



بیست و هفتمین کنفرانس اپتیک و فوتونیک ایران و سیزدهمین کنفرانس مهندسی و فناوری فوتونیک ایران، دانشگاه سیستان و بلوچستان، زاهدان، ایران.  
۱۴-۱۶ بهمن ۱۳۹۹



کد مقاله : ۱-۲۴۹۰-۱۰-A

## مطالعه خواص اپتیکی انبوهه و تک لایه دی سولفید مولیبدن با استفاده از نظریه تابعی چگالی

معصومه منصوری، عبدالمحمد قلمبر دزفولی

گروه فیزیک، دانشگاه شهید چمران اهواز، اهواز

masoomemansouri473@gmail.com

a.ghalambor@scu.ac.ir

چکیده-در این مقاله خواص اپتیکی انبوهه و تک لایه دی سولفید مولیبدن نظیر تابع دی الکترونیک، ضریب شکست، ضریب خاموشی، بازتاب و دوشکستی با استفاده از نظریه تابعی چگالی محاسبه شده است. نتایج بدست آمده نشان می‌دهد که خواص اپتیکی در عبور از حالت انبوهه به تک لایه تغییر می‌کند.

کلید واژه- تابع دی الکترونیک، ضریب شکست، نظریه تابعی چگالی.

## Study of Optical Properties of Bulk and Monolayer $MoS_2$ by Density Functional Theory

Masoomemansouri, Abdol-Mohammad GhalamborDezfuli

Department of Physics, Shahid Chamran University of Ahvaz, Ahvaz

masoomemansouri473@gmail.com

a.ghalambor@scu.ac.ir

**Abstract-**In this article, the optical properties of bulk and monolayer  $MoS_2$  such as dielectric function, refraction index, extinction coefficient, reflection, and birefringence have been calculated using density functional theory. The obtained results show that the optical properties change in passing through bulk to monolayer.

Keywords: dielectric function, refractive index, density functional theory.

## مقدمه

از جمله نانو مواد دوبعدی می توان دی کالکوزن های عناصر واسطه ( $TMDC$ ) را نام برد که به خاطر خواص شان کاربردهای گسترده ای در وسایل نانو الکتریکی دارند. فرمول خانواده ترکیبات  $TMDC$  به صورت  $MX_2$  می باشد که  $M$  فلز واسطه و  $X$  کالکوزن می باشد [۱]. در این ترکیبات اتم های درون یک لایه با نیروهای قوی کوالانسی به یکدیگر متصل هستند که منجر به پایداری شیمیایی و گرمایی آنها می شود و به دلیل آثار سطحی قوی، خواص این مواد با تعداد لایه ها تغییر می کند [۲]. تک لایه های این گروه به دلیل خواص الکترونی، نوری، اپتوالکتریکی و شیمیایی منحصر به فردشان بیش از حالت انبوه آنها مورد توجه قرار گرفته است. امروزه از میان  $TMDC$  های مختلف دی سولفید مولیبدن ( $MoS_2$ ) به دلیل فراوانی زیاد در طبیعت، پایداری در معرض هوا و در دمای اتاق، نقطه ذوب بالا، همچنین کاربردهای صنعتی برجسته در روان کاری خشک، کاتالیست و سلول خورشیدی از نظر تجربی و نظری مورد توجه بسیاری از محققان قرار گرفته است [۳].

## روش محاسبات

با استفاده از بسته محاسباتی کوانتوم اسپرسو [۴] که در چارچوب نظریه تابعی چگالی و بسط تابع موج الکترون-های ظرفیت بر اساس امواج تخت می باشد، خواص اپتیکی دی سولفید مولیبدن و تک لایه ای آن مورد بررسی قرار گرفته است. با توجه به اینکه فاز  $2H$  این ماده نسبت به دو فاز دیگر آن پایدارتر و در طبیعت دارای فراوانی بیشتری است، محاسبات در راستای بررسی خواص اپتیکی این فاز می باشد. پس از آزمون های همگرایی انرژی قطع بسط تابع موج تخت  $70$  ریدبرگ و مش یکنواخت  $10^*10^*10$  نقطه در فضای وارون به منظور انتگرال گیری در ناحیه اول بریلون انتخاب شده است. با انجام محاسبات برای انبوهه دی سولفید مولیبدن  $a = b = 3.19$  و  $c = 13.21$

آنکستروