Optoelectronic (2025) 7(3): 9-20
DOI: 10.30473/jphys.2024.72177.1211
Received: 18 Aug 2024 Accepted: 29 Oct 2024

Optoelectronic

Open Access

ORIGINAL ARTICLE

Electronic, Optical and Thermoelectric Properties of WSe2(8,0) and WSeS(8,0) Nanotubes

Asghar Ghadri[1], Arash Boochani[2*], Alireza Hojabri[3], Fatemeh Hajakbari[4]

1 Ph.D. Student, Department of Physics, Karaj Branch, Islamic Azad University, Karaj, Iran
2. Associate Professor, Department of Physics, Kermanshah Branch, Islamic Azad University, Kermanshah, Iran.
3 Professor, Department of Physics, Kermanshah Branch, Islamic Azad University, Kermanshah, Iran.
4 Associate Professor, Department of Physics, Kermanshah Branch, Islamic Azad University, Kermanshah, Iran.

Correspondence
Arash Boochani
Email: arash_bch@yahoo.com

How to cite
Ghadri, A. Boochani, A. Hojabri, A. Hajakbari, F. (2025). Electronic, Optical and Thermoelectric Properties of WSe2 (8,0) and WSeS (8,0) Nanotubes, Optoelectronic, 7(3), 17-20.

ABSTRACT
Based on density functional theory calculations, the electronic, optical and thermoelectric properties of WSe2(8,0) and WSeS(8,0) nanotubes have been investigated. The WSe2(8,0) nanotube has 0.2eV energy gap, and this gap is reduced by adding a Se atom to it. The band structure shows that the WSe2(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 have main response to the light in the infrared region 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 the WSeS(8,0) nanotube is larger than WSe2(8,0) one, but at high temperatures, the power factor coefficient of the WSe2(8,0) nanotube is higher, which shows that this case is suitable for power generators.

KEYWORDS
DFT, WSe2(8,0) and WSeS(8,0) Nanotubes, Electronic, Optic, Thermoelectric.

© 2025, by the author(s). Published by Payame Noor University, Tehran, Iran.
This is an open access article under the CC BY 4.0 license (http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/).

سال هفتم، شماره سوم، پیاپی بیستم، بهار 1404 (9-20)
تاریخ دریافت: 1403/06/07 تاریخ پذیرش: 1403/08/08
DOI: 10.30473/jphys.2024.72177.1211

فصلنامه علمی
اپتوالکترونیک

«مقاله پژوهشی»

بررسی خواص الکترونی، اپتیکی و ترموالکتریکی نانو لوله‌های (8، 0) WSe2 و WSeS(0 ،8)

اصغر قادری[1]، آرش بوچانی[2*]، علیرضا هژبری[3]، فاطمه حاج اکبری[4]

1 دانشجوی دکتری، گروه فیزیک، واحد کرج، دانشگاه آزاد اسلامی، کرج، ایران.
2 دانشیار، گروه فیزیک، واحد کرمانشاه، دانشگاه آزاد اسلامی، کرمانشاه، ایران.
3 استاد، گروه فیزیک، واحد کرمانشاه، دانشگاه آزاد اسلامی، کرمانشاه، ایران.
4 دانشیار، گروه فیزیک، واحد کرمانشاه، دانشگاه آزاد اسلامی، کرمانشاه، ایران.

نویسنده مسئول:
آرش بوچانی
رایانامه: arash_bch@yahoo.com

چکیده

بر اساس محاسبات تئوری تابعی چگالی، خواص الکترونیکی، نوری و ترموالکتریک نانولوله‌های (8، 0) WSe_2 و (8، 0)WSeS بررسی شده‌اند. نانولوله (8، 0) WSe_2 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 (8، 0) WSe_2 نیمه هادی نوع p و ترکیب (8، 0)WSeS 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 (8، 0)WSeS بزرگ‌تر از (8، 0) WSe_2 است، اما در دماهای بالا ضریب توان نانولوله (8، 0) WSe_2 بیشتر است، که نشان می‌دهد این مورد برای ژنراتورهای برق مناسب است.

واژه‌های کلیدی

نظریه تابعی چگالی، نانو لوله (8، 0) WSe2و (8، 0)WSeS، الکترونیک، اپتیک، ترموالکتریک.

استناد به این مقاله:
اصغر قادری، آرش بوچانی، علیرضا هژبری، فاطمه حاج اکبری (1403). بررسی خواص الکترونی، اپتیکی و ترموالکتریکی نانو لوله‌های (8، 0) WSe2 و (8، 0)WSeS. فصلنامه علمی اپتوالکترونیک، 7(3)، 17-20.

