

ORIGINAL ARTICLE

Studying the effects of changing width and temperature on the thermoelectric properties of two-dimensional dichalcogen nanoribbon structures MoS₂/WTe₂

A B S T R A C T

In this study, using the tight-binding approximation and the recursive Green's function, the effect of changing the nanoribbon width and temperature on the thermoelectric properties of the MoS₂ and WTe₂ based system was investigated in a preferred configuration. Thermoelectric properties such as electrical conductivity, thermoelectric power or Seebeck coefficient, thermal conductivity, efficiency coefficient were calculated. The effect of the width of the nanoribbons and temperature in this configuration on the thermoelectric properties was investigated. The results show that greater thickness creates the most desirable thermoelectric properties.

K E Y W O R D S

Nanoribbons of Molybdenum Disulfide, Nanoribbons of Tungsten Ditelluride, Thermoelectric Properties, Seebeck Coefficient, Electrical and Thermal Conductivity, Efficiency Coefficient.

How to cite

Last Name, J. (of all Author) (2023).

Subject (Times New Roman

8). Optoelectronic, 6(2), 25-44.

نشریه علمی

اپتوالکترونیک

«مقاله پژوهشی»

بررسی اثرات تغییر عرض و دما روی خواص ترموالکتریکی ساختارهای دی کالکوژن دوبعدی نانو نوار $\text{MoS}_2/\text{WTe}_2$

چکیده

در این پژوهش با استفاده از تقریب بستگی قوی و تابع گرین بازگشتی، اثر تغییر عرض نانو نوار و دما را روی خواص ترموالکتریکی سیستم مبتنی نانونوارهای نامتجانس برمولیبیدن دی-سولفاید و تنگستن دی تلوراید را در پیکربندی ارجح بررسی شد. کانال و دو الکترون نیمه بینهایت توسط نانونوارها به صورت دولایه در نظر گرفته شده است. خواص ترموالکتریکی نظیر رسانش الکتریکی، توان ترموالکتریک (ضریب سیبک)، رسانندگی گرمایی، ضریب بهینگی محاسبه شد. اثر عرض نانو نوارها و دما در این پیکربندی روی خواص ترموالکتریکی مورد بررسی قرار گرفت. نتایج نشان می‌دهد ضخامت بیشتر، مطلوبترین خواص ترموالکتریکی را ایجاد می‌کند.

واژه‌های کلیدی

نانونوار مولیبیدن دی سولفاید و تنگستن دی تلوراید، خواص ترموالکتریکی

مقدمه:

مطالعات تجربی و نظری زیادی بر روی خواص مواد دوبعدی انجام شده است. تاکنون، مقالات مروری زیادی در مورد خواص فیزیکی و الکترونیکی و پیشرفت در تکنیک‌های سنتز و کاربردهای آنها در الکترونیک، اپتوالکترونیک، تبدیل انرژی و همچنین ذخیره‌سازی گاز منتشر شده است [۹-۱۴].

یکی از این مواد مولیبدن‌دی‌سولفاید می‌باشد. پس از کشف این ماده با فرمول شیمیایی MoS_2 برای اولین بار، بررسی‌های بسیار زیادی در سایر علوم انجام شد. این ساختار به دلیل خواص منحصر به فرد مکانیکی و الکترونیکی که از خود نشان داده‌است، جایگزین مناسبی برای صفحات گرافن و نانولوله‌های کربنی در قطعات الکترونیکی می‌باشد. نتایج بررسی‌ها نشان می‌دهد که بازدهی ایده‌آل، در ترانزیستورها (ترانزیستورهای اثر میدانی مبتنی بر نیم‌رساناهای دو بعدی) به خواص ساختاری و هندسی مولیبدن‌دی‌سولفاید وابسته است [۱۸-۱۵].

بر این اساس می‌توان از مولیبدن‌دی‌سولفاید یا همان ساختارهای مبتنی بر دی‌کالکوژن‌ها به عنوان یک جایگزین مناسب استفاده کرد. از آنجایی که ترانزیستورهای مبتنی بر دی‌کالکوژن‌ها مشکلات کمتری نسبت به نمونه‌های قدیمی ترانزیستورهای اثر میدانی دارند و همچنین حساسیت کمتری نسبت به نوبه دارند می‌تواند در طراحی ادوات الکترونیکی مفید باشند. در یک پژوهش ترانزیستور اثر میدانی را با مواد دو بعدی دی‌کالکوژن مولیبدن‌دی‌سولفاید و تنگستن‌دی‌تلوراید بررسی شد [۱۳].

ساختار کریستالی مولیبدن‌دی‌سولفاید در شکل ۱ مشاهده می‌شود. این ماده به صورت عمده توسط لایه‌های دوبعدی عمودی، که اتم‌ها در آن با پیوند کووالانسی قوی در یک لایه و نیروی اتصال وان‌دروالسی بین دو لایه مجاور شکل گرفته است تشکیل شده است. یک تک لایه X-M-X است. که اتم‌های X و M به صورت یک شبکه با ساختار هگزاگونال (شش گوشه) دوبعدی، قرار دارند [۱۹ و ۲۰].

فاصله پیوند هر اتم مولیبدن با شش اتم سولفور مساوی است و یک هرم سه وجهی ایده‌آل تشکیل می‌دهد. هر اتم سولفور با سه اتم مولیبدن پیوند دارد. فاصله بین نزدیکترین همسایه اتم‌های مولیبدن، برابر فاصله بین اتم‌های سولفور است. در

فناوری نانو یکی از شاخه‌های دانش نوین است که هدف آن بررسی خواص مواد در مقیاس اتمی و تولید قطعات بر پایه این مواد می‌باشد. مواد دوبعدی، زیرگروهی از این مواد هستند که تنها یک بعد آنها در مقیاس نانوست. در مواد دوبعدی، تمامی اتم‌ها در معرض سطح قرار دارند که این ویژگی به افزایش قابل توجه واکنش‌های فیزیکی و شیمیایی منجر می‌شود.

