انتخاب شده‌اند، ساختار WSeS، WSe<sub>2</sub> با استفاده از دستور mini position با دقت 0.01 fc نیروی وارد بر اتم‌ها را ریلکس کردیم. با استفاده از خروجی‌های Wien2k محاسبه

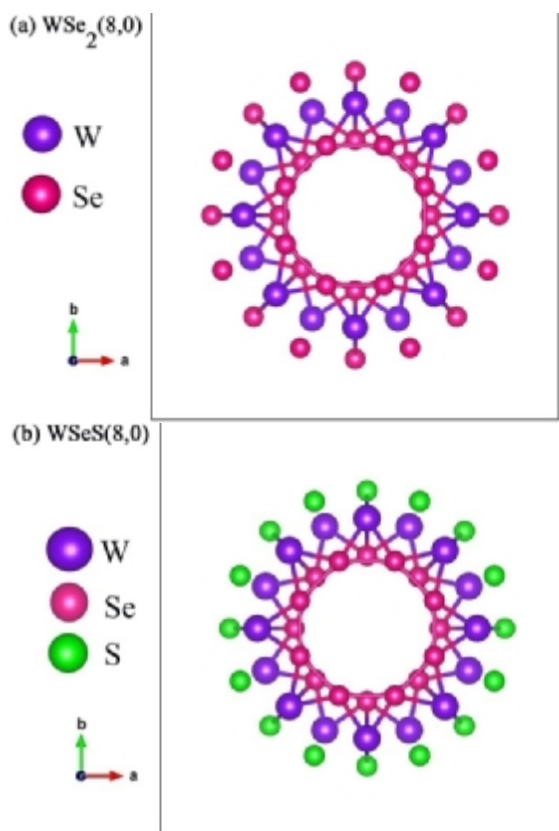
1 Graphene  
2 Tunneling field-effect transistors  
3 valleytronics  
4 Transition metal dichalcogenides

5 Figure of Merit  
6 Generalized Gradient Approximation  
7 Modified Beck Jacson

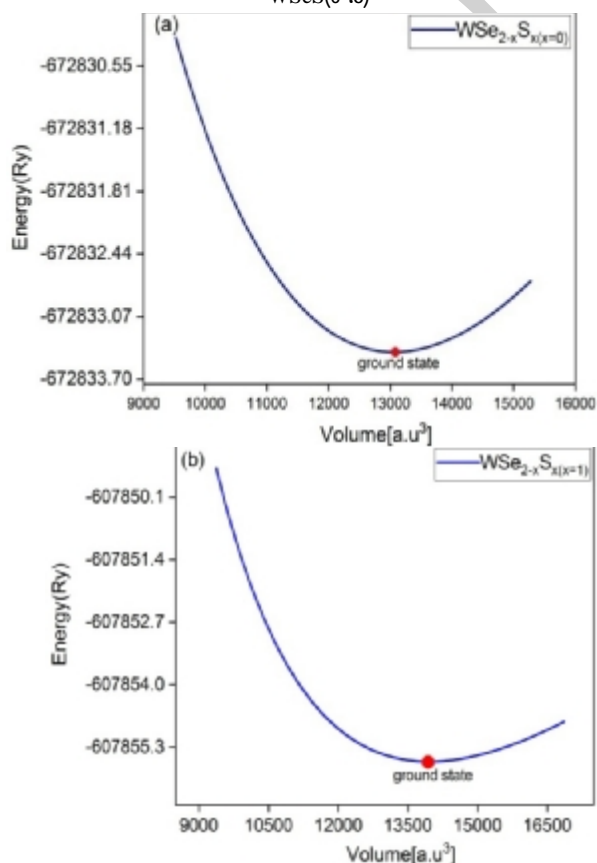
ترموالکتريکی با استفاده از کد BoltzTraP محاسبه شده است.

### نتایج و بحثها

شکل (1) ساختار نانو تیوبهای  $WSe_2(0,8)$  و  $WSeS(0,8)$  در پنلهای (a) و (b) نشان می‌دهد. این نانو تیوبها به صورت زیگزاگ در نظر گرفته شده است سطح مقطع در نانو تیوب  $(8,8)$   $WSe_2$  شاهد سه دایره متحد مرکز هستیم و به این ترتیب اتمهای W و Se قرار دارد. حضور اتمهای Se در لایه بیرونی تنها با یک پیوند الکتریکی اتفاق افتاده است، همین اتفاق در نانو تیوب  $WSeS(0,8)$  تکرار شده است اتمهای لایه بیرونی اتم S است، بنابراین انتظار می‌رود با حضور الکترونهای آزاد در سطح نانو تیوب موجب رفتارهای الکتریکی جدیدی برای آن گردد. اولین اقدام برای نشان دادن پایداری این ترکیب محاسبه منحنی انرژی بر حسب حجم برای آن ترکیب بوده است. منحنیها را در شکل (2) پنلهای (a) تا (b) نشان داده‌ایم. ملاحظه می‌شود که برای هر دو ترکیب، منحنی تغییرات انرژی کل سلول بر حسب تغییرات حجم دارای نقطه تعادلی و حجم تعادلی می‌باشد. بنابراین این ترکیبات از لحاظ پایداری پایدار هستند، اما انرژیهای بر حسب حجم آنها با یکدیگر تفاوت‌هایی دارند تفاوت در قوس منحنی هاست به طوری که قوس منحنی در ترکیب  $WSe_2$  تندتر و قوس منحنی در ترکیب  $WSeS$  کمتر است. همین امر باعث شده است بزرگی حجم تعادلی  $WSe_2(0,8)$  کمتر است، همچنین انتظار داریم بالک مدول و سختی بلور در اینجا بیشتر باشد، با نگاهی به جدول (1) این نکته کاملاً تایید شده است. بالک مدول نانو تیوب  $WSe_2$  بزرگ‌تر از بالک مدول  $WSeS$  است. در جدول (1) حجم تعادلی و ثابت‌های شبکه لیست شده است. نکته دیگر آنکه که در جدول (1) باید به آن توجه کرد مشتق بالک مدول است، مشتق بالک مدول نانو تیوب  $WSe_2(0,8)$  نشان می‌دهد نوع پیوندها در این ترکیب کوالانسی، اما در نانو تیوب  $(8,8)$   $WSeS(0)$  به سمت یونی بودن میل می‌کند. ممان مغناطیسی این ترکیب نیز در جدول (1) ملاحظه می‌شود صفر است. بنابراین انتظار داریم رفتار الکتریکی این ترکیبات در دو اسپین بالا و پایین یکسان باشد.