https://jphys.journals.pnu.ac.ir

مقدمه

از زمان کشف گرافن[1]، مواد دو بعدی و یک بعدی به دلیل خواص منحصر به فردشان توجه روزافزونی را به خود جلب کرده‌اند. در سال‌های گذشته مواد دوبعدی به‌دلیل استفاده بالقوه آن‌ها در دستگاه‌های الکترونیکی و نوری جدید مانند، ترانزیستورهای اثر میدان تونل‌زنی در مقیاس نانو[2] TEFT، دیودها، آشکارسازهای عکس، به 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 مناسی برای کاربردهای صنعتی ساخته است. علاوه بر گاف نواری مستقیم آن‌ها، به‌دلیل تقارن وارونگی در آن‌ها، الکترون‌ها در این ساختار کریستالی دارای درجه آزادی زیادی هستند، که در بحث دره‌های الکترونیکی[3] 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 تک لایه‌های TMDC[4] را به نسل جدیدی تبدیل می‌کند به‌طوری که نانو مواد TMDC مانند دیسولفیدتنگستن WS_2، دی‌سلنیدتنگستن [$4WSe_2$]، دیسولفیدمولیبدن MoS_2 [5] و دیسلنیدمولیبدن $MoSe_2$ به عنوان یک نسل نانومواد فوتونی جدید در حال ظهور است [9]، که به‌دلیل خاصیت نوری، کاتالیزوری، الکترونیکی و روان کننده [6-8] آن‌ها منجر به تولید دستگاه هایی نظیرسوئیچ کننده، محدود کننده نوری، تابشگر، آشکارساز، دیود وترانزیستور با کارایی بالا شده‌اند [14-10]. در سال‌های اخیر چندین کار در مورد مطالعه نانولایه‌های دی‌کالکوژنید مولیبدن و تنگستن و نانولوله‌های مربوطه بر اساس MXY(M=Mo, W; X, Y=S, Se) [15] 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 ترموالکتریک در گرادیان حرارتی از طریق انتشار حامل‌های بار، گرما را به جریان الکتریکی تبدیل می‌کنند (الکترون‌ها و حفره‌ها)؛ بنابراین سیستم‌های قدرت ترموالکتریک 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 ترموالکتریک بسیار کارآمد دست پیدا کنیم. این مواد نه تنها برای تولید گرما بلکه به عنوان سردکننده‌های ترموالکتریک مبتنی بر پلیتر نیز استفاده می‌شود. ضریب سیبک یک ماده ولتاژ بزرگ‌تر موالکتریکی القایی است که به دما و ساختار کریستال بستگی دارد. علامت ضریب سیبک بیانگر نوع حامل‌های بار در ترابرد الکتریکی است. در نیمه هادی نوع n که حاملان بار الکترون هستند، ضریب سیبک منفی و در نیمه هادی نوع p که حاملان بار حفره‌ها هستند، ضریب سیبک مثبت است. ضریب سیبک بزرگ نشان می‌دهدکه یک اختلاف دمای کوچک، ولتاژ بزرگی را در دو طرف ماده به‌وجود می‌آورد. بنابراین برای یک ماده ترموالکتریک، ضریب سیبک بزرگ ضروری است. کارآیی ترموالکتریکی مواد از طریق محاسبه شاخص بدون بعد مریت (ZT)[5] قابل اندازه‌گیری است که می‌توان با استفاده از فرمول زیر آن را محاسبه کرد.

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

که در آن T دمای مطلق، S ضریب سیبک، σ 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، ترموالکتریکی شبه گرافن WSe_2 و WSeS بر پایه نظریه تابع چگالی با روش امواج تخت بهبو یافته با پتانسیل کامل [19] با استفاده از کدهای محاسباتی [$Wien_2k$20–24 Boltztrap] محاسبه شده است. در نوع محاسبه پتانسیل تبادلی همبستگی از تقریب GGA[6] و mBJ[7] [25] استفاده کردیم. همچنین در بخش اپتیکی از تقریب‌های RPA استفاده شده است [26، 27]. برای محاسبات ساختاری و الکترونی $L_{max}=10$ $R_{Kmax}=7$. 0,Kpoint=100, WSe_2, WSeS با استفاده از دستور mini position با دقت fc 0.01 نیروی وارد

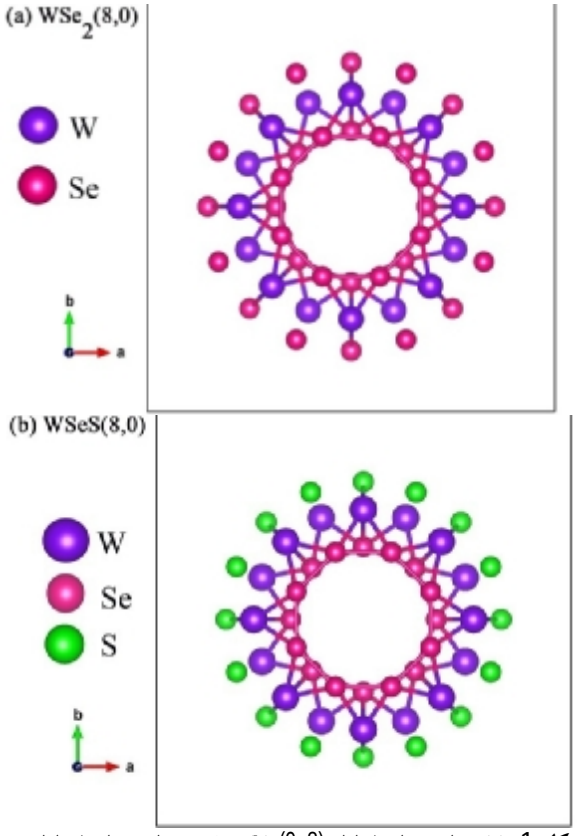
1 Graphene
2 Tunneling Field-Effect Transistors
3 Valleytronics
4 Transition Metal Dichalcogenides

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

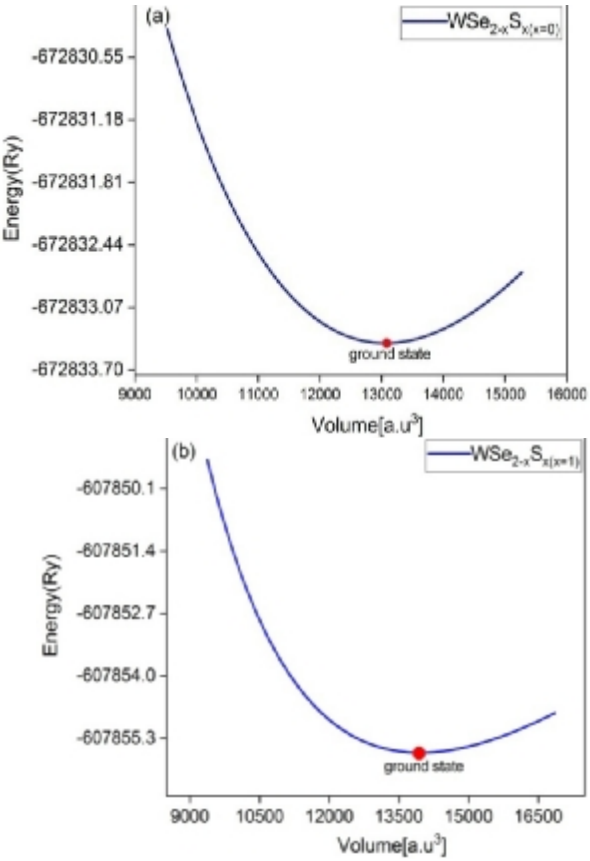
بر اتم‌ها را ریلکس کردیم. با استفاده از خروجی‌های Wien2k محاسبه ترموالکتریکی با استفاده از کد BoltzTraP محاسبه شده است.