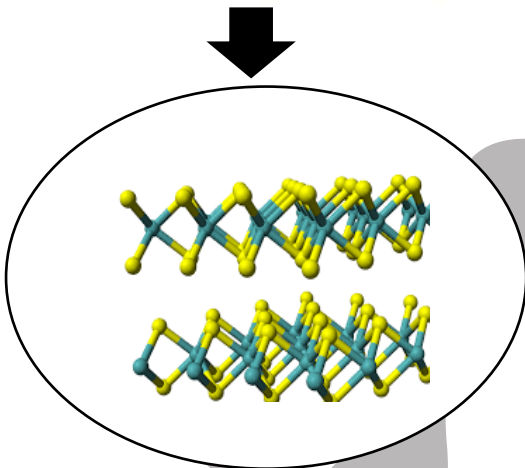
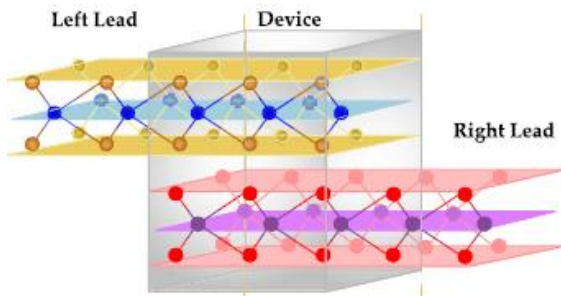
در حال حاضر مواد دوبعدی مختلفی مانند گرافن، سیلیسن، فسفرن و ترکیباتی مانند دی‌کالکوژن‌های فلزات واسطه به دلیل خواص غیرمعمول برای استفاده در الکترونیک، ترموالکترونیک، اسپینترونیک و فوتونیک وجود دارد [۲۱ و ۲۰]. این نوع مواد به دلیل خواص متفاوتی که دارند، همچون رسانش حرارتی، پایداری شیمیایی، نوز کم و حساسیت خواص الکترونیکی به تغییرات محیطی، کاربردهای زیادی در دستگاه‌های آشکارساز نوری، دستگاه‌های ترموالکترونیک و حسگرهای گازی دارند [۳].

کاربرد مواد دوبعدی، با توجه به نوع ساختار و ویژگی‌های آنها، متفاوت است. مواد دوبعدی به دلیل دارا بودن نسبت سطح به حجم بالا و همچنین سطح داخلی زیاد، گزینه‌های بالقوه‌ای برای دستگاه‌های ذخیره انرژی هستن [۳ و ۴].

کمتر از سه بعد بودن نانو ساختارها، ویژگی‌های متمایزی به آن‌ها می‌بخشد. به عنوان مثال، نانومواد دوبعدی، نازک ترین مواد شناخته شده هستند [۴]. عموماً این مواد به شکل ترکیب MX_2 هستند که در آن M یک فلز واسطه و X یک دی-کالکوژن است، می‌باشند. مواد دو بعدی از لایه‌های انباشته زیادی تشکیل شده است که توسط نیروهای ضعیف وان-دروالسی به هم متصل شده‌اند [۵ و ۶].

مواد دوبعدی مختلف می‌توانند بدون محدودیت عدم تطابق شبکه، ساختارهای نامتجانس وان‌دروالسی را تشکیل دهند و فراتر از این، موادی که دارای ثابت شبکه‌ی یکسانی می‌باشند، می‌توانند به صورت یکپارچه به هم پیوندند و ساختار صفحه‌ای نامتجانسی را تشکیل دهند. به دلیل دارا بودن گاف نواری تنظیم شونده و نیز ساختارهای نامتجانس، این مواد گزینه مناسبی جهت استفاده در ساخت ابزارهای اپتوالکترونیک هستند [۷ و ۸].

کاملاً مشخص است که ضریب بهینگی بزرگ به این معنی است یک دستگاه ترموالکتریک کارآمد باشد. نشان داده شده است که بهینه‌سازی ضریب بهینگی برای مواد ترموالکتریک حجیم به دلیل متغیرهای وابسته به هم، کاری چالش‌برانگیز است که تغییر یکی از آنها اغلب به طور نامطلوبی سایر متغیرها را تعدیل می‌کند [۲۴].



شکل ۱. ساختار دستگاهی شامل سه ناحیه، الکترود چپ تک لایه MoS_2 و الکترود راست تک لایه WTe_2 و ناحیه مرکزی متشکل از اتصال $\text{MoS}_2/\text{WTe}_2$ است.

برای افزایش ضریب بهینگی می‌بایست رسانندگی گرمایی (K_e) حتی‌الامکان کاهش داده شود و در مقابل رسانندگی الکتریکی و ضریب سیبک افزایش یابد. به همین دلیل مطالعه رسانندگی گرمایی ماده به کار رفته در این دستگاه‌ها می‌تواند در کاهش و کنترل اتلاف گرما نقش مهمی داشته باشد.

جهت استفاده در قطعات الکترونیکی و اپتوالکترونیکی نیازمند مواد با رسانندگی گرمایی بالا هستیم. رسانندگی گرمایی بالا و گاهی رسانندگی گرمایی پایین بسته به نوع کاربرد می‌تواند

ترکیبات چندلایه‌ای اندازه گاف انرژی غیر مستقیم در حالت حجیم مولیبدن‌دی‌سولفاید از $1/22$ تا $11/23$ الکترون ولت می‌باشد [۲۱ و ۲۰]. در حالی که گاف انرژی مستقیم آن از $1/74$ تا $11/8$ الکترون ولت گزارش شده است. گاف انرژی مولیبدن‌دی‌سولفاید را می‌توان با تغییر تعداد لایه‌ها از چندلایه به تک لایه به گاف مستقیم ۱ الکترون ولت رساند.

در این پژوهش تنگستن‌دی‌تلوراید به عنوان لایه دوم مورد استفاده قرار گرفت [۱۳]. تنگستن‌دی‌تلوراید دردمای پایین، در حالت‌های حجیم رفتار نارسایی دارد. محاسبه ساختار نواری نشان داد که دارای گاف $0/7$ الکترون ولت است. محاسبه چگالی حالت‌های جزئی نشان می‌دهد که لبه نوار رسانش را اوربیتالهای d اتم W تشکیل داده‌اند. لبه نوار ظرفیت از اوربیتالهای p اتم Te تشکیل شدند [۲۲-۲۴].

برای تعیین نوع و ساختار ارجح این مواد جهت استفاده در ادوات اپتوالکتریک لزوماً باید خواص ترموالکتریک این مواد در شرایط فیزیکی متفاوت نظیر دما و یا عرض‌های مختلف مورد بررسی قرار گیرد.

خواص ترموالکتریک به دلیل قابلیت تبدیل انرژی حرارتی به انرژی الکتریکی از اهمیت فناوری قابل توجهی برخوردار است. همچنین مواد ترموالکتریک با قابلیت تولید انرژی پاک به دلیل افزایش تقاضای جهانی به انرژی، مورد توجه قرار گرفته‌اند [۲۴ و ۲۱].

یکی از مشخصه‌های ترموالکتریک، رسانندگی الکتریکی (G)، یا رسانایی ویژه می‌باشد که برابر با وارون ضریب مقاومت الکتریکی ویژه است و نشان دهنده میزان قابلیت توانایی مواد برای عبور دادن جریان الکتریکی است. یکی دیگر از این مشخصه‌ها ضریب سیبک (S) است که میزان ولتاژ ایجاد شده برای تغییر دمای معین را توضیح می‌دهد [۱۵ و ۱۶].

بازدهی دستگاه‌های ترموالکتریک که قادرند انرژی گرمایی را مستقیماً به انرژی الکتریکی تبدیل کنند به خواص ماده به کار رفته در آن بستگی دارد که از طریق کمیت بدون بعد موسوم به ضریب بهینگی (ZT_e) بیان می‌شود [۱۶ و ۱۸ و ۲۱].

