بررسی خواص الکترونیکی واپتیکی ترکیبات MoS_2,$MoSe_2$, WS_2, WSe_2 تنگستن و مولیبدن دی سولفید و دی سلنید با استفاده از محاسبات اصول اولیه

رحمتی، انسیه[۱]؛ رضایی رکن آبادی،محمود[۲] ؛بهدانی،محمد[۲]

[۱]دانشکده علوم پایه، گروه فیزیک دانشگاه فردوسی مشهد

[۲]دانشکده علوم پایه، استاد گروه فیزیک دانشگاه فردوسی مشهد

چکیده

در این پژوهش خواص الکترونیکی واپتیکی ترکیبات MoS_2,$MoSe_2$, WS_2, WSe_2 با استفاده از محاسبات اصول اولیه بررسی شده است. محاسبات به روش امواج تقویت شده خطی در چارچوب نظریه تابعی چگالی با تقریب شیب تعمیم یافته انجام شده است. نتایج بدست آمده نشان می دهد که این مواد به ترتیب گاف نواری مستقیم۱/۳۲ev ، ۱/۶۴ ev،۱/۶۸ ev،۱/۳۶ دارند و با توجه به نمودارهای جذب وبازتاب گستره ی انرژی قابل توجهی برای این مواد گزارش شده که این ترکیبات گزینه مناسبی برای کاربردهای اپتیکی می باشند.

A first principle study of electronic and optical properties of WSe_2, WS_2, $MoSe_2$, MoS_2

Rahmati, Enciye[1]; Rezai Roknabadi, Mahmoud[2] ; Behdani, Mohamad[2]

[1]Department of science; Group of physic; Ferdowsi's university Mashhad
[2]Department of science; Group of physic; Ferdowsi's university Mashhad

Abstract

Electronic and optical properties of WSe_2, WS_2, $MoSe_2$, MoS_2 was investigated by using frist principles calculation. The calculations were performed in the frame of density functional theory (DFT), using the full potential linearized augmented plane wave (Fp-LAPW) method with the generalized gradient approximation (GGA). Obtained results show that this compound's had 1/36ev, 1/68ev, 1/32ev , 1/64, ev direct band gap respectively. According to charts absorption and reflection, widespread and significant energy has been reported for these materials that these compounds, good choice is for optics applications.

مقدمه

در دهه گذشته خواص الکتریکی کلکوژن ها مورد بررسی قرار گرفته است.[2] اخیراً مولیبدن و تنگستن دی سولفید و دی سلنید MX2 که (M=MO,W ;X=S,Se) توجه زیادی را به دلیل خواص فیزیکی و شیمیایی به خود جلب کرده اند.گاف نواری این ترکیبات در ناحیه مرئی یا نزدیک ناحیه فروسرخ می باشدکه استفاده از آن ها برای بهبود بازده تبدیل انرژی خورشیدی امیدبخش می باشند. یکی از مهمترین پارامترها ی یک نیم رسانا برای اینکه در تبدیل انرژی خورشیدی استفاده شود ساختار نواری آن است که در محدوده نوری طیف خورشیدی باشد.[۱]

روش محاسبات

محاسبات با استفاده از کد ورودی نرم افزار کوانتوم- اسپرسو در چارچوب نظریه تابعی چگالی (DFT) با تقریب شیب تعمیم یافته(GGA) صورت گرفته است.محاسبات به روش خودسازگار با حل معادلات استاندارد کوهن- شم و برای مجموعه معینی از نقاط k در منطقه اول بریلوئن انجام شده است.

نتایج و بحث ها

ساختار الکترونی

این مواد دارای ساختار هگزاگونال با گروه فضایی $P6_3/mmc$ می باشند.این ترکیبات از صفحات X-M-X تشکیل شده که بر روی

این مقاله به شرط در دسترس بودن در وبگاه www.psi.ir/?physics96 معتبر است.