نتایج و بحث‌ها

شکل (1) ساختار نانوتیوب‌های (8، 0) WSe_2 و (8، 0)WSeS را در پنل‌های (a) و (b) نشان می‌دهد. این نانوتیوب‌ها به‌صورت زیگزاگ در نظر گرفته شده است. سطح مقطع در نانوتیوب (8، 0) WSe_2 شاهد سه دایره متعد مرکز است 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 نانوتیوب (8، 0)WSeS تکرار شده است. اتم‌های لایه بیرونی اتم S است؛ بنابراین انتظار می‌رود با حضور الکترون‌های آزاد در سطح نانوتیوب 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. ملاحضه می‌شود که برای هر دو ترکیب، منحنی تغییرات انرژی کل سلول بر حسب تغییرات حجم دارای نقطه تعادلی و حجم تعادلی است. بنابراین این ترکیبات از لحاظ پایداری، پایدار هستند، اما انرژی‌های بر حسب حجم آن‌ها با یکدیگر تفاوت‌هایی دارند. تفاوت در قوس منحنی‌هاست؛ به طوری که قوس منحنی در ترکیب WSe_2 تندتر و قوس منحنی در ترکیب WSeSکمتر است. همین امر موجب بزرگی حجم تعادلی (8، 0) WSe_2 کمتر است، همچنین انتظار داریم بالک مدول و سختی بلور در اینجا بیشتر باشد، با نگاهی به جدول (1) این نکته کاملا تایید شده است. بالک مدول نانوتیوب WSe_2 بزرگ‌تر از بالک مدول WSeS است. در جدول (1) حجم تعادلی و ثابت‌های شبکه لیست شده است. نکته دیگری که در جدول (1) باید به آن توجه کرد مشتق بالک مدول است، مشتق بالک مدول نانوتیوب (8، 0) WSe_2 نشان می‌دهد که نوع پیوندها در این ترکیب کوالانسی، اما در نانوتیوب (8، 0)WSeS به سمت یونی بودن میل می‌کند. ممان مغناطیسی این ترکیب نیز که در جدول (1) ملاحضه 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، 0) WSe_2 (b) سطح مقطع نانو لوله WSeS(8، 0)



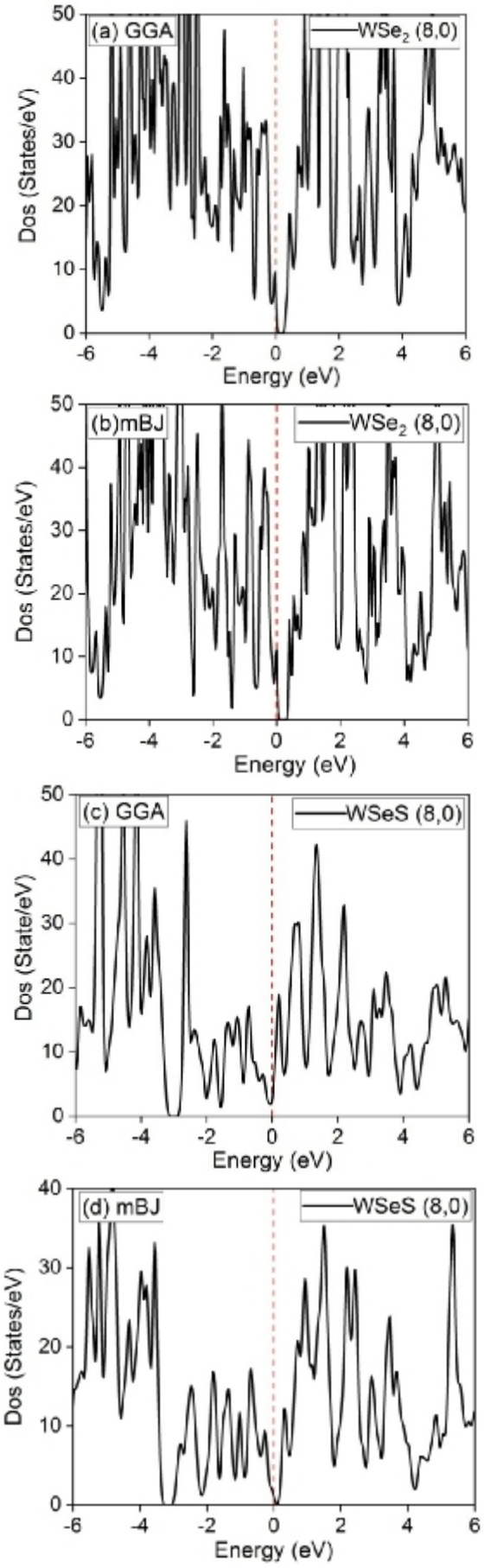
شکل 2. (a) نمودار انرژی بر حسب حجم نانوتیوب (8، 0) WSe_2 (b) نمودار انرژی بر حسب حجم نانوتیوب (8، 0)WSeS

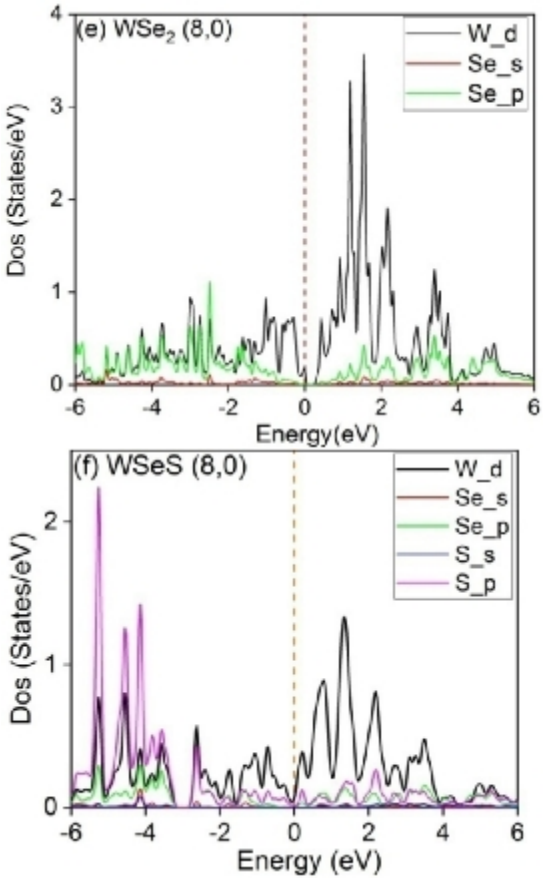
جدول 1. ثابت شبکه، حجم تعادلی، بالک مدول، مشتق بالک مدول، انرژی تعادلی، ممان مغناطیسی ترکیب WSe_2 و WSeS