تنگستن دی تلوراید می باشد که در ناحیه وسط دو لایه نامتجانس روی هم قرار دارند که با توجه به کارهای پیشین و نتایج مستخرج مانند ساختار نواری، چگالی حالت ها و عبوردهی، پیکربندی و مواد مطلوب در این ساختار در نظر گرفته شد. دوانونوار مولیدن دی سولفاید و تنگستن دی تلوراید رادر دو لایه بالا و پایین در پیکربندی منتخب با دو ساختار لبه زیگزاگ و آرمچیر در نظر گرفته و اثر تغییرات عرض نانو نوارها و دما را در روی خواص ترموالکتریکی بررسی شده است [۲۸ و ۲۶ و ۲۸]. نانو نوارهای مولیدن دی سولفاید و تنگستن دی تلوراید تکرار سلول واحد نانو نوار به صورت دوره ای فقط در جهت X ساخته شده در نظر گرفته شده است، همان گونه که در شکل ۱ مشاهده می شود.

جریان های الکتریکی و حرارتی به دلیل اختلاف ولتاژ و اختلاف دما ایجاد می شوند. هنگامی که اختلاف دمای ΔT بین دو سر یک اتصال اعمال می شود، جریان الکتریکی و همچنین جریان گرمایی از ناحیه میانی عبور می کنند. بنابراین، یک ولتاژ ترموالکتریک ΔV بین آنها و برعکس مشاهده می شود. فرض می شود که الکترودهای چپ و راست به ترتیب دارای پتانسیل شیمیایی و دماهای (T_L, μ_L) و (T_R, μ_R) می باشد.

به طوری که $\mu_{L(R)} = \mu + (-)e\Delta V/2$ با $E_F \approx \mu$ و بار الکتریکی $e = 1.6 \times 10^{-19}$ کولن و $T_{L(R)} = T + (-)\Delta T/2$ می باشد. که در آن، پتانسیل شیمیایی باید شرط $\mu_L < E_F < \mu_R$ را برآورده کند، که در آن E_F انرژی فرمی میانی است [۳۴ و ۳۵].

جریان دستگاه در روش تابع گرین بازگشتی محاسبه می شود [۳۶، ۳۷]. احتمال انتقال یک الکترون فرودی با انرژی E از طریق یک دستگاه به عنوان تابعی از انرژی فرودی از تابع گرین ناحیه مرکزی که به الکترودهای چپ و راست کوپل شده است، $G_C(E)$ به صورت زیر به دست می آید:

$$G_C(E) = [(E + i\alpha)I - H_C - \sum_L(E) - \sum_R(E)]^{-1} \quad (1)$$

ارزشمند باشد، باید درک درستی از مصرف بهینه و جلوگیری از اتلاف داشته باشیم [۱۸-۱۹ و ۲۵ و ۲۶].

به منظور برخورداری از خواص گوناگون فیزیکی اطلاع از شرایط تعادل ترمودینامیکی به خصوص ویژگی های انتقال گرما و شناخت مواد با خواص بهینه بسیار حائز اهمیت است. تحقیقات گسترده ای بر روی خواص الکترونیکی و ترموالکتریک روی مواد دی کالکوژن دوبعدی در ساختار حجیم، چند لایه و تک لایه انجام شده است.

مواد دوبعدی نظیر مولیدن دی سولفاید و تنگستن دی تلوراید دارای خواصی هستند که می توانند در ساخت قطعات باهدف مصرف بهینه انرژی استفاده شوند. در این مقاله خواص ترموالکتریکی این دو ماده با تغییر عرض و تغییرات دمایی را در ساختاری که در پژوهش های قبلی قابلیت خوبی را نشان داد بررسی شده است [۲۷-۲۹].

با استفاده از روش بستگی قوی برپایه تابع گرین بازگشتی، جریان های الکتریکی و حرارتی از فرمول لاندائو-بوتیکر به دست آمده اند [۲۹-۳۴].

نتایج عددی ما ممکن است در آینده طراحی و ساخت دستگاه های ترموالکتریک کارآمد مبتنی بر مواد دوبعدی با گاف انرژی مناسب به عنوان یکی از دستگاه های نانومقیاس مناسب مفید باشد. ساختار مقاله به شرح زیر است:

روش محاسباتی مورد استفاده برای تعیین جریان های الکتریکی و حرارتی منتقل شده و همچنین سایر کمیت های ترموالکتریک را شرح می دهیم. سپس، در بخش ۳، نتایج عددی خواص الکتریکی و ترموالکتریک ساختار انتخابی را مورد بحث قرار می دهیم. بخش آخر مقاله به بحث و نتیجه گیری یافته های ما اختصاص دارد.

روش و فرضیات محاسبات

در این پژوهش همان گونه که در شکل ۱ مشاهده می شود لایه بالایی تک لایه مولیدن دی سولفاید و لایه پایینی تک لایه

$$[(E + i\alpha)I - H_{11} - \Sigma_L^{new}(E) - \Sigma_R^{new}(E)]^{-1} \quad (5)$$

که در آن H_{11} هامیلتونی اولین لایه اصلی در دستگاه است و خود-انرژی‌های چپ و راست جدید به صورت زیر محاسبه می‌شود:

$$\begin{aligned} \Sigma_L^{new} &= H_{01}^\dagger \bar{g}_{00}^L H_{01} \\ \Sigma_R^{new} &= H_{12} \bar{g}_{22}^R H_{12}^\dagger \end{aligned} \quad (6)$$

با محاسبه G_C ، چگالی حالت‌ها را می‌توان به دست آورد:

$$\text{DOS}(E) = \frac{1}{\pi} \text{ImTr} G_C(E) \quad (7)$$

علاوه بر این، در رژیم انتقال همدوس، طیف انتقال توسط تابع گرین تعمیم یافته دستگاه داده می‌شود.

$$Te(E, V_a) = \text{Tr}[T_L G_C^\dagger T_R G_C]. \quad (8)$$

عبوردهی سیستم‌های مبتنی بر کانال و دو الکترون نیمه بینهایت توسط نانونوارهای را براساس تقریب تنگ‌بست و تابع گرین بازگشتی در رژیم همدوس محاسبه کرده و به کمک آن، اثر دما و تغییرات عرض نوار را روی خواص ترموالکتریکی به صورت عددی محاسبه شد و از اثرات اسپینی والکترون-حفره صرف‌نظر کرده‌ایم [۲۷ و ۴۴]:

$$J = \frac{2e}{h} \int_{-\infty}^{+\infty} T_e(E) [f_L(E) - f_R(E)] dE \quad (9)$$

که در آن e بار الکتریکی الکترون، h ثابت پلانک، $g(k)$ چگالی حالت‌ها، $f_{L(R)}$ تابع توزیع اشغال فرمی می‌باشد.