هم قرار می گیرند و صفحات مجاور با نیروی ضعیف واندروالس با هم اندرکنش می کنند. [این صفحات به گونه ای است که هر صفحه شامل سه لایه می باشد به این صورت که یک لایه از اتم های M بین دو لایه از اتم های X قرار گرفته است.[2] محاسبات برای بلورهای WSe_2, WS_2, $MoSe_2$, MoS_2 در فاز هگزاگونال با a=b≠c انجام شده که مقادیر a پس از بهینه سازی با مقایسه با مقالات در جدول ۱ ذکر شده است.

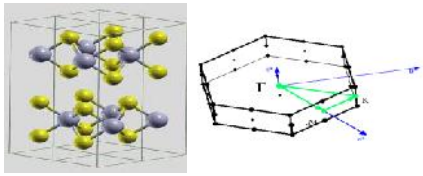
جدول۱:ثابت شبکه aترکیبات مختلف [1]

*	WSe_2	WS_2	$MoSe_2$	MoS_2
a(A°) Quantum espresso	۳.۳۴۳	۳.۱۹۶	۳.۳۴۷	۳.۲۰۱۸
a(A°) win2k	۳.۲۸۲	۳.۱۵۳	۳.۲۸۹	۳.۱۶۹

والبته مقدار a(A°) =3.194 با استفاده ازنرم افزارکوانتوم اسپرسو برای ماده WS_2 در مقالات نیز گزارش شده است.[۴] مختصات مربوط به هر یک از اتم های M و X دراین ساختار به صورت
M =± (1/3,2/3,1/4)
و X= ± (1/3, 2/3, Z)وX= ± (1/3, 2/3, -Z+1/2)

z=0.621 , است و z فاصله بین لایه های M و X می باشد.[1]

در شکل ۱ ساختار بلوری و منطقه اول بریلوئن این ترکیبات نمایش داده شده است.



الف ب

شکل ۱:الف)ساختار بلوری
ب)منطقه اول بریلوئن

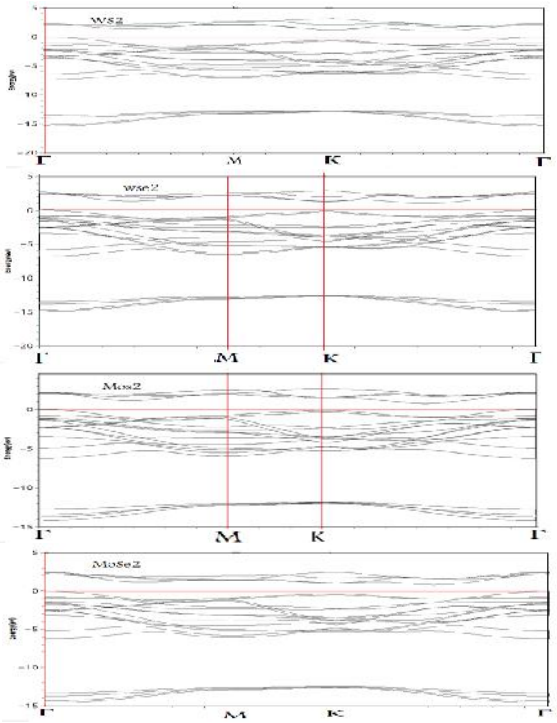
ساختار نواری:

ساختار نواری نشان دهنده ترازهای نوارهای انرژی مجازی هستند که الکترون با بردار موج k می تواند داشته باشد.ناحیه هایی از انرژی که برای آن ها هیچ اوربیتال الکترونی موج گونه وجود ندارد نوارهای انرژی مجاز را از هم جدا می کند. چنین نواحی ممنوعه را گاف های انرژی یا گاف های نواری می نامند. از روی ساختار نواری می توان خاصیت رسانندگی ترکیبات (رسانا و نیمرسانا)،اندازه و مکان گاف، انرژی فرمی و تبهگنی های سیستم را تعیین کرد. برای درک بهتر خصوصیات الکترونی و اپتیکی مواد رسم ساختار نواری مفید است.همچنین در نمودارهای مربوط به ساختار نواری مشاهده می شود که این مواد دارای گاف مستقیم و غیرمستقیم می باشند. که مقادیر برای هر کدام در جدول ۲ ذکر گردیده است.