parameter	WSe_2	WSeS
a(bohr)	34. 0150	34. 0150
c(bohr)	10. 8898	10. 8898
]Volume[a. u^3	13063. 4381	13960. 7996
B(Gpa)	67. 2403	56. 4174
B’	2. 4492	4. 2610
Energy(Ry)	-672833. 42988	-607855. 6010
M_{tot}	0. 0	0. 0

بخش الکترونی

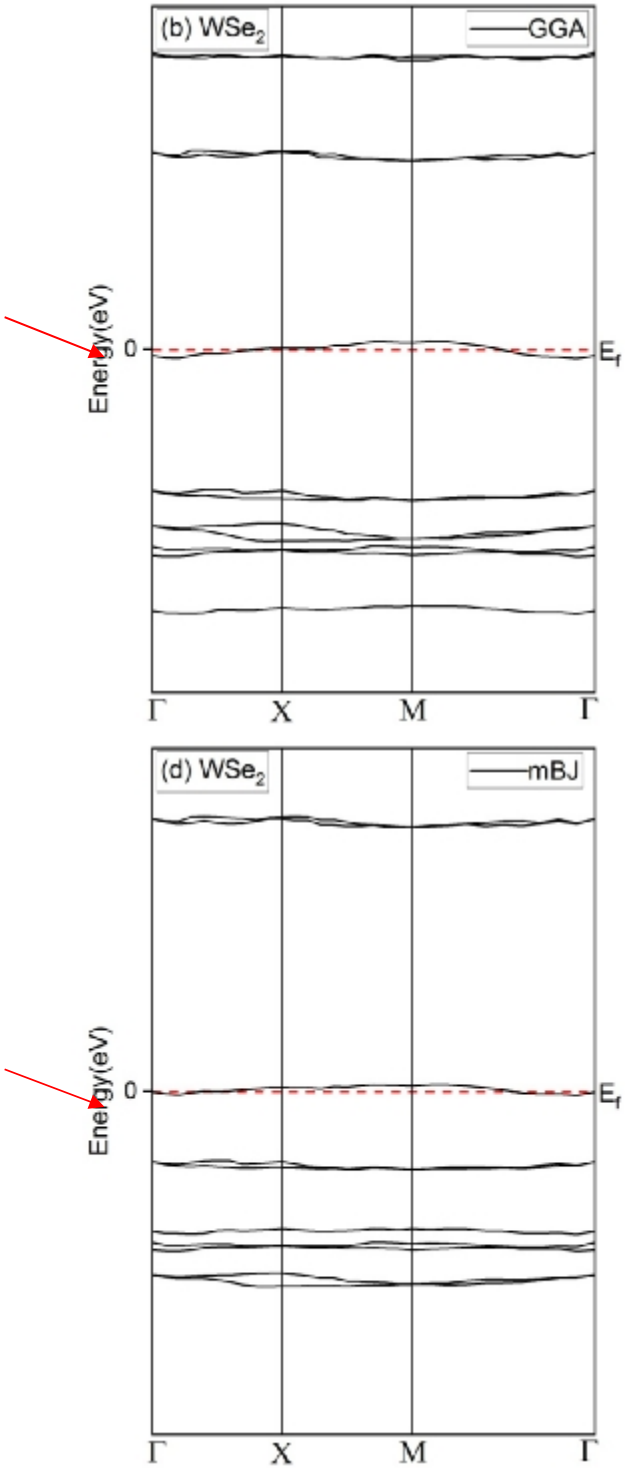
در شکل‌های (3) منحنی‌های چگالی حالات الکترونی کل و جز با دو تقریب GGA و mBJ و برای این دو نانوتیوب رسم شده است. در پنل (a) و (b) برای نانوتیوب (8، 0) WSe_2 دو تقریب GGA و mBJ نشان می‌دهد که این ترتیب یک نیمه هادی نوع n با گاف 0/2 الکترون ولت است. نکته قابل توجه آن است که با تغییر تقریب‌ها گاف نواری تغییر 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 کاملا پیوسته و با احتمال حالات بزرگ مشاهده می‌شود. به خوبی می‌تواند رسانندگی‌های الکترونیکی و گرمایش جریان بسیاری 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 که در زیر سطح فرمی شاهد یک گاف در محدوده 3/5- الکترون ولت باشیم. همچنین مقدار چگالی حالات نسبت به نانوتیوب (8، 0) WSe_2 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 درمی‌یابیم که نوع پیوندها در نانوتیوب (8، 0) WSe_2 از نوع p-d است. در نانوتیوب (8، 0) WSe_2 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 نانوتیوب 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.