از طرفی L_n ضریب جنبشی است که با رابطه ۱۰ تعریف می‌شود در این رابطه شرط $n=0-2$ برقرار است:

$$L_n(\mu, T) = -\frac{1}{h} \int_{-\infty}^{+\infty} dE T(E) (E - \mu)^n \frac{\partial f}{\partial E} \quad (10)$$

$T(E)$ تابع احتمال عبوردهی الکترون فرودی با انرژی E می‌باشد. ضرایب مختلف انرژی جنبشی را می‌توان با انتگرال‌گیری

احتمال عبوردهی روی انرژی محاسبه کرد. به کمک آن می‌توان ضریب رسانش الکتریکی و رسانش گرمایی را محاسبه کرد:

$$G(\mu) = q^2 L_0(\mu, T)$$

که در آن α یک عدد دلخواه کوچک است که برای ارائه معیار همگرایی به معادله بالا اضافه شده است و I ماتریس همانی است. در اینجا، H_C هامیلتونی دستگاه ایزوله و $\Sigma_{L(R)}(E)$ عملگر خودانرژی است که می‌توان آن را به عنوان یک هامیلتونی مؤثر که از جفت شدن دستگاه بالکترون چپ (راست) ناشی می‌شود، در نظر گرفت. تابع پهن‌شدگی به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\Gamma_{L(R)} = i[\Sigma_{L(R)} - \Sigma_{L(R)}^\dagger] \quad (2)$$

برای به دست آوردن ماتریس تابع گرین سیستم اصلی به یک زنجیره خطی از لایه‌های اصلی با برهمکنش‌های نزدیکترین همسایه تقسیم می‌کنیم. این مدل توسط سانچو و همکارانش توصیف شده [۳۹ و ۴۰]، توسط بسیاری دیگر استفاده شده است [۴۰-۴۲]. در این شیوه، تابع گرین بازگشتی، تابع انتقال را برای الکتروادهای چپ و راست نیمه نامتناهی به صورت زیر محاسبه می‌کند [۳۸ و ۳۹]

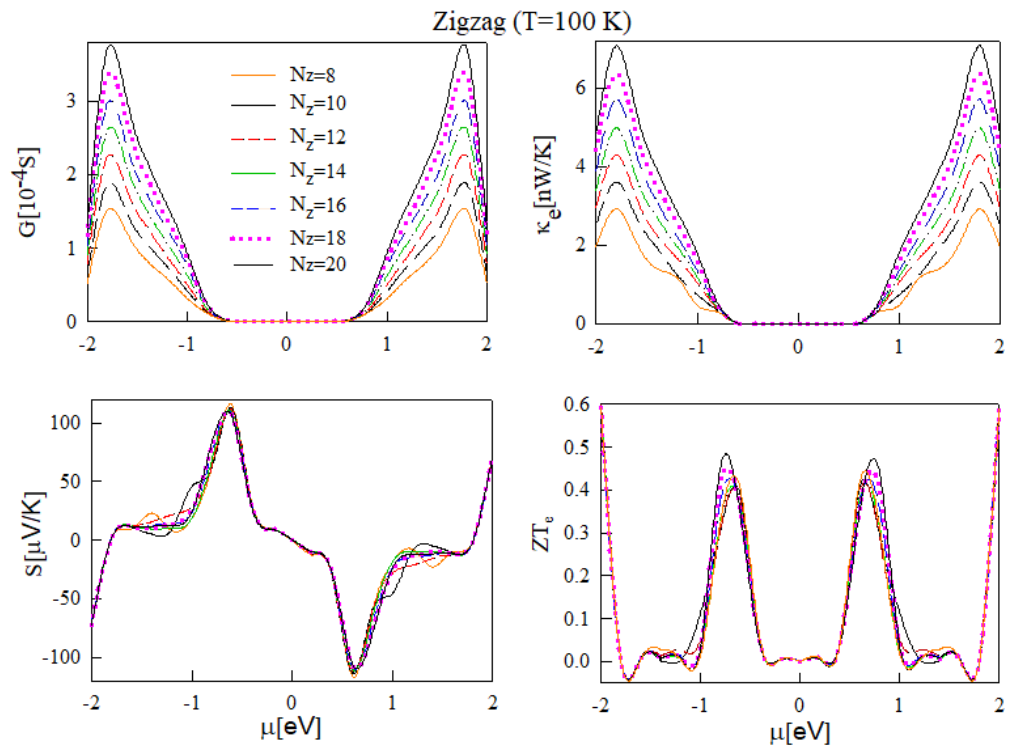
$$\begin{aligned} \bar{g}_{0,0}^L &= [(E + i\alpha)I - H_{00} - H_{-10}^\dagger \bar{\Lambda}]^{-1} \\ \bar{g}_{M+1,M+1}^L &= [(E + i\alpha)I - H_{00} - H_{-10} \bar{\Lambda}]^{-1} \end{aligned} \quad (3)$$

که در آن M تعداد لایه‌های اصلی نانونوار در ناحیه مرکزی است. در اینجا، H_{00} و H_{01} به ترتیب نشان دهنده هامیلتونی یک لایه اصلی و برهمکنش بین لایه اصلی و الکترون می‌باشد. تابع گرین جدید با اضافه کردن برش به برش دستگاه به الکترودمست راست از طریق معادله ۴ محاسبه می‌شود.

$$\bar{g}_{l,l}^R = [(E + i\alpha)I - H_{l,l} - H_{l,l+1} \bar{g}_{l+1,l+1}^R H_{l+1,l+1}^\dagger]^{-1} \quad (4)$$

که در آن l از $l=2$ به $l=M$ تغییر می‌کند. در اینجا، $H_{l,l}$ هامیلتونی لایه اصلی (l) در دستگاه است. همچنین، ماتریس جفت‌شدگی بین لایه‌های اصلی l و $l+1$ در دستگاه را به ترتیب معرفی می‌کند. علاوه بر این، در معادله ۳، $\bar{\Lambda}$ و Λ ماتریس‌های انتقال هستند که می‌توانند به طور مؤثر در یک طرح تکراری همانطور که توسط مراجع [۳۷-۳۹] تعریف شده است، محاسبه شوند. با توجه به ملاحظات فوق، تابع گرین جدید سیستم به صورت زیر داده می‌شود:

$$G_{11}^{new}(E) =$$



آن برای مولیبدن دی سولفاید و تنگستن دی تلوراید به ترتیب ۰/۷۵ eV و ۱/۵۹ eV می باشد و پارامتر پرش عمودی ۹۷ میلی الکترون ولت است که مقدار خیلی کوچکی دارد [۱۷ و ۱۶]. علاوه بر این، منطقه مرکزی شامل ده سلول واحد ($M=10$) است [۴۲].

بحث و نتیجه گیری:

خواص ترموالکتریکی دو ماده دی کالکوژن دو بعدی مولیبدن دی سولفاید به عنوان نیم رسانای نوع دهنده و تنگستن دی تلوراید به عنوان نیم رسانای نوع گیرنده را با ساختار لبه زیگزاگ در عرض ها و دماهای مختلف مورد بررسی قرار دادیم.

در پیکربندی ها با ابعاد کوچک، که منجر به کاهش اثرات استتار و افزایش همبستگی الکترون-الکترون می شود، اثرات برهمکنشی بس ذره ای نقش مهمی در مطالعه خواص الکترونی و ترموالکتریکی دارد. با استفاده از نتایج پژوهش های قبلی، مواد دو بعدی دی کالکوژن مولیبدن دی سولفاید و تنگستن دی تلوراید انتخاب و نتایج خواص ترموالکتریکی در عرض های مختلف برای ساختار لبه های زیگزاگ و آرمچیر حاصل شد.