شکل 1. (a) سطح مقطع نانولوله  $(8,8)$  (b)  $WSe_2$  سطح مقطع نانو لوله  $WSeS(0,8)$



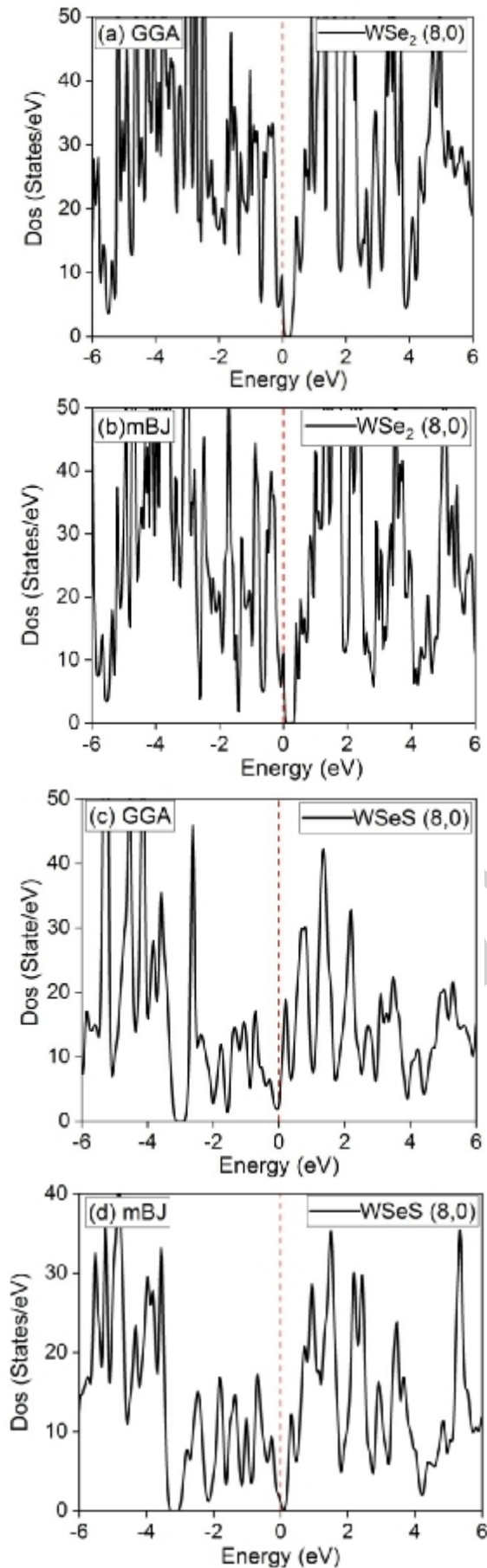
شکل 2. (a) نمودار انرژی بر حسب حجم نانو تیوب  $WSe_2(0,8)$  (b) نمودار انرژی بر حسب حجم نانو تیوب  $WSeS(0,8)$   
جدول 1. ثابت شبکه، حجم تعادلی، بالک مدول، مشتق بالک مدول،

انرژی تعادلی، ممان مغناطیسی ترکیب WSe<sub>2</sub> و WSeS

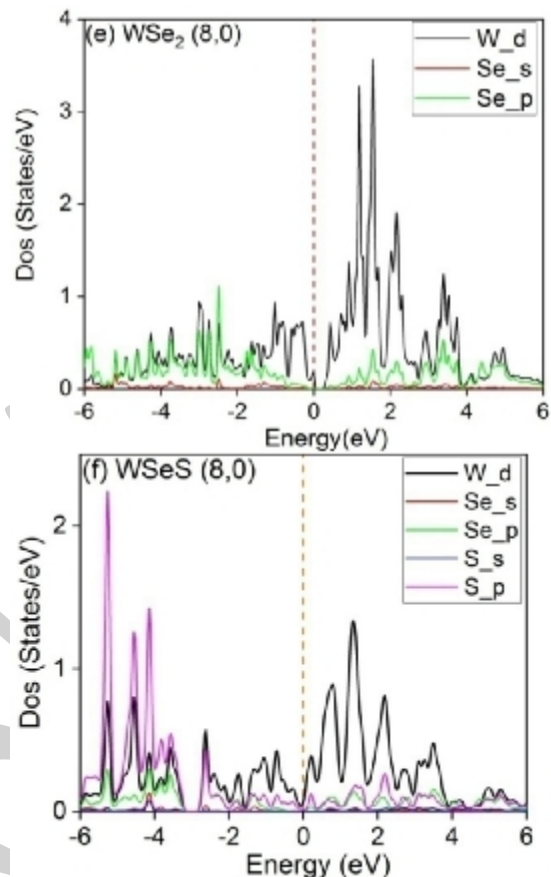
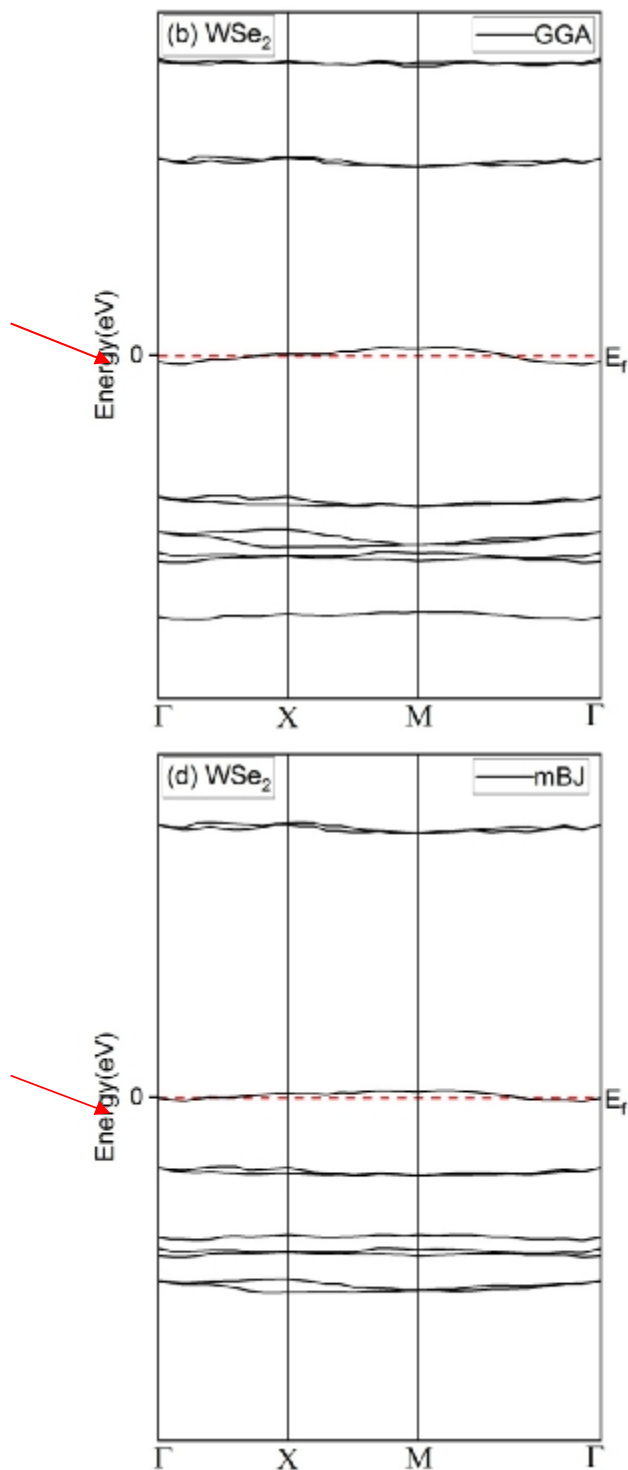
parameter	WSe <sub>2</sub>	WSeS
a(bohr)	34.0150	34.0150
c(bohr)	10.8898	10.8898
Volume[a.u. <sup>3</sup> ]	13063.4381	13960.7996
B(Gpa)	67.2403	56.4174
B'	2.4492	4.2610
Energy(Ry)	-672833.42988	-607855.6010
M <sub>tot</sub>	0.0	0.0