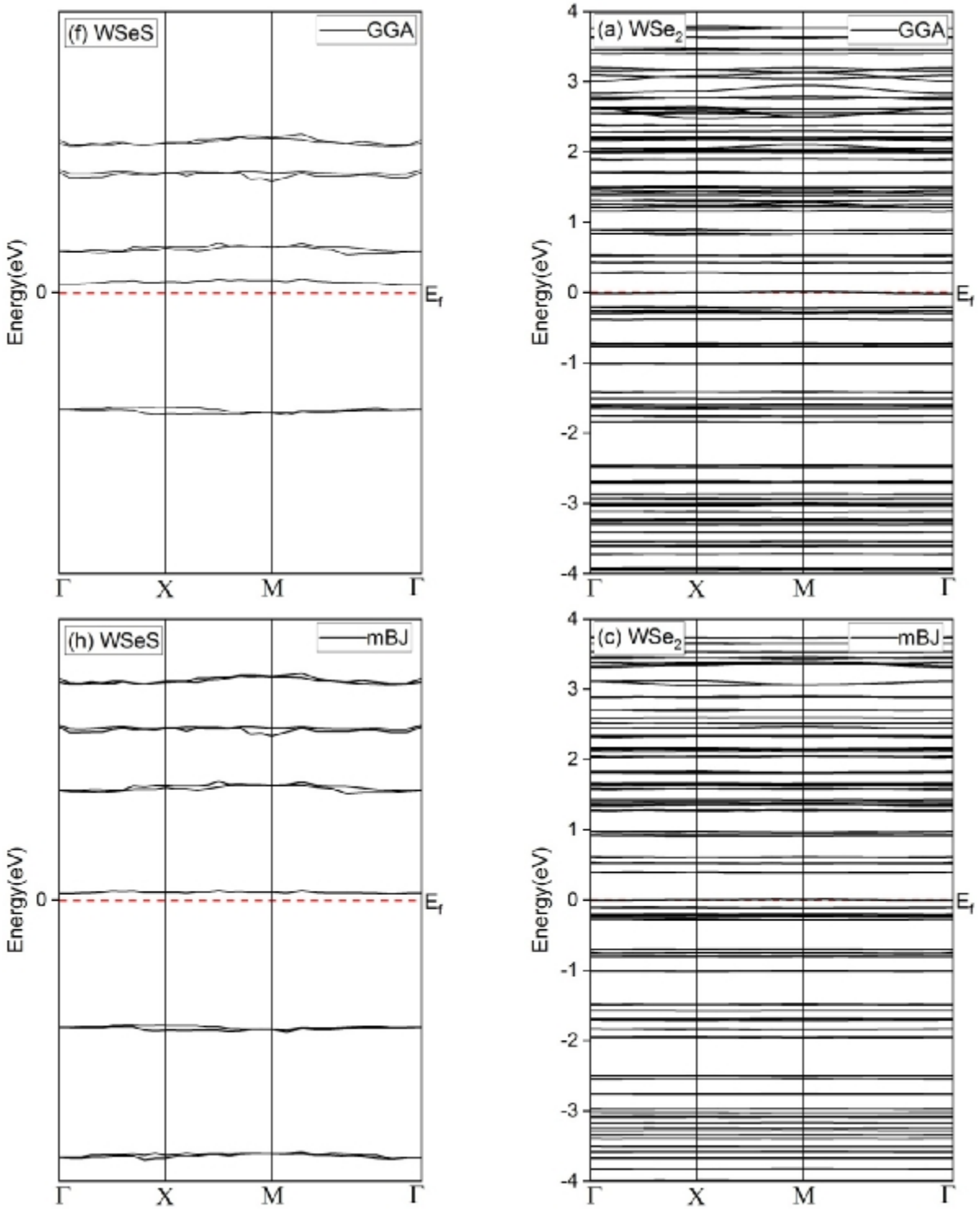




شکل 3. (a-d)چگالی حالات با تقریب GGA و mBJ WSe_2 (8، 0) و WSeS (8،). (e, f) چگالی حالات جزئی WSe_2 (8، 0) و WSeS(8، 0).

در شکل (4) نمودار ساختار نواری نانوتیوب WSe_2 (8، 0) و WSeS(0 ،8) با دو تقریب GGA و mBJ رسم شده است. در پنل (a) و (b) ساختار نواری WSe_2 (8، 0) با دو تقریب مذکور در راستای تقارنی Γ→X و Γ→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 Γ→X و Γ→M سطح فرمی را لمس کرده است و دارای شیب صفر است. بنابراین جرم موثر الکترونی آن بی‌نهایت است و رفتار نیمه هادی کاملاً تایید 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 GGA0/0 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 نانوتیوب WSeS(0 ،8) با دو تقریب مذکور رسم شده است. محاسبات نشان می‌دهد که با اعمال هر دو تقریب، 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 گزینهٔ مناسب برای کاربردهای ترموالکتریکی و فوتونی می‌کند.