نتایج در دمای ۱۰۰ و ۳۰۰ درجه کلین برای نانو نوارها با عرض های به ترتیب ۸، ۱۰، ۱۲، ۱۴، ۱۶، ۱۸، ۲۰ با دو ساختار لبه زیگزاگ و آرمچیر محاسبه شده است. عرض (پهنای) این نانو نوارها به تعداد خط های دو تایی (تعداد یاخته ها) در نانو نوارهای زیگزاگی و آرمچیر بستگی دارند. در شکل ۲ رسانش گرمایی،

$$\kappa_e(\mu) = \frac{1}{T} \left(L_2(\mu, T) - \frac{L_1(\mu, T)^2}{L_0(\mu, T)} \right) \quad (11)$$

با استفاده از معادله ۱۰ و رابطه $S = -\frac{\Delta v}{\Delta T}$ ضریب توان ترموالکتریکی به صورت زیر محاسبه می شود:

$$S = -\frac{L_1(\mu, T)}{qTL_0(\mu, T)} \quad (12)$$

با محاسبه رسانش الکتریکی و گرمایی و توان ترموالکتریکی یا ضریب سیبک کمیت بدون بعد ضریب بهینگی قابل محاسبه است:

$$ZT_e = \frac{S^2 GT}{\kappa_e} \quad (13)$$

در محاسبات انرژی جایگاهی، ϵ_j شامل نزدیکترین همسایه داخل صفحه برای مولیبدن دی سولفاید برابر ۱/۱۰ eV و برای تنگستن دی تلوراید برابر با ۰/۸۴ eV است. انتگرال انرژی پرش برای زامین اتم $\pm E_G/2$ در نظر گرفته شده است، که E_G مقدار

شکل ۲. a) رسانش الکتریکی، **b)** رسانندگی گرمایی، **c)** ضریب سیبک و **d)** ضریب بهینگی به عنوان تابعی از انرژی پتانسیل شیمیایی برای دستگاه مولیبدن دی سولفاید/تنگستن دی تلوراید نانو نوارهای زیگزاگ با مقدار عرض نواری ۱۰، ۱۲، ۱۴، ۱۶، ۱۸ و ۲۰ در ۱۰۰ درجه کلین

حامل‌ها می‌گردد، هنگامی که پتانسیل شیمیایی مثبت است، جریان از طریق الکترون‌ها به عنوان حامل‌های فعال ایجاد می‌شود. یک اختلاف پتانسیل منفی که ولتاژ ترموالکتریک نامیده می‌شود، بین الکتروود سرد و الکتروود گرم ایجاد می‌کند که منجر به ضریب سبیک منفی می‌شود (و بالعکس).

قله‌های قابل توجه رسانش گرمایی در لبه‌های باند ظاهر می‌شوند بالاترین مقدار رسانش گرمایی پراکندگی حامل‌ها در مرز باعث کاهش رسانش الکتریکی همزمان با افزایش دما می‌شود. شدت و همچنین عرض قله‌ها بستگی دما می‌دارد.

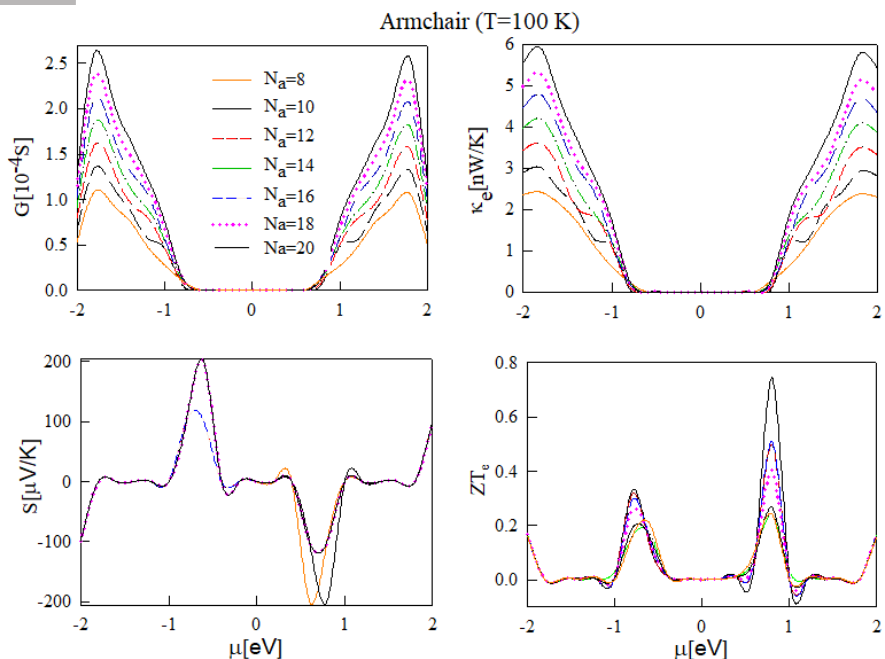
همان‌طور که در قسمت C شکل‌های ۲ تا ۵ مشهود است ضریب سبیک به شیب منحنی رسانایی وابسته است. ضریب سبیک غیر صفر در مناطقی که شیب منحنی رسانایی غیرصفر است ظاهر می‌گردد. بیشترین مقدار ضریب سبیک در پتانسیل شیمیایی نزدیک به نوار ظرفیت و همچنین نوار هدایت ظاهر می‌شود. از آنجایی که ضرایب تراپردی عمدتاً وابسته به خواص الکترونی

رسانش الکتریکی، ضریب سبیک و ضریب بهینگی برای عرض‌های مختلف در دمای ۱۰۰ درجه کلون در ساختار لبه زیگزاگ ترسیم شده است. در شکل ۳ خواص ترمودینامیکی در دمای ۱۰۰ درجه کلون برای عرض‌های مختلف نانو‌ها ساختار لبه آرمچیر مشهود است. این روند در شکل‌های ۴ و ۵ برای دمای ۳۰۰ درجه کلون تکرار شده است.