### بخش الکترونی

در شکل‌های (3) منحنی‌های چگالی حالات الکترونی کل و جز با دو تقریب GGA و mBJ و برای این دو نانو تیوب رسم شده است. در پنل (a) و (b) برای نانو تیوب WSe<sub>2</sub>(0,8) دو تقریب GGA و mBJ نشان می‌دهد که این ترتیب یک نیمه هادی نوع n با گاف 0/2 الکترون ولت می‌باشد نکته قابل توجه آن است با تغییر تقریب‌ها گاف نواری تغییر زیادی نکرده است. حالات الکترونی زیر سطح فرمی کامل پیوسته است، که نشان‌دهنده یک منبع عظیم و مناسب برای الکترون‌های برانگیخته است، همچنین در بالای سطح فرمی حالات الکترونی کاملاً پیوسته و با احتمال حالات بزرگ مشاهده می‌شود. بسیار به خوبی می‌توان رسانندگی‌های الکترونیکی و گرمایش جریان داشته باشد. در پنل (c) و (d) چگالی حالات الکترونی WSeS(0,8) با تقریب GGA نشان داده شده است. این ترکیب فلزی است. و حالات الکترونی سطح فرمی را قطع کرده است، اما با اعمال تقریب mBJ در سطح فرمی یک شکافتگی خیلی کوچک ایجاد شده است و شاهد یک گاف کوچک حد صفر الکترون ولت است. حضور اتم گوگرد به جای یکی از اتم‌های Se سبب شده است در زیر سطح فرمی شاهد یک گاف در محدوده 3/5 - الکترون ولت باشیم. همچنین مقدار چگالی حالات نسبت به نانو تیوب WSe<sub>2</sub>(0,8) در زیر و بالای سطح فرمی کاهش پیدا کرده است. در پنل‌های (e) و (f) چگالی حالات جزئی اوربیتال‌های موثر این اتم‌ها نشان داده شده است. از همپوشانی این اوربیتال‌ها در ناحیه والانس در می‌یابیم نوع پیوندها در نانو تیوب WSe<sub>2</sub>(0,8) از نوع p-d است. در نانو تیوب WSe<sub>2</sub>(0,8) اوربیتال‌های غالب در پیوند در زیر سطح فرمی اوربیتال‌های p-w و p-se هستند و در بالای سطح فرمی نقش اوربیتال‌های d اتم W به مراتب بیشتر شده است. اما در ساختار نانو تیوب WSeS(0,8) در ناحیه 3- تا 6- الکترون ولت اتم‌های p نقش غالب را دارد. در بالای سطح فرمی نیز اوربیتال‌های d اتم W بیشترین نقش را بازی می‌کند.

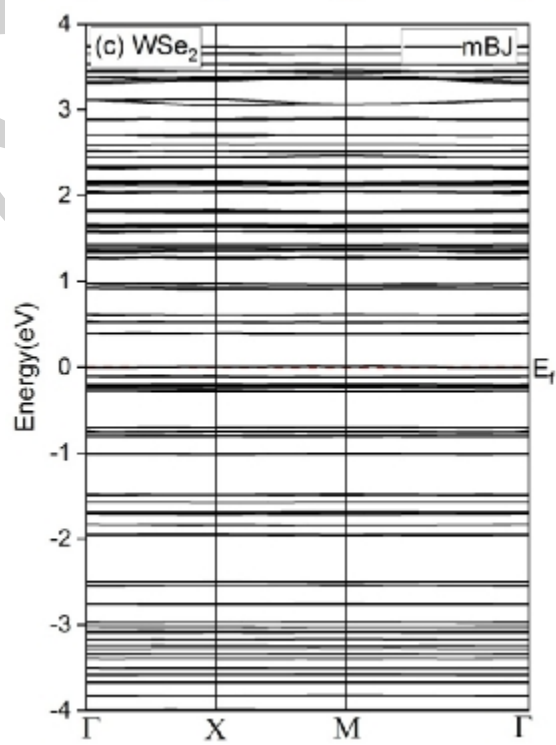
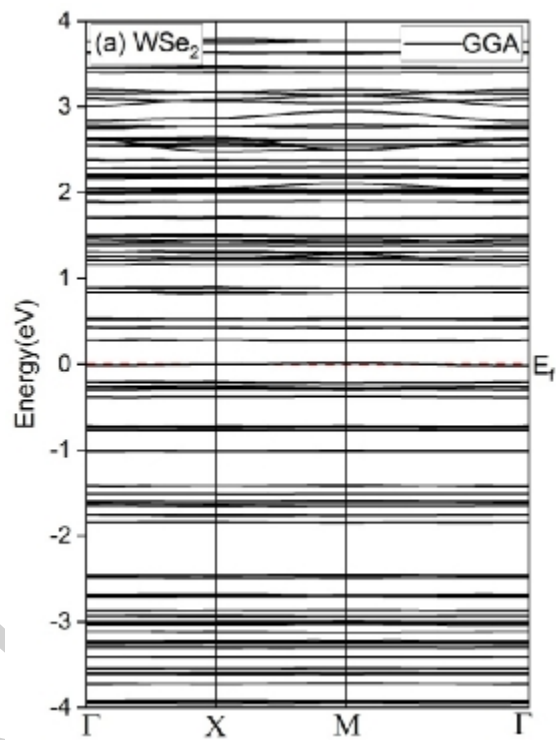
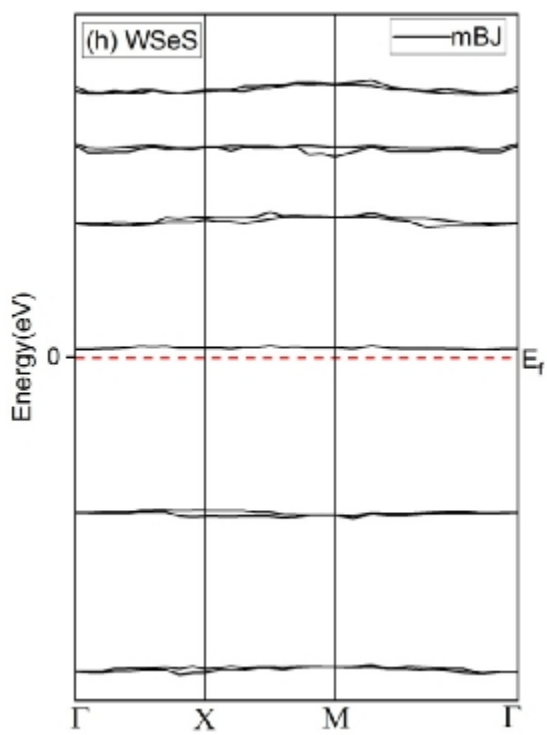
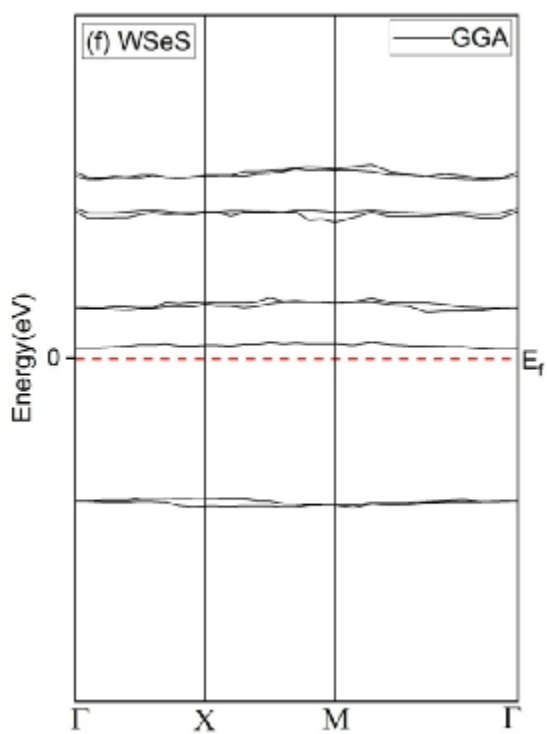