(f) WSeS
GGA
(a) WSe2
GGA
(h) WSeS
mBJ
(c) WSe2
mBJ
Energy(eV)
E_f
Γ
X
M
Γ

اپتیک

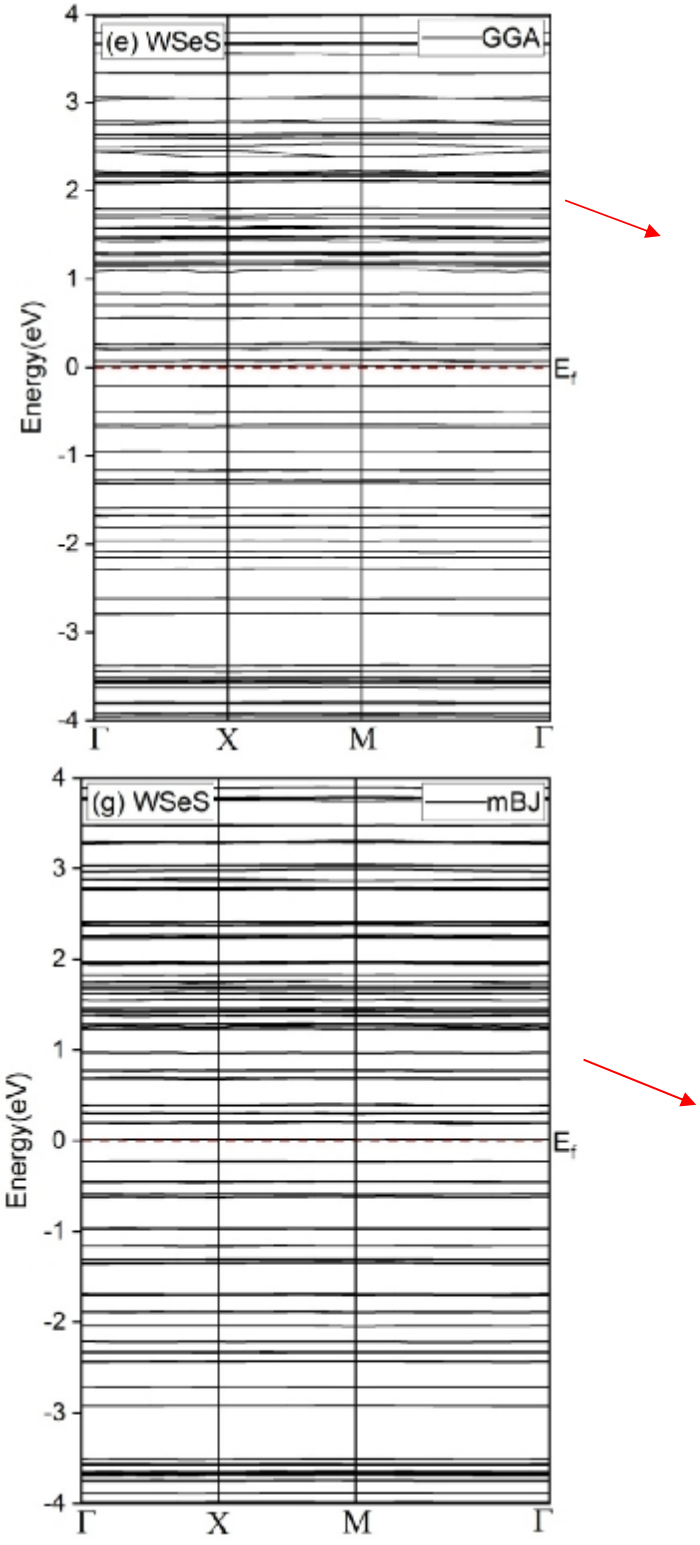
به‌منظور بررسی برهم‌کنش فوتون با ماده و به‌دست آوردن خواص اپتیکی، تابع دی‌الکتریک[1] آن ماده بررسی می‌شود. در واقع این تابع پاسخ بلور به میدان الکترومغناطیسی است. تابع دی‌الکتریک یک تابع مختلط به شکل $\varepsilon(\omega)=\varepsilon_1(\omega)+i\varepsilon_2(\omega)$ است. با داشتن قسمت موهومی برای تمام فرکانس‌ها، قسمت حقیقی از تبدیلات کرامرز - کرونیگ به‌دست می‌آید [28، 29]:

$$\mathrm{Re}\,\varepsilon^{-1}(q,\omega)=1+\frac{2}{\pi}P\int_{0}^{+\infty}\frac{\mathrm{Im}\,\varepsilon^{-1}(q,x)}{x^2-\omega^2}\,dx\,,$$

$$\mathrm{Im}\,\varepsilon^{-1}(q,\omega)=-\frac{2\omega}{\pi}P\int_{0}^{+\infty}\frac{\mathrm{Re}\,\varepsilon^{-1}(q,x)-1}{x^2-\omega^2}\,dx\,,$$

تابع دی‌الکتریک مختلط $\varepsilon(\omega)$، بیانگر خواص اپتیکی یک ترکیب است و به ساختار نواری الکترونی بلور بستگی دارد. بررسی‌های تابع دی‌الکتریک 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 به‌وسیلهٔ الکترون‌های آزاد) و گذار بین نواری که ناشی از تحریک در لبه‌های جذب است. مقدار تابع دی‌الکتریک در انرژی‌های بسیار پایین (حدودا صفر)، تابع دی‌الکتریک استاتیک (ثابت دی‌الکتریک) است.

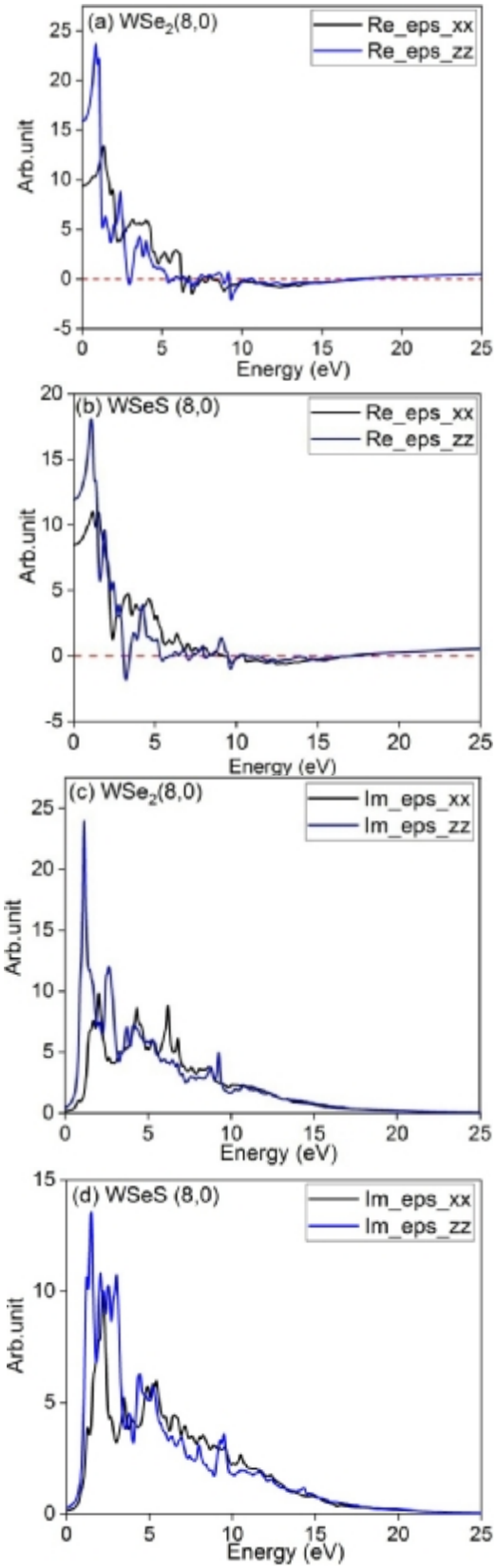
شکل (5) قسمت حقیقی و موهومی تابع دی‌الکتریک ترکیب‌های WSe_2 و WSeS در دو راستای X و Z نشان داده شده است. راستای x در صفحه شبه گرافن قرار دارد و راستای z عمود بر آن قرار دارد. در پنل (a) مشاهده می‌شوند که مقدار استاتیک قسمت حقیقی در راستای z بالاتر از x است. برای نانوتیوب (8، 0) WSe_2 در انرژی‌های پایین‌تر قابلیت رفتار فلزی برای این ترکیب بالاتر است. با افزایش انرژی، شاهد ریزش تابع دی‌الکتریک 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 6 الکترون ولت به بعد قسمت



شکل 4. نمودار ساختار نواری (a-d) با تقریب GGA و mBJ (8، 0) WSe_2. (e, h) نمودار ساختار نواری با تقریب GGA و mBJ برای ترکیب (8، 0) WSeS.