جدول ۲:انرژی گاف نواری ترکیبات مختلف.[1]

*	WSe2	WS2	MoS2	MoSe2
E_g^d	۱.۳۶	۱.۶۸	۱.۶۴	۱.۳۲
E_g^d مقالات	۱.۳۳	۱.۶۵	۱.۶۲	۱.۳۹
E_g^i	۰.۹۳	۰.۹۷	۰.۸۳۴۵	۰.۸۳۴۶
E_g^i مقالات	۰.۹۲	۰.۹۴	۰.۸۸	۰.۸۴

در شکل ۵ نمودارهای مربوط به ساختاری نواری ترکیبات مختلف نمایش داده شده است.



شکل۵ نمودار ساختار نواری $WSe_2, WS_2, MoS_2, MoSe_2$

خواص اپتیکی:

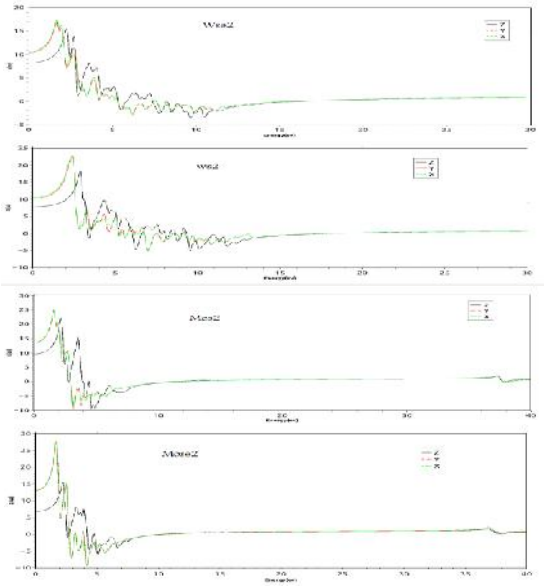
تابع دی الکتریک یکی از پارامترهای مهم برای

این مقاله به شرط در دسترس بودن در وبگاه www.psi.ir/?physics96 معتبر است.

بررسی پاسخ ماده به میدان های اعمالی است .این تابع به ساختار نواری بلور بستگی داردو تابع فرکانس می باشد. [3]شدت تابع دی الکتریک یک جامد با رابطه ۱ داده می شود .

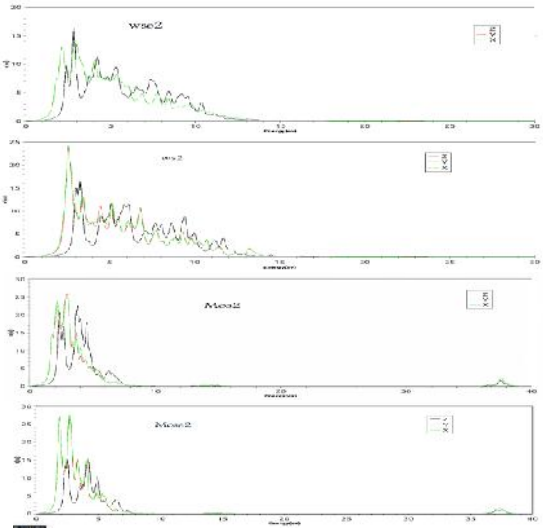
$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon'(\omega) + i\varepsilon''(\omega) \quad (۱)$$

در شکل ۲ نمودار قسمت حقیقی تابع دی الکتریک برای نور فرودی در سه جهت x, y,z رسم شده است.[تابع دی الکتریک یک تانسور است بنابراین جهت قطبش نور اعمال شده تاثیر زیادی روی آن دارد بررسی نمودارها در جهت های مختلف این موضوع را تایید می کند. اگر قسمت حقیقی تابع دی الکتریک در سه جهت منطبق نباشند بیانگر آثار غیرهمسانگردی کل ترکیب می باشد. در ناحیه ای از انرژی که قسمت حقیقی تابع دی الکتریک منفی است ترکیب رفتار فلزی داشته و ضریب بازتاب بزرگ است. [3].همان طور که از شکل ۲ مشاهده می شود این ترکیبات غیرهمسانگرد می باشند و دربازه تقریبا (۵–۱۵ev) قسمت حقیقی ثابت دی الکتریک منفی می باشد لذا که این ترکیبات رفتار فلز گونه داشته و ضریب بازتاب در این محدوده بزرگ می باشد.