شاهد رفتار نیمه هادی مشاهده می‌شود. با اعمال تقریب شاهد فاصله گرفتن و شکافتگی ترازها پیرامون سطح فرمی هستیم وجود ترازهای تقریباً تخت در این ترکیب آن را گزینه مناسب برای کاربردهای ترموالکتریکی و فوتونی می‌کند.



شکل 3. (a-d) چگالی حالات با تقریب GGA و mBJ  $WSe_2(0,8)$  و  $WSeS(0,8)$ . (e, f) چگالی حالات جزئی  $WSe_2(0,8)$  و  $WSeS(0,8)$ .

در شکل (4) نمودار ساختار نواری نانو تیوب  $WSe_2(0,8)$  و  $WSeS(0,8)$  با دو تقریب GGA و mBJ رسم شده است. در پنل (a) و (b) ساختار نواری  $WSe_2(0,8)$  با دو تقریب مذکور در راستای تقارنی  $\Gamma \rightarrow X$  و  $\Gamma \rightarrow M$  رسم شده‌اند، محاسبات نشان می‌دهد که در هر دو تقریب یک تراز الکترونی روی سطح فرمی و پیرامون آن قرار دارد با این تفاوت که در تقریب mBJ در راستای  $\Gamma \rightarrow X$  و  $\Gamma \rightarrow M$  سطح فرمی را لمس کرده است و دارای شیب صفر است. بنابراین جرم موثر الکترونی آن بی نهایت است و رفتار نیمه هادی کاملاً تأیید می‌شود. نکته دیگر آنکه ماکزیمم تراز والانس و ظرفیت در تقریب GGA تقریباً در راستای یکسانی در سطح فرمی هستند، اما با اعمال تقریب mBJ این ترازها به سمت انرژی‌های بالاتر شیف‌ت پیدا کردند. فارغ از ترازهایی که روی سطح فرمی افتاده است در تقریب GGA الکترون ولت گاف وجود دارد و در تقریب mBJ این سطوح بدون توجه به سطوحی که از سطح فرمی عبور کرده‌اند به انرژی‌های بالاتر منتقل می‌شوند. اما در پنل (e) تا (h) ساختار نواری نانو تیوب  $WSeS(0,8)$  با دو تقریب مذکور رسم شده است. محاسبات نشان می‌دهد که با اعمال هر دو تقریب



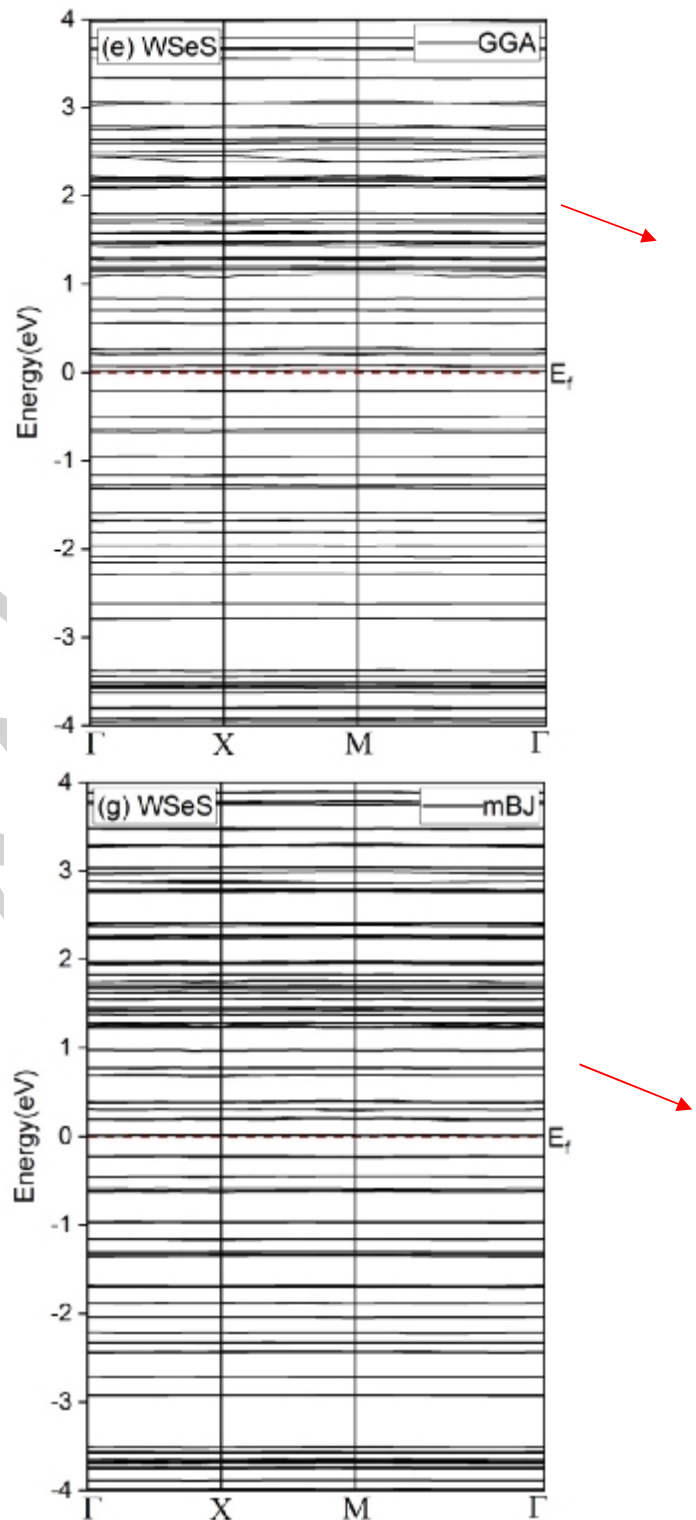
خواص اپتیکی، تابع دی الکتریک<sup>1</sup> آن ماده بررسی می‌شود. در واقع این تابع پاسخ بلور به میدان الکترومغناطیسی است. تابع دی الکتریک یک تابع مختلط به شکل  $\epsilon(\omega) = \epsilon_1(\omega) + i\epsilon_2(\omega)$  با داشتن قسمت موهومی برای تمام فرکانس‌ها، قسمت حقیقی از تبدیلات کرامرز-کرونینگ به دست می‌آید [28, 29]:

$$\text{Re } \epsilon^{-1}(q, \omega) = 1 + P \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\text{Im } \epsilon^{-1}(q, x)}{\rho} \frac{dx}{x - \omega}$$

$$\text{Im } \epsilon^{-1}(q, \omega) = -P \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\text{Re } \epsilon^{-1}(q, x) - 1}{\rho} \frac{dx}{x - \omega}$$