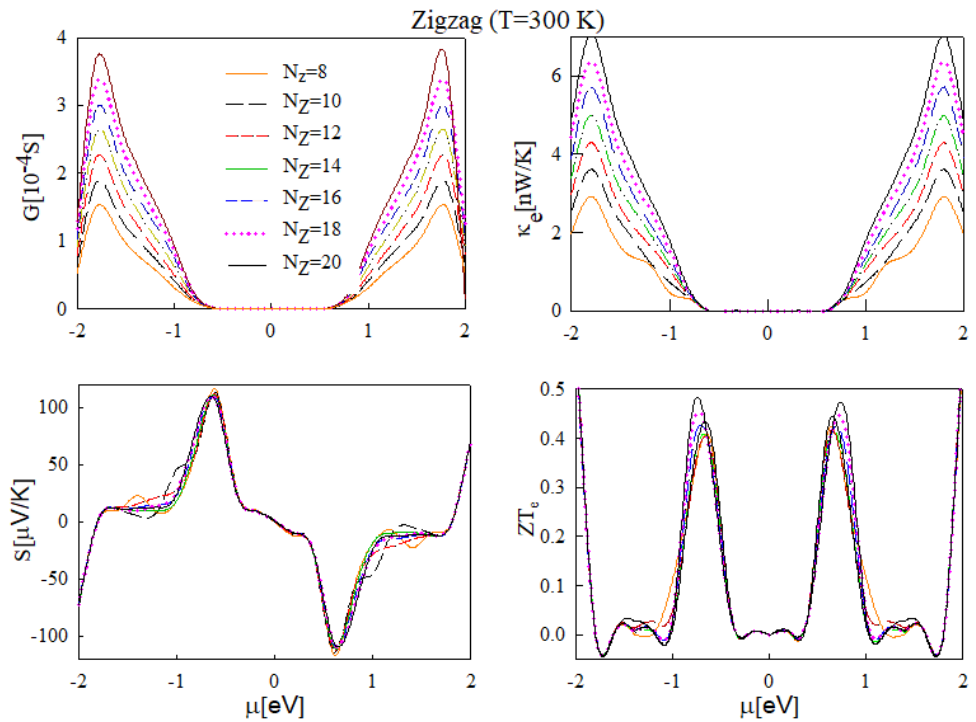
با توجه به نتایج حاصل در قسمت a شکل‌های ۲ تا ۵، در عرض‌های مختلف نانو نوار رسانش الکتریکی غیرصفر را در یک بازه پتانسیل شیمیایی مشاهده می‌شود. این در حالی است که با افزایش دما، وجود حامل‌ها باعث افزایش هدایت الکتریکی می‌شود. همچنین به وضوح مشاهده می‌شود با افزایش عرض نانو‌ها روند تغییرات رسانش الکتریکی نیز افزایشی است. رسانش الکتریکی غیر صفر در بازه‌های پتانسیل شیمیایی با افزایش ضخامت نانو‌ها دیده می‌شود، همین روند با افزایش

ضخامت نانو‌ها در رسانش گرمایی هم دیده می‌شود (در قسمت b شکل‌های ۲ تا ۵). نکته قابل توجه این است که اختلاف دمای حالت پایدار، در پیکربندی‌ها باعث پخش شدن

شکل ۳. a) رسانش الکتریکی، **b)** رسانندگی گرمایی، **c)** ضریب سبیک **d)** ضریب بهینگی به عنوان تابعی از انرژی پتانسیل شیمیایی برای دستگاه مولیبدن دی‌سولفاید/تنگستن دی‌تولراید نانو‌ها با مقادیر عرض نوری ۱۰، ۱۲، ۱۴، ۱۶، ۱۸ و ۲۰ در ۱۰۰ درجه کلون.



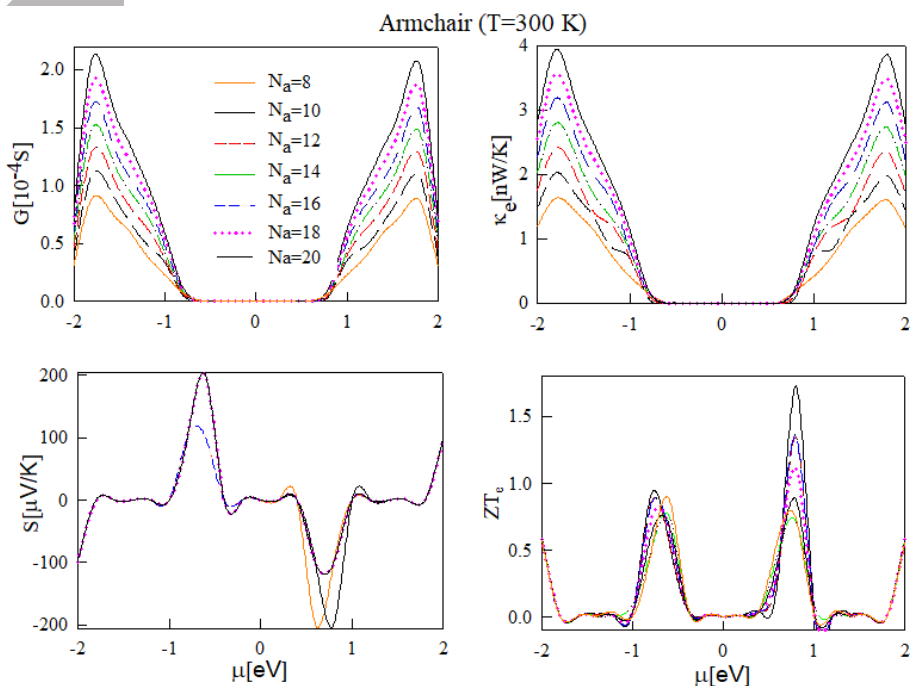
شکل ۴. (a) رسانش الکتریکی،
(b) رسانندگی گرمایی، **(c)** ضریب
 سیبک و **(d)** ضریب بهینگی به
 عنوان تابعی از انرژی پتانسیل
 شیمیایی برای دستگاه مولیبدن-
 دی سولفاید/تنگستن دی تلوراید
 نانونوارهای زیگزاگ با مقدار
 عرض نواری ۱۰، ۱۲، ۱۴، ۱۶،
 ۱۸ و ۲۰ در ۳۰۰ درجه کلوین.



ضریب سیبک بیشینه در ساختار زیگزاگ و ساختار لبه آرمجیر
 به ترتیب $115/44 \mu\text{V/K}$ و $200 \mu\text{V/K}$ می باشد.
 همچنین در نمودارهای ضریب سیبک نوساناتی مشاهده می-
 گردد که مرتبط به رقابت الکترون‌ها و حفره‌ها در سیستم می-
 باشد، که به ترتیب $S < 0$ و $S > 0$ که به ترتیب سهم‌های غالبی
 در ضریب سیبک دارند.

هستند، گاف نواری بزرگ ممکن است باعث کاهش غلظت
 حامل‌های بار در اطراف انرژی فرمی شود که منجر به ضرایب
 سیبک بزرگ گردد. شدت و عرض پیک‌ها به دما وابسته است.
 همان‌گونه که در شکل‌ها نیز دیده می‌شود ضریب سیبک برای
 تمامی ضخامت‌ها در محدوده پتانسیل شیمیایی صفر ناپدید می
 گردد زیرا جریان الکترون و حفره همدیگر را خنثی می‌کنند.