شکل ۲–قسمت حقیقی تابع دی الکتریک ترکیبات $WSe_2, WS_2, MoS_2, MoSe_2$

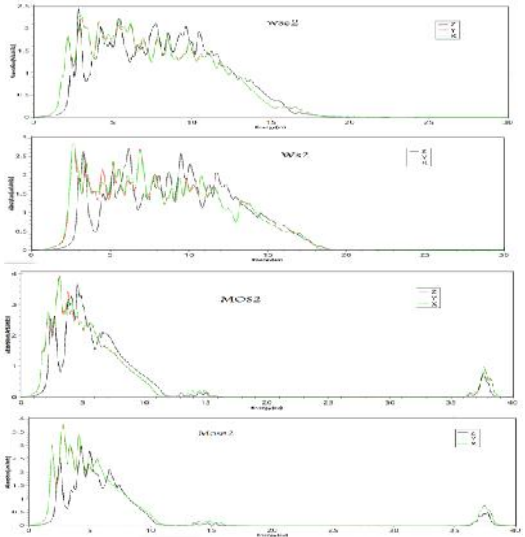
قسمت موهومی تابع دی الکتریک بیانگر طیف جذبی ماده است در نمودارهای شکل ۳ قسمت موهومی تابع دی الکتریک برای نور قطبیده فرودی در سه جهت x, y,z رسم شده است.همچنین می دانیم گذار بین نواری ناشی از تحریک در لبه های جذب و گذار درون نواری ناشی از پلاسمون های حجمی (جذب به وسیله الکترون های آزاد) است[3]. بنابراین افزایش تقریبا زیاد در مقادیر انرژی کم در نمودار بخش موهومی تابع دی الکتریک و همچنین رفتار تقریبا ثابت در انرژی های بالاتر تاییدی بر همین راه کارهای جذبی است.



شکل ۳ قسمت موهومی تابع دی الکتریک ترکیبات $WSe_2, WS_2, MoS_2, MoSe_2$

طیف جذبی:

طیف جذبی مربوط به گذارهای اپتیکی مجاز الکترون بین حالت های اشغال شده نوار ظرفیت و حالت های خالی نوار رسانش است. شکل ۴ طیف جذبی این ترکیبات را نمایش می دهد.

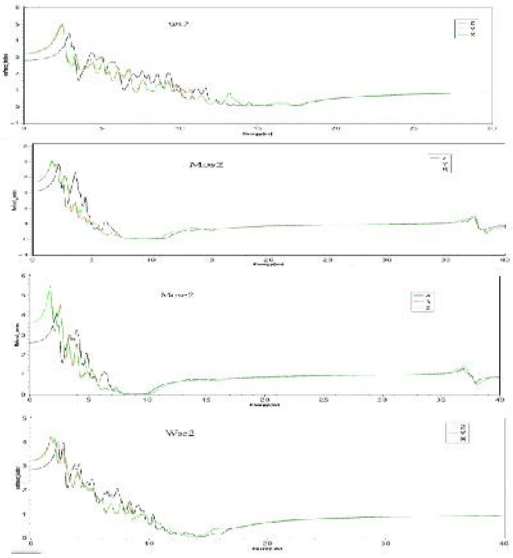


شکل ۴–طیف جذبی ترکیبات $WSe_2, WS_2, MoS_2, MoSe_2$

این مقاله به شرط در دسترس بودن در وبگاه www.psi.ir/?physics96 معتبر است.