تابع دی الکتریک مختلط  $\epsilon(\omega)$  بیانگر خواص اپتیکی یک ترکیب است و به ساختار نواری الکترونی بلور بستگی دارد. بررسی‌های تابع دی الکتریک با استفاده از طیف نمایی اپتیکی در تعیین ساختار نواری کل بسیار مفید است. این تابع دارای دو سهم گذار درون نواری و بین نواری است. گذار درون نواری ناشی از تحریک پلاسمون‌های حجمی (جذب به وسیله الکترون‌های آزاد) و گذار بین نواری که ناشی از تحریک در لبه‌های جذب است. مقدار تابع دی الکتریک در انرژی‌های بسیار پایین (حدوداً صفر)، تابع دی الکتریک استاتیکی (ثابت دی الکتریک) است.

شکل (5) قسمت حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک ترکیب‌های  $\text{WSe}_2$  و  $\text{WSeS}$  در دو راستای X و Z نشان داده شده است. راستای X در صفحه شبه گرافن قرار دارد و راستای Z عمود بر آن قرار دارد. در پنل (a) مشاهده می‌شوند مقدار استاتیکی قسمت حقیقی در راستای Z بالاتر از X برای نانوتیوب  $\text{WSe}_2$  (0, 8) در انرژی‌های پایین‌تر قابلیت رفتار فلزی برای این ترکیب بالاتر است. با افزایش انرژی شاهد ریزش تابع دی الکتریک در هر دو راستای X و Z هستیم. بنابراین می‌توان گفت که در ناحیه مادون قرمز پایداری اپتیکی پایین است. در ناحیه مرئی و در راستای Z یک قله تیز مشاهده می‌شود. در راستای Z سرعت به سمت مقادیر صفر در لبه ماوراء بنفش حرکت می‌کند، اما راستای X حرکت نزولی کمتری دارد. از  $\epsilon_2$  الکترون ولت به بعد قسمت حقیقی برای هر دو راستا مقادیر صفر یا منفی را نشان می‌دهد، که معرف نوسانات پلاسمونی رفتار فلزی است. در پنل (b) مشاهده می‌شود که با افزوده شدن یک اتم گوگرد به جای



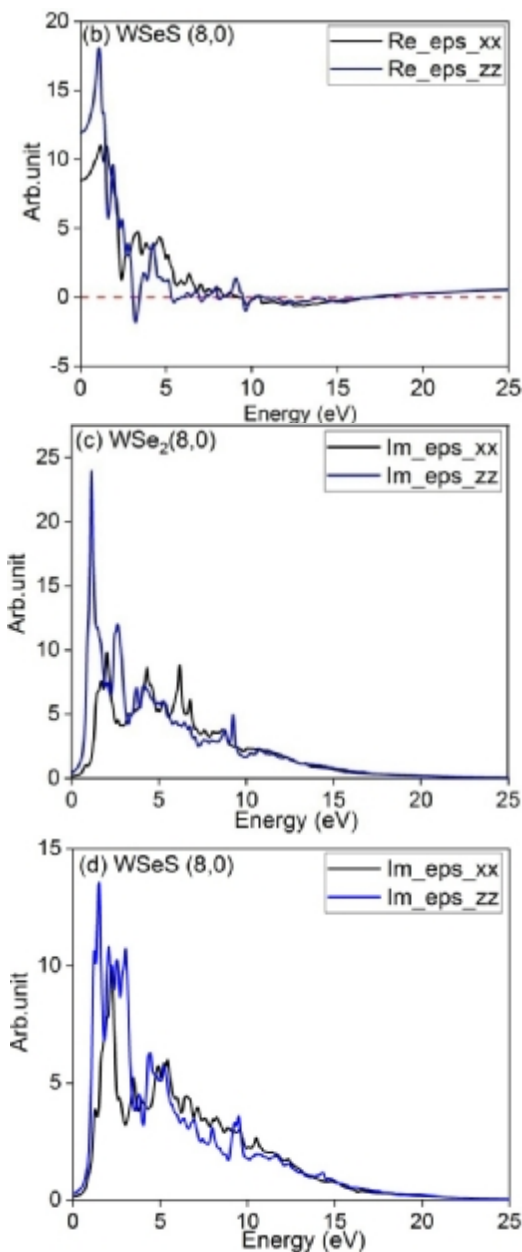
شکل 4. نمودار ساختار نواری (a-d) با تقریب GGA و mBJ (0, 8) و (e, h) نمودار ساختار نواری با تقریب GGA و mBJ برای ترکیب  $\text{WSe}_2$ .  $\text{WSeS}(0)$ .

### اپتیک

به منظور بررسی برهم کنش فوتون با ماده و بدست آوردن

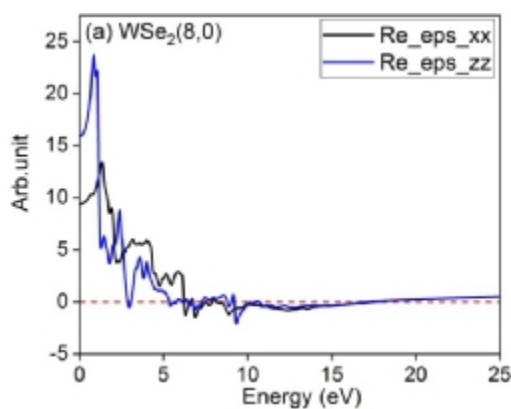
1 Dielectric





شکل 5. (a,b) نمودار بخش حقیقی، در راستای xx و zz برای برای نانوتیوب WSeS(0,8) و WSeS(8,0). (c,d) نمودار بخش موهومی، در راستای xx و zz برای برای نانوتیوب WSeS(0,8) و WSe2(0,8) در شکل (6) پنل (a) منحنی تابع اتلاف انرژی الکترون<sup>4</sup> برای نانوتیوب WSeS(0,8) و WSe2(0,8) رسم شده است. مشاهده می‌شود که در هر دو ترکیب و برای هر دو راستا قله‌های بزرگی در ناحیه 17 تا 18 الکترون ولت وجود دارد. در ناحیه مادون قرمز مقدار تابع اتلاف انرژی الکترون صفر است. و در ناحیه مرئی نیز مقدار تابع اتلاف انرژی الکترون برای هر دو راستا بسیار کم است. این نشان می‌دهد این دو ترکیب برای مقاصد اپتیکی بسیار قابل استفاده و کاربردی می‌تواند باشد چرا که اتلاف انرژی برای آنها در هر دو راستا بسیار کم است.