شکل ۵. (a) رسانش الکتریکی،
(b) رسانندگی گرمایی، **(c)** ضریب
 سیبک و **(d)** ضریب بهینگی به عنوان
 تابعی از انرژی پتانسیل شیمیایی برای
 دستگاه مولیبدن دی سولفاید/تنگستن-
 دی تلوراید نانونوارهای آرمجیر با مقدار
 عرض نواری ۱۰، ۱۲، ۱۴، ۱۶، ۱۸ و
 ۲۰ در ۳۰۰ درجه



عرض‌های مشابه در ساختار آرمچیر است که در کارهای دیگران نیز این تفاوت دیده شده است [۲۷]:

نتیجه گیری

ضریب سیبک و ضریب بهینگی نانونوار آرمچیر بیشتر از نانونوار زیگزاگ با عرض یکسان است. ساختار لبه آرمچیر با بیشترین ضخامت و در دمای ۱۰۰ درجه کلون می تواند خواص ترموالکتریکی مطلوب تری داشته باشد.

نکته قابل تامل در مورد مهندسی ساخت این قطعات مرتبط به روند افزایش عرض و دما می باشد که با عنایت به مورد استفاده باید به نوعی این نتایج مورد بررسی قرار گرفته و توازن مشخصی بین عرض نانو نوار دی کالکوژن دوبعدی و دما ایجاد شود تا کاراترین ساختار انتخاب گردد.

منابع:

- [۱] K. Lee, "Graphene and beyond: Electron transport in two dimensional materials", Thesis, (2015).
- [۲] M. Mathew, P.V. Shinde, R. Samal, C. Sekhar, "A review on mechanisms and recent developments in p-n heterojunctions of 2D materials for gas sensing applications", *J. Mater. Sci.* 56, 9575–9604 (2021).
- [۳] M.V. Fischetti, and W.G. Vandenberghe, "Physics of electronic transport in twodimensional materials for future FETs", *IEEE International Electron Devices Meeting (IEDM)* 14.2.1-14.2.4 (2016).
- [۴] Q.-Y. Li, Q. Hao, T. Zhu, M. Zebajadi, K. Takahashi, "Nanostructured and Heterostructured 2D Materials for Thermoelectrics", *Eng. sci.* 13, 24-50 (2021).
- [۵] M. Abdi, E. Norian, B., Astinchap, "Tuning the electronic and thermoelectric properties of WTe_2 nanoribbons via strain and magnetic fields", *Thermal Science and Engineering Progress*, 65 103889 (2025).
- [۶] M. Abdi, E. Norian, B. Astinchap, "Thermoelectric properties of MoS_2 - $MoTe_2$ and MoS_2 - $MoSe_2$ lateral hetrostructures: The effects of external magnetic, transvers electric field and nanoribbon whidth", *Phisica E*, 165 116119, (2025).
- [۷]] M. Abdi, E. Norian, B. Astinchap, "Thermoelectric Properties of Zigzag $Mos_2/Mose_2$ and $Mos_2/Mote_2$ Hybrid Nanoribbons: The Effects of Nanoribbon Width, Transverse Electric and External Exchange

ضریب بهینگی که در قسمت d شکل‌های ۲ تا ۵ مشاهده می-شود با ضریب سیبک به طور خطی رابطه دارد ضریب بهینگی با

افزایش عرض نانو نوارها نیز روند افزایشی دارد.

همان گونه که در نمودارهای شکل‌های ۲ تا ۵ دیده می‌شود به طور کلی اثرات تغییر دما روی خواص ترموالکتریکی (حد اقل

در حدود محدوده ۲۰۰ درجه کلون که در اینجا بررسی شده است) خیلی مشهود نمی‌باشد. تغییرات در ساختار لبه آرمچیر نسبت ساختار لبه زیگزاگ واضح تر می‌باشد. افزایش دما در این ساختار لبه باعث کاهش اندکی در رسانش الکتریکی و رسانش گرمایی می‌گردد و از آنجایی که ضریب بهینگی با رسانش گرمایی رابطه معکوس دارد، در آن تغییرات افزایشی کاملاً دیده می‌شود.

گسترده‌گی بازه رسانش الکتریکی صفر در ساختار لبه آرمچیر نسبت به ساختار لبه زیگزاگ به میزان اندکی بیشتر است. بازه تغییرات رسانش گرمایی در ساختار لبه زیگزاگ نسبت به ساختار لبه آرمچیر گسترده‌تر و در عرض مشترک دارای مقدار بزرگتری است.

رسانندگی گرمایی بیشتر منجر به کاهش ضریب بهینگی می-گردد. برای افزایش ضریب بهینگی باید رسانندگی الکتریکی و ضریب سیبک افزایش یابند. این تفاوت در مقادیر بزرگتر ضریب بهینگی به دست آمده در ساختار لبه آرمچیر در مقایسه با مقادیر ضریب بهینگی عرض‌های مختلف در ساختار لبه زیگزاگ مشهود بوده و تایید همین نکته می‌باشد.

برخلاف رسانش الکتریکی، رسانندگی گرمایی با افزایش دما در پیکربندی با ضخامت‌های مختلف روند افزایشی دارند. پراکندگی حامل‌ها در مرز باعث کاهش رسانش الکتریکی همزمان با افزایش دما می‌شود. در حالی که حامل‌های بیشتر در دماهای بالاتر باید منجر به افزایش آن شود.

تفاوت دیگری در نمودارها مشهود است مربوط به عدم تقارن ضریب بهینگی در ساختار لبه آرمچیر نسبت به ساختار لبه زیگزاگ است که ناشی از عدم تطابق کامل دو نانونوار در