1 Dielectric

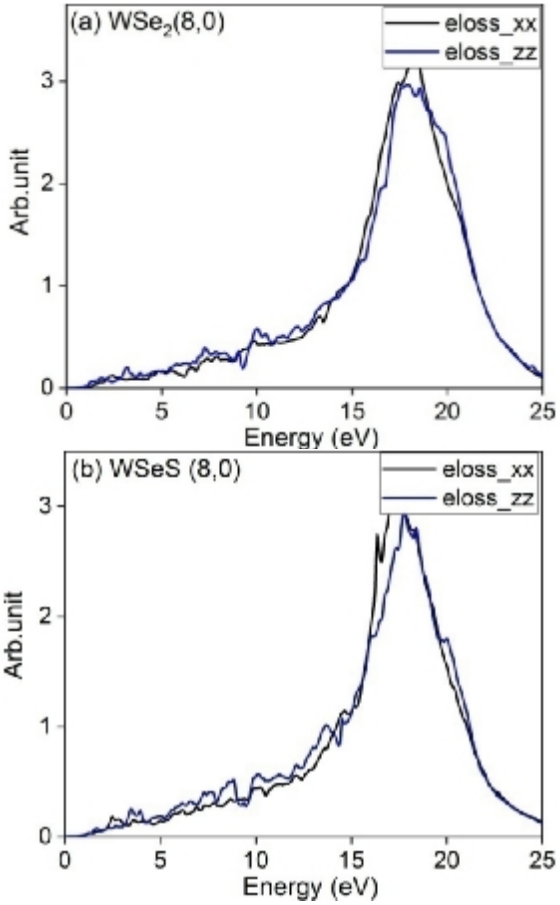
حقیقی برای هر دو راستا مقادیر صفر یا منفی را نشان می‌دهد، که معرف نوسانات پلاسمونی رفتار فلزی است. در پنل (b) مشاهده می‌شود که با افزوده شدن یک اتم گوگرد به جای اتم Se، مقادیر استاتیک قسمت حقیقی در هر دو راستا کاهش پیدا کرده است. با افزایش انرژی فوتون تابیده شده، سایر رفتارهای مشابه به حالت قبل است، اما در راستای z در لبه ماوراء بنفش[1] 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 که پایدارترین رفتار در راستای x و بهترین پاسخ‌دهی در لبه ماوراء بنفش است. در پنل‌های (c) و (d) قسمت موهومی تابع دی‌الکتریک بر حسب انرژی فوتون تابیده شده، رسم شده است. ملاحضه 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 WSe_2 (8،0) در راستای z دو قله بزرگ و تیز راستای ماوراء بنفش و مادون قرمز[2] 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 گذار درون نواری[3] 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 که با وجود اتم گوگرد این ترکیب ویژگی فلزی آن کاهش یافته است.



شکل 5. (a,b)نمودار بخش حقیقی، در راستایxx و zz برای برای نانوتیوب (8، 0) WSe_2و (8، 0)WSeS . (c,d) نمودار بخش موهومی ، در راستایxx و zz برای برای نانوتیوب (8، 0) WSe_2و (8، 0)WSeS

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

در شکل (6) پنل (a) منحنی تابع اتلاف انرژی الکترون[1] برای نانوتیوب (8، 0) WSe_2 و (8، 0)WSeS رسم شده است. مشاهده می‌شود که در هر دو ترکیب و برای هر دو راستا قله‌های بزرگی در ناحیه 17 تا 18الکترون 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.



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

ترموالکتریک

در شکل (7) نمودارهای ترموالکتریک دو نانوتیوب (8، 0) WSe_2 و (8، 0)WSeS رسم شده است. در پنل (a) ضریب سیبک این دو نانوتیوب رفتارهای کاملاً متفاوتی را از خود نشان می‌دهند به‌طوری که نانوتیوب (8، 0) WSe_2 در 200 کلوین دارای کمترین مقدار است. با افزایش دما روند صعودی به خود گرفته است، اما نانوتیوب (8، 0)WSeS 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 (8، 0) WSe_2 تا دمای 500 کلوین بزرگ‌تر و از 500 کلوین به بعد رسانندگی الکتریکی (8، 0)WSeS بیشتر است. از مقایسه رسانندگی الکتریکی این ترکیبات با ترکیبات Zr_2TiSi [30] میزان رسانندگی الکتریکی کمتر است. بنابراین دو نانوتیوب می‌تواند گزینه‌های مناسبی برای مقاصد الکتریکی باشد. در پنل (c) رسانندگی گرمایی آن‌ها نشان می‌دهد که با توجه به ماهیت نیمه هادی‌شان 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 به‌صورت سهمی افزایش یافته است. به طوری که (8، 0) WSe_2 در هر دمای مشخص بزرگ‌تر و بیشتر است. این دو نمودار نشان می‌دهد که از این ترکیب به عنوان سوئیچ‌های گرمایی می‌توان استفاده کرد. رسانندگی گرمایی این ترکیبات در مقایسه با ترکیبات Zr_2TiSi قابل مقایسه است.