اتم Se، مقادیر استاتیک قسمت حقیقی در هر دو راستا کاهش پیدا کرده است. با افزایش انرژی فوتون تابیده شده سایر رفتارهای مشابه به حالت قبل است، اما در راستای z در لبه ماوراء بنفش<sup>1</sup> مقدار این تابع با یک قله تیز منفی شده است. از 5 الکترون ولت به بعد نمودار قسمت حقیقی در راستای x و z منفی، صفر یا مقادیر کمتر از صفر است. بنابراین در هر دو پنل می‌توان گفت پایدارترین رفتار در راستای x و بهترین پاسخ دهی در لبه ماوراء بنفش است. در پنل‌های (c) و (d) قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک بر حسب انرژی فوتون تابیده شده رسم شده است. ملاحظه می‌شود که در هر دو نمودار و برای هر دو راستا گاف اپتیکی صفر داریم که کاملاً با نتایج بخش الکترونی همخوانی دارد. در نانوتیوب (8,0) WSe<sub>2</sub> در راستای z دو قله بزرگ و تیز راستای ماوراء بنفش و مادون قرمز<sup>2</sup> مشاهده می‌شود. یک قله کوچکتر در لبه ماوراء بنفش، برای راستای z نیز شاهد سه قله متوالی در لبه مادون قرمز و ناحیه ماوراء بنفش و انرژی 6 الکترون ولت هستیم. این نمودار نشان می‌دهد که اصلی‌ترین گذار الکترونی به گسیل گذاردرون نواری<sup>3</sup> است که در هر دو راستای مادون قرمز و مرئی رخ داده است. در پنل (d) مشاهده می‌کنیم در نانوتیوب WSeS(0,8) نیز قله‌های قسمت موهومی در راستای z بزرگ‌تر از راستای x هستند. اصلی‌ترین قله در راستای z ناحیه مادون قرمز و سه قله دیگر در لبه ماوراء بنفش و مرئی مشاهده می‌شود، و این در حالی است که در راستای x در ناحیه مادون قرمز و دیگر قله‌ها از 4/5 الکترون ولت به بعد رخ می‌دهد مقایسه این دو نمودار نشان می‌دهد با وجود اتم گوگرد این ترکیب ویژگی فلزی آن کاهش یافته است.

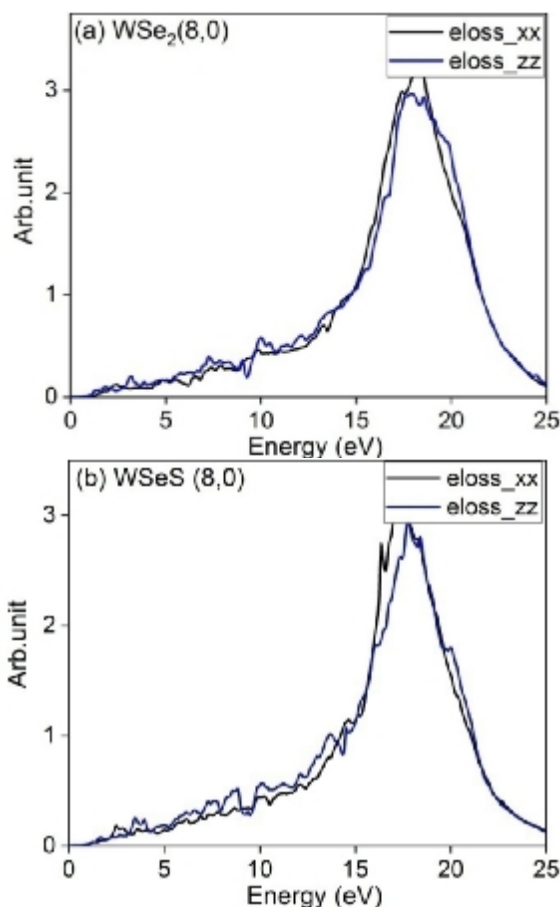
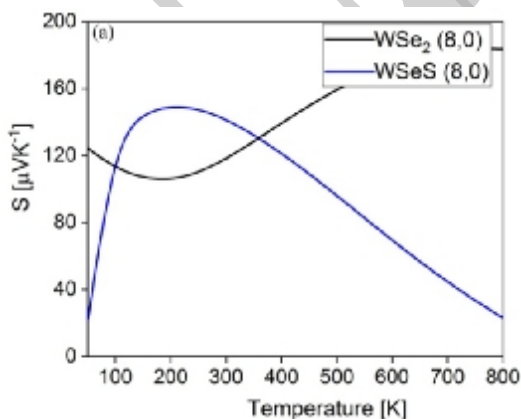


- 1 Ultra Violet (uv)
- 2 Infra Red (IR)
- 3 Intraband

باشد. در پنل (c) رسانندگی گرمایی آنها نشان می‌دهد با توجه به ماهیت نیمه هادی یشان تا محدوده 100 کلوین مقدار این پارامتر صفر است و تا محدوده 280 کلوین مقادیر یکسانی دارند و از آن به بعد مقدار رسانندگی گرمایی ناشی از الکترون‌ها به صورت سهمی افزایش یافته است. به طوری که (0, 8) در هر دمای مشخص بزرگ‌تر و بیشتر است. این دو نمودار نشان می‌دهد از این ترکیب به عنوان سوئیچ‌های گرمایی میتوان استفاده کرد رسانندگی گرمایی این ترکیبات در مقایسه با ترکیبات  $Zr_2TiSi$  قابل مقایسه است.

در پنل (d) پارامتر بی بعد مریت نمایش داده شده است در اینجا هم رفتار این کمیت برای این دو ترکیب کاملاً متفاوت است به طوری که در محدوده 100 تا 400 کلوین مقدار این ضریب برای  $WSeS(0, 8)$  بیشینه خود را تجربه می‌کند و برای  $WSe_2(0, 8)$  مقادیر کمینه خود مقابل کمینه خود را به طوری که ضریب ZT برای  $WSeS(0, 8)$  در 230 کلوین در حدود 0/78 است، که در مقایسه با دیگر ترکیبات [17SrS] مقادیر این ترکیب بر کیفیت ترموالکتریکی بالایی در دمای بالا تجربه می‌کند، اما این ترکیب در دماهای بالا و پایین برای استفاده‌های ترموالکتریکی پیشنهاد نمی‌شود.

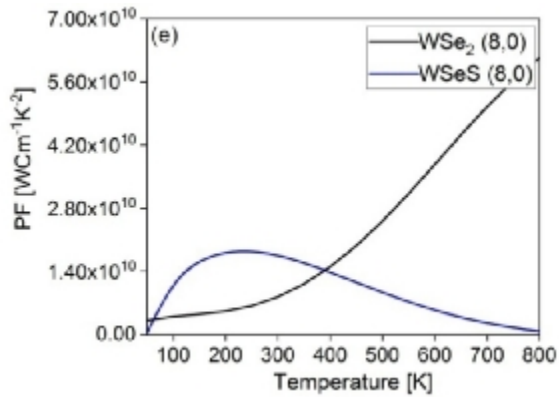
در پنل (e) مقدار پاورفاکتور<sup>1</sup> این دو ترکیب محاسبه شده است. رفتار پاور فاکتور کاملاً دو گانه است به طوری که پاور فاکتور  $WSe_2(0, 8)$  در دماهای بالابیشترین مقدار رسیده است. و ترکیب  $WSeS(0, 8)$  در دمای پایین، اما بزرگی پاورفاکتور (0, 8)  $WSeS$  به مراتب بزرگ از  $WSe_2(0, 8)$  است. این نمودار نشان می‌دهد ترکیب  $WSe_2(0, 8)$  مناسب برای پاورجنریتورها و ترکیب  $WSeS(0, 8)$  مناسب برای کولینگ است.