- [۱۹] B. Zhou, Y. Zeng, G. Zhou, T. Ouyang, "Seebeck effects in a graphene nanoribbon coupled to two ferromagnetic leads", *J. Appl. Phys.* 115 114305 (2014).
- [۲۰] J. Hong, C. Lee, J.S. Park, J.H. Shim, "Control of valley degeneracy in MoS₂ by layer thickness and electric field and its effect on thermoelectric properties electronic transport in Two-Dimensional materials", *Phys. Rev. B* 93, 035445 (2016).
- [۲۱] Y.H. Huang, R.S. Chen, J.R. Zhang, Y.S. Huang, "Electronic transport in NbSe₂ two-dimensional nanostructures: semiconducting characteristics and photoconductivity", *Nanoscale* 7, 45 (2015).
- [۲۲] K.-T. Lam, G. Seol, J. Guo, "Performance evaluation of MoS₂-WTe₂ vertical tunneling transistor using real-space quantum simulation", *Electron Devices Meeting, IEDM 88. Technical Digest., International* (2015).
- [۲۳] H. Zheng, Z. F. Wang, T. Luo, Q. W. Shi, J. Chen, "Analytical study of electronic structure in armchair graphene nanoribbons", *Phys. Rev. B* 75 165414 (2007).
- [۲۴] A. Nourbakhsh, A. Zubair, M.S. Dresselhaus, T. Palacios, "Transport properties of a MoS₂/WSe₂ heterojunction transistor and its potential for application (Thin-TFETs)", *Nano Lett.* 16, 1359–1366 (2016).
- [۲۵] M. Abdi, B. Astinchap, F. Khoeini, "Thermoelectric Properties of Zigzag MoS₂/MoSe₂ and MoS₂/MoTe₂ Hybrid Nanoribbons: The Effects of Nanoribbon Width, Transverse Electric and External Exchange Fields", *SSRN Electronic Journal* <http://dx.doi.org/10.2139/ssrn.4127612> (2022).
- [۲۶] M. Rouzbehi, A. Kazempour, A. Shokri, L. Gholamzadeh, "Thermoelectric properties of tetragonal HfH₂ under doping effect: First principles study", *Physica B Condensed Matter* 613 (2021),
- [۲۷] A. Shokri, N. Salami, "Thermoelectric properties in monolayer MoS₂ nanoribbons with Rashba spinorbit interaction", *J. Mater.Sci.* 54, 467-482 (2019).
- [۲۸] X. Cui, E.M. Shih, L.A. Jauregui, S.H. Chae, Y.D. Kim, B. Li, D. Seo, K. Pistunova, J. Yin, J.-H. Park, H.-J. Choi, Y.H. Lee, K. Watanabe, T. Taniguchi, P. Kim, C.R. Dean, J.C. Hon, "Low-temperature Ohmic contact to monolayer MoS₂ by van der Waals bonded Co/h-BN electrodes", *Nano Lett.* 17, 4781–4786 (2017).
- [۲۹] N. Salami, A. Shokri and M. Esrafilian, "Vertical quantum tunneling transport based on MoS₂/WTe₂ nano ribbons", *Physics Letters A* 445, 128228 (2022).
- [۳۰] X. Zhao, T. Guihua, Y. Li, M. Zhang, Y. Nie, "Biaxial Strain Improving the Thermoelectric Performance of a Two-Dimensional MoS₂/WS₂ Hetero structure", *Nano micro Lett.*, doi: 10.1007/s408_20-020-0374-x, (2020).
- [۳۱] M.V. Fischetti, W.G. Vandenberghe, "Physics of electronic transport in twodimensional materials for future FETs", *IEEE International Electron Devices Meeting (IEDM)* 14.2.1-14.2.4 (2016).
- [۳۲] P. Liu, B. Xiang, "2D hetero-structures based on transition metal dichalcogenides: fabrication, properties and applications", *Sci. Bull.* 62, 1148 (2017),
- [۳۳] M.Y. Li, C.H. Chen, Y. Shi, L.J. Li, "Heterostructures based on two-dimensional layered materials and their potential applications", *Mater. Today* 19, 322-335 (2016).
- [۳۴] A. Srivastava, M.S. Fahad, "Vertical MoS₂/hBN/MoS₂ interlayer tunneling field effect transistor", *Solid-State Electron.* 126, 96 (2016).
- [۳۵] A. Shokri, M. Esrafilian and N. Salami, "Quantum transport of tunnel field effect transistors based on bilayer-graphene nanoribbon heterostructures", *Physica E* 119, 113908 (2020).
- [۳۶] J. Cao, A. Cresti, D. Esseni, M. Pala, "Quantum simulation of a heterojunction vertical tunnel FET based on 2D transition metal dichalcogenides", *Solid-State Electron.* 116, 1–7 (2016).
- [۳۷] H. Chen, X. Wen, J. Zhang, T. Wu, Y. Gong, X. Zhang, J. Yuan, C. Yi, J. Lou, P.M. Ajayan, G. Zhuang, J. Zheng, "Ultrafast formation of interlayer hot excitons in atomically thin MoS₂/WS₂ heterostructures", *Nat. Commun.* 7, 12512 (2016).
- [۳۸] Z. Zhang, Y. Xie, Q. Peng, Y. Chen, "A theoretical prediction of super high-performance thermoelectric materials based on MoS₂/WS₂ hybrid nanoribbons", *Sci. Rep.* 6, 21639 (2016).
- [۳۹] M. Abdi, F. Khoeini, "Thermoelectric properties of MoS₂-MoTe₂ and MoS₂-MoSe₂ lateral hetero-structures: The effects of external magnetic, transverse electric fields and nanoribbon", *Physica E* 165, 116119 (2025).
- [۴۰] Y.C. Lin, R.K. Ghosh, R. Addou et al., "Atomically thin resonant tunnel diodes built from synthetic van der Waals heterostructures", *Nat. Commun.* 6, 7311 (2015).

[۳۰] N.W. Ashcroft, D. Mermin, "Solid-state physics", New York, Holt, Rinehart and Winston (1976).

[۳۱] H. Guo, T. Yanga, P. Tao, Y. Wang, Z. Zhang, "High pressure effect on structure, electronic structure, and thermoelectric properties of MoS₂". *J Appl Phys* 113:013709 (2013).

[۳۲] Ch. Adessi, S. Thebaud, R. Bouzerar, G. Bouzerar, "Firstprinciple investigation on thermoelectric properties of transition metal dichalcogenides: beyond the rigid band model", *J Phys Chem C* 121:12577–12584 (2017).

[۳۳] O. Lopez-Sanchez, D. Lembke, M. Kayci, A. Radenovic, A. Kis, "Ultrasensitive photodetectors based on monolayer MoS₂" *Nat Nanotechnol* 8:497–501 (2013).

[۳۴] G. Zhang, Y-W. Zhang, "Thermoelectric properties of two-dimensional transition metal dichalcogenides" *J Mater Chem C* 5:7684–7698 (2017).

[۳۵] W. Tian, S. Datta, "Aharonov–Bohm-type effect in graphene tubules: a Landauer approach" *Phys Rev B* 49:5097–5100 (1994).

[۳۶] P.F. Bagwell, T.P. Orlando, "Landauer's conductance formula and its generalization to finite voltages", *Phys Rev B*, 40:1456–1464 (1989).

[۳۷] S. Datta, "Electronic transport in mesoscopic systems" *Cambridge University Press, Cambridge*, (1997).

[۳۸] S. Datta, "Nanoscale device modeling: the Green's function method", *Superlattices Microstruct*, 28:253–278 (2000).

[۳۹] M.P. Lopez-Sancho, J.M. Lopez-Sancho, "Quick iterative scheme for the calculation of transfer matrices: application to Mo (100)" *J Phys F*, 14:1205–1215 (1984).

[۴۰] M.P. Lopez-Sancho, J. M. Lopez-Sancho, "Highly convergent schemes for the calculation of bulk and surface Green functions", *J Phys F*, 15:851–858 (1985).

[۴۱] M.B. Nardelli, "Electronic transport in extended systems: application to carbon nanotubes", *Phys Rev B.*, 60:7828–7833 (1999).

[۴۲] V. Meunier, B.G. Sumpter, "Amphoteric doping of carbon nanotubes by encapsulation of organic molecules: electronic properties and quantum conductance" *J Chem Phys* 123:024705 (2005).

[۴۳] مریم سرافیلیان، نادیا سلامی، علی اصغر شکری، "بررسی

خواص ترموالکتریکی ساختارهای مبتنی بر دی کالکوژنهای دو

بعدی MoS₂/MoS₂ , WTe₂/WTe₂ , MoS₂/WTe₂

/پتوالکتریک ۳۶، ۳۶–۲۹ (۱۴۰۳).