ضریب شکست:

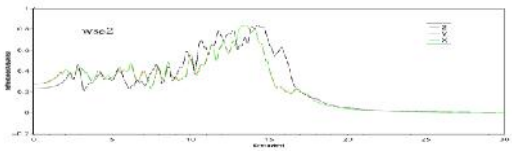
مقدار ضریب شکست در انرژی صفر را ضریب شکست استاتیکی می گویند. اگر ضریب شکست با افزایش فرکانس افزایش یابد این رفتار را پاشندگی عادی می گویند که رفتار معمول کلیه مواد شفاف است. در نواحی که شیب نمودار ضریب شکست منفی است مربوط به جذب می باشد. در این ناحیه نور با طول موج بلندتر در عبور از ماده بیشتر از نور با طول موج کوتاه می شکند که این رفتار را پاشندگی غیر عادی می گویند.شکل۶- نمودار ضریب شکست این ترکیبات را نمایش می دهد که شیب نمودار منفی است که مربوط به جذب می باشد.

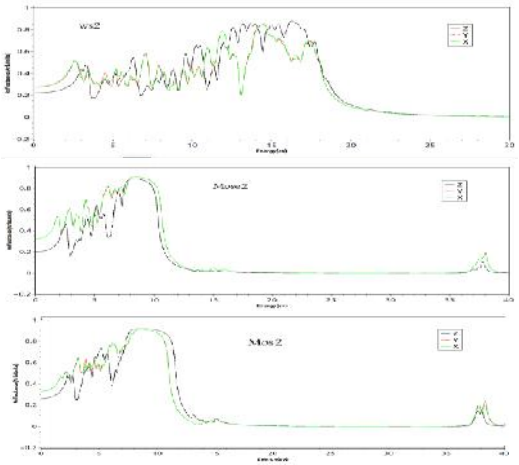


شکل ۶-ضریب شکست ترکیبات $WSe_2,WS_2,MoS_2,MoSe_2$.

بازتاب:

بازتاب ناشی از جریان قطبش القاشده در اثر نوسان الکترون های ظرفیت با اختلاف فاز ۱۸۰ درجه در اثر پرتو فرودی است و تداخل موج فرودی با امواجی که توسط الکترون های ظرفیت تابش می شود سبب ایجاد بازتاب می شود و البته در انرژی هایی که بیشترین جذب در آن اتفاق می افتد بیشینه بازتاب را نیز داریم بامقایسه نمودارهای بازتاب و جذب این مورد تایید می شود.شکل۷- نمودار بازتاب ترکیبات را نمایش می دهد.





شکل ۷- نمودار بازتاب ترکیبات $WSe_2,WS_2,MoS_2,MoSe_2$

نتیجه گیری:

خواص الکترونی محاسبه شده نشان می دهد که این ترکیبات نیمه رسانا می باشند .دارای گاف نواری مناسب در تبدیل انرژی خورشیدی می باشد.تابع دی الکتریک برای دو حالت قطبش موازی وعمود بر سطح رسم شده و نتایج نشان می دهد که خواص اپتیکی به جهت قطبش نور بستگی دارد و این ترکیبات ناهمسانگرد می باشند.در بررسی نمودارهای ضریب جذب وبازتاب برای ترکیبات WSe_2,WS_2 درگستره (2-18ev)مناسب بوده و این ضریب ها برای ترکیبات$MoS_2,MoSe_2$ در گستره (2-12ev) می باشد در خصوص ضریب شکست شیب نمودار برای ترکیبات درهمان گستره منفی می باشد که مربوط به جذب می باشد.

مراجع:

[1] jiang, Hong; « Electronic band structures of Molybdenum and Tungsten Dichalcogenides By the GW Approach»

[2] D.VOB, P.kruger, A. Mazur, and J. pollmann: «Atomic and electronic structure of WSe_2 from ab initio theory: Bulk crystal and thin film systems»

[3]حسینی, رقیه, رضایی رکن ابادی, محمود«, بررسی خواص الکترونی واپتیکی ژرمنن با استفاده از محاسبات اصول اولیه»

[4]ملک پور ,سینا ;انصاری خلخالی ,رضا ;درویزه , منصور ;صادقی, مصطفی «مطالعه خواص مکانیکی نانو صفحه تک لایه ی تنگستن دی سولفید»

این مقاله به شرط در دسترس بودن در وبگاه www.psi.ir/?physics96 معتبر است.