شکل 6. (a,b) نمودار طیف تابع اتلاف انرژی در راستای xx و zz برای نانوتیوب  $WSe_2(0, 8)$  و  $WSeS(0, 8)$

### ترموالکتریک

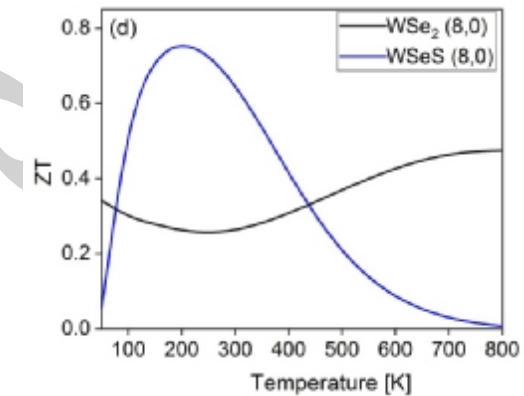
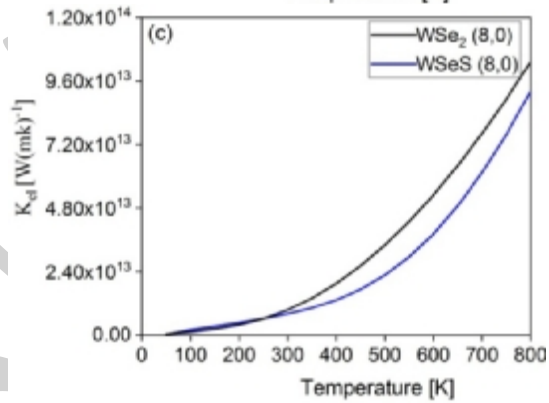
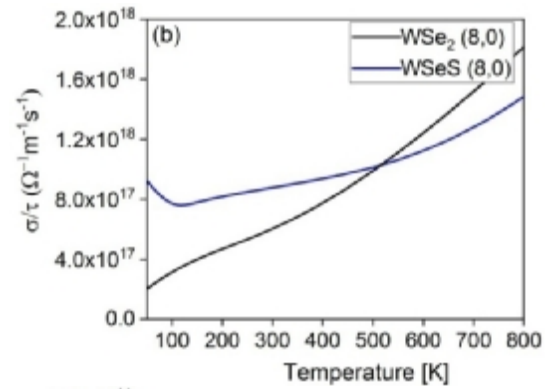
در شکل (7) نمودارهای ترموالکتریک دو نانوتیوب (0, 8)  $WSe_2$  و  $WSeS(0, 8)$  رسم شده است. در پنل (a) ضریب سیبک این دو نانو تیوب رفتارهای کاملاً متفاوتی را از خود نشان می‌دهند به طوری که نانوتیوب  $WSe_2(0, 8)$  در 200 کلوین دارای کمترین مقدار است. با افزایش دما روند صعودی به خود گرفته است، اما نانوتیوب  $WSeS(0, 8)$  در ناحیه 200 تا 300 کلوین بیشترین مقدار را دارد و در دماهای بالاتر از 100 کلوین روند نزولی دارد، اما در دماهای 390 و 110 کلوین در هر دو ترکیب دارای یک ضریب سیبک یکسان هستند. در پنل (b) رسانندگی الکتریکی آنها رسم شده است. در دماهای پایین رسانندگی الکتریکی بسیار ناچیز است با افزایش دما رسانندگی الکتریکی  $WSe_2(0, 8)$  تا دمای 500 کلوین بزرگ‌تر و از 500 کلوین به بعد رسانندگی الکتریکی  $WSeS(0, 8)$  بیشتر است. از مقایسه رسانندگی الکتریکی این ترکیبات با ترکیبات  $Zr_2TiSi$  [30] میزان رسانندگی الکتریکی کمتر است. بنابراین دو نانوتیوب می‌توان گزینه‌های مناسبی برای مقاصد الکتریکی



شکل 7. پارامترهای ترموالکتریک (a) ضریب سیبک (b) ضریب رسانندگی الکتریکی (c) ضریب رسانندگی گرمایی (d) ضریب مریت (e) قدرت توان (PF)

### نتیجه گیری

بر اساس تئوری تابعی چگالی، پایداری مکانیکی، ساختار الکترونیکی، نوری و ترموالکتریک نانولوله‌های  $\text{WSe}_2(0,8)$  و  $\text{WSeS}(0,8)$  مورد بررسی قرار گرفته است. مشتق بالک مدول، پیوندهای کووالانسی را در نانولوله  $\text{WSe}_2(0,8)$  نشان می‌دهد، در حالی که در نانولوله  $\text{WSeS}(0,8)$  تمایل به یونی دارد. چگالی حالتها با تقریب GGA و mBJ نیمه هادی نوع n را با شکاف  $0/2$  الکترون ولت برای نانولوله  $\text{WSe}_2(0,8)$  نشان می‌دهد. با اعمال تقریب mBJ نانولوله  $\text{WSeS}(0,8)$  دارای یک شکاف انرژی بسیار کوچک در حدود صفر است. طیف‌های نوری نشان می‌دهد که پاسخ نوری اصلی آنها در ناحیه مادون قرمز رخ داده است، همچنین شکاف‌های نوری با شکاف‌های الکترونیکی سازگار هستند. در ناحیه فرابنفش، ما ریشه‌های تابع دی الکتریک را می‌بینیم، بنابراین دارای نوسانات پلاسمونی هستند. از طرف دیگر، عملکرد اتلاف انرژی نوری در مناطق مادون قرمز و مرئی حداقل است. نانولوله  $\text{WSeS}(0,8)$  دارای ضریب سیبک بزرگتر در دمای اتاق است. و رقم ضریب شایستگی (ZT) آن در دمای اتاق به بالاتر از  $0/7$  می‌رسد. اما نانولوله  $\text{WSe}_2(0,8)$  دارای ضریب قدرت زیادی در دماهای بالاتر از 500 کلوین است. که نشان می‌دهد ترکیبی مناسب برای کاربردهای مولد برق است.



### References

- [1] Evarestov, R. A., Kovalenko, A. V., & Bandura, A. V. (2020). First-principles study on stability, structural and electronic properties of monolayers and nanotubes based on pure Mo (W) S (Se) 2 and mixed (Janus) Mo (W) SSe dichalcogenides. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, 115, 113681.
- [2] Evarestov, R. A., Kovalenko, A. V., & Bandura, A. V. (2020). First-principles study on stability, structural and electronic properties of monolayers and nanotubes

### منابع

- based on pure Mo (W) S (Se) 2 and mixed (Janus) Mo (W) SSe dichalcogenides. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, 115, 113681.
- [3] Kamaei, S., Saeidi, A., Jazaeri, F., Rassekh, A., Oliva, N., Cavalieri, M., ... & Ionescu, A. M. (2020). An Experimental Study on Mixed-Dimensional 1D-2D van der Waals Single-Walled Carbon Nanotube-WSe<sub>2</sub> Hetero-Junction. *IEEE Electron Device Letters*, 41(4), 645-648.