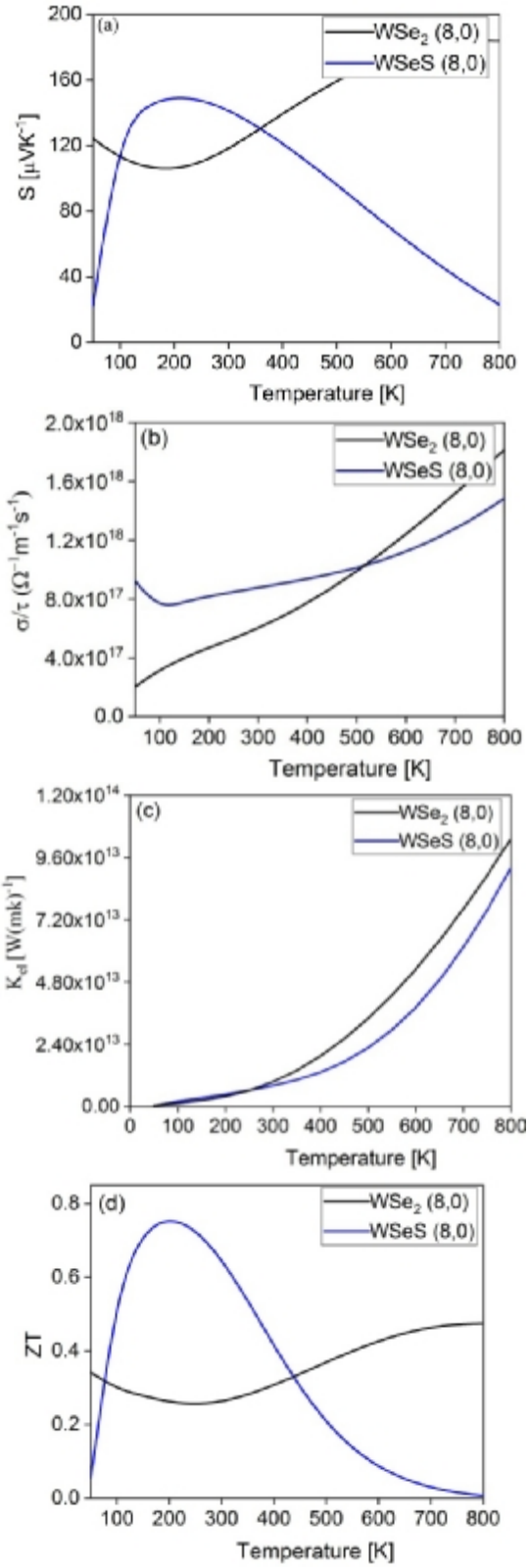
در پنل (d) پارامتر بی‌بعد مریت نمایش داده شده است در اینجا هم رفتار این کمیت برای این دو ترکیب کاملا متفاوت است به‌طوری که در محدوده 100 تا 400 کلوین مقدار این ضریب برای (8، 0)WSeS بیشینه خود و برای (8، 0) WSe_2 مقادیر کمینه خود مقابل کمینه را تجربه می‌کند؛ به طوری‌که ضریب ZT برای (8، 0)WSeS در 230 کلوین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

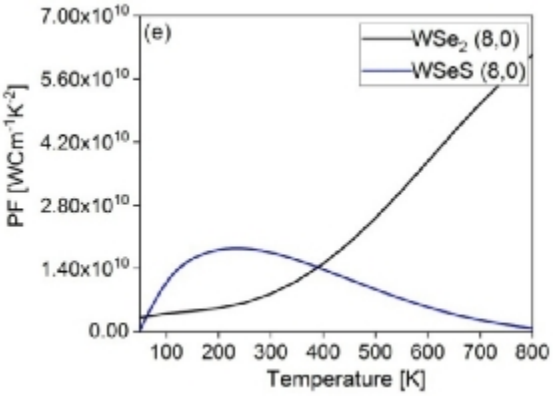
در پنل (e) مقدار پاورفاکتور[2] این دو ترکیب محاسبه شده است. رفتار پاورفاکتور کاملا دوگانه است به‌طوری که پاور فاکتور (8، 0) WSe_2 در دماهای بالا به بیشترین مقدار رسیده است و ترکیب (8، 0) WSeS در دمای پایین، اما بزرگی پاورفاکتور (8، 0) WSeS به مراتب بزرگ‌تر از (8، 0) WSe_2 است. این نمودار نشان می‌دهد که ترکیب (8، 0) WSe_2 مناسب برای پاورجنریتورها و ترکیب (8، 0)WSeS مناسب برای کولینگ

1 Eloss

2 Power Factor

است.





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

نتیجه‌گیری

در این مقاله، بر اساس تئوری تابعی چگالی، پایداری مکانیکی، ساختار الکترونیکی، نوری و ترموالکتریک نانولوله‌های (8، 0) WSe_2 و (8، 0)WSeS بررسی شده است. مشتق بالک مدول، پیوندهای کووالانسی را در نانولوله (8، 0) WSe_2 نشان می‌دهد که در حالی که در نانولوله (8، 0)WSeS تمایل به یونی دارد، چگالی حالت‌ها با تقریب GGA و mBJ نیمه هادی نوع n را با شکاف 0/2 الکترون ولت برای نانولوله (8، 0) WSe_2نشان می‌دهد. با اعمال تقریب mBJ، نانولوله (8، 0)WSeS 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 دی‌الکتریک را می‌بینیم؛ بنابراین دارای نوسانات پلاسمونی هستند. از طرف دیگر، عملکرد اتلاف انرژی نوری در مناطق مادون قرمز و مرئی حداقل است. نانولوله (8، 0)WSeS 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 (8، 0) WSe_2 دارای ضریب قدرت زیادی در دماهای بالاتر از 500 کلوین است. که نشان می‌دهد ترکیبی مناسب برای کاربردهای مولد برق است.

منابع

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

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-*

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 2 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 WSe2 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 MoS2 nanosheets supported on N-doped carbon nanoboxes with enhanced lithium storage and electrocatalytic properties. *AngewandteChemie*, 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., Ghoranneviss, Z., Ţălu, Ş., ... &Mozaffari, N. (2018). Microstructure, fractal geometry and dye-sensitized solar cells performance of CdS/TiO2 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). MoS2 and WS2 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 CaCO3 micro/nano-particles. *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 MoS2 and MoSe2 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 MoS2. 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 2− x Se x 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 2 (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 WSe2/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 WSe2–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 0 W 0 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] Rezazadeh, 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] Tizroespeli, 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.