- [4] Chen, F., Wang, J., Li, B., Yao, C., Bao, H., & Shi, Y. (2014). Nanocasting synthesis of ordered mesoporous crystalline WSe<sub>2</sub> as anode material for Li-ion batteries. *Materials Letters*, 136, 191-194.
- [5] Yu, X. Y., Hu, H., Wang, Y., Chen, H., & Lou, X. W. (2015). Ultrathin MoS<sub>2</sub> nanosheets supported on N-doped carbon nanoboxes with enhanced lithium storage and electrocatalytic properties. *Angewandte Chemie*, 127(25), 7503-7506.
- [6] Kim, Y., Huang, J. L., & Lieber, C. M. (1991). Characterization of nanometer scale wear and oxidation of transition metal dichalcogenide lubricants by atomic force microscopy. *Applied physics letters*, 59(26), 3404-3406.
- [7] Hoseinzadeh, T., Solaymani, S., Kulesza, S., Achour, A., Ghorannevis, Z., Tãlu, Ş., ... & Mozaffari, N. (2018). Microstructure, fractal geometry and dye-sensitized solar cells performance of CdS/TiO<sub>2</sub> nanostructures. *Journal of Electroanalytical Chemistry*, 830, 80-87.
- [8] Sinha, S. S., Yadgarov, L., Aliev, S. B., Feldman, Y., Pinkas, I., Chithaiah, P., ... & Tenne, R. (2021). MoS<sub>2</sub> and WS<sub>2</sub> nanotubes: Synthesis, structural elucidation, and optical characterization. *The Journal of Physical Chemistry C*, 125(11), 6324-6340.
- [9] Achour, A., Arman, A., Islam, M., Zavarian, A. A., Basim Al-Zubaidi, A., & Szade, J. (2017). Synthesis and characterization of porous CaCO<sub>3</sub> micro/nanoparticles. *The European Physical Journal Plus*, 132(6), 267.
- [10] Kong, D., Wang, H., Cha, J. J., Pasta, M., Koski, K. J., Yao, J., & Cui, Y. (2013). Synthesis of MoS<sub>2</sub> and MoSe<sub>2</sub> films with vertically aligned layers. *Nano letters*, 13(3), 1341-1347.
- [11] Roldan, R., López-Sancho, M. P., Guinea, F., Cappelluti, E., Silva-Guillén, J. A., & Ordejón, P. (2014). Momentum dependence of spin-orbit interaction effects in single-layer and multi-layer transition metal dichalcogenides. *2D Materials*, 1(3), 034003.
- [12] Splendiani, A., Sun, L., Zhang, Y., Li, T., Kim, J., Chim, C. Y., ... & Wang, F. (2010). Emerging photoluminescence in monolayer MoS<sub>2</sub>. *Nano letters*, 10(4), 1271-1275.
- [13] Kou, L., Frauenheim, T., & Chen, C. (2013). Nanoscale multilayer transition-metal dichalcogenide heterostructures: band gap modulation by interfacial strain and spontaneous polarization. *The journal of physical chemistry letters*, 4(10), 1730-1736.
- [14] Wu, H. H., Meng, Q., Huang, H., Liu, C. T., & Wang, X. L. (2018). Tuning the indirect-direct band gap transition in the MoS<sub>2</sub>-xSe<sub>x</sub> armchair nanotube by diameter modulation. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 20(5), 3608-3613.
- [15] Dong, J., Hu, H., Li, H., & Ouyang, G. (2021). Spontaneous flexoelectricity and band engineering in MS<sub>2</sub> (M= Mo, W) nanotubes. *Physical Chemistry Chemical Physics*, 23(36), 20574-20582.
- [16] Durairasan, M., Karthik, P. S., Balaji, J., & Rajeshkanna, B. (2021). Enhanced visible light photocatalytic performance of WSe<sub>2</sub>/CNT hybrid photocatalysts that were synthesized by a facile hydrothermal route. *Ionics*, 27(5), 2151-2158.
- [17] AYari, A., Boochani, A., & Rezaee, S. (2021). Electronic, optical, magneto-optical, and thermoelectric properties of the SrS graphene-like under Cr impurity. *Chemical Physics*, 551, 111355.
- [18] Ghadri, A., Boochani, A., Hojabri, A., & Hajakbari, F. (2022). Electronic, optical and thermoelectric properties of WSe<sub>2</sub>-InN 2D interface: A DFT study. *Solid State Communications*, 354, 114889.
- [19] Schwarz, K., Blaha, P., & Madsen, G. K. (2002). Electronic structure calculations of solids using the WIEN2k package for material sciences. *Computer physics communications*, 147(1-2), 71-76.
- [20] Madsen, G. K., Blaha, P., Schwarz, K., Sjöstedt, E., & Nordström, L. (2001). Efficient linearization of the augmented plane-wave method. *Physical Review B*, 64(19), 195134.
- [21] Perdew, J. P., Chevary, J. A., Vosko, S. H., Jackson, K. A., Pederson, M. R., Singh, D. J., & Fiolhais, C. (1992). Atoms, molecules, solids, and surfaces: Applications of the generalized gradient approximation for exchange and correlation. *Physical review B*, 46(11), 6671.
- [22] Perdew, J. P., Burke, K., & Ernzerhof, M. (1996). Generalized gradient approximation made simple. *Physical review letters*, 77(18), 3865.
- [23] Von Barth, U., & Hedin, L. (1972). A local exchange-correlation potential for the spin polarized case. *i. Journal of Physics C: Solid State Physics*, 5(13), 1629.
- [24] Gulans, A., Kontur, S., Meisenbichler, C., Nabok, D., Pavone, P., Rigamonti, S., ... & Draxl, C. (2014). Exciting: a full-potential all-electron package implementing density-functional theory and many-body perturbation theory. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 26(36), 363202.
- [25] Nabok, D., Gulans, A., & Draxl, C. (2016). Accurate all-electron G<sub>0</sub>W<sub>0</sub> quasiparticle energies employing the full-potential augmented plane-wave method. *Physical Review B*, 94(3), 035118.
- [26] Hedin, L. (1965). New method for calculating the one-particle Green's function with application to the electron-gas problem. *Physical Review*, 139(3A), A796.
- [27] Runge, E., & Gross, E. K. (1984). Density-functional theory for time-dependent systems. *Physical review letters*, 52(12), 997.
- [28] Horsley, S. A. R., Artoni, M., & La Rocca, G. C. (2015). Spatial Kramers-Kronig relations and the reflection of waves. *Nature Photonics*, 9(7), 436-439.
- [29] Rezaeadeh, H., Hantehzadeh, M., & Boochani, A. (2022). Surface effect on electronic, Magnetic and optical properties of ptcOBi Half-HeuSler: a dft Study. *Archives of Metallurgy and Materials*, 67(1), 155-166.
- [30] Tizroespli, F., Parhizgar, S. S., Beheshtian, J., & Boochani, A. (2021). Electronic, magnetic and optical properties of Fe-doped nano-BN sheet: DFT study. *Indian Journal of Physics*, 95, 823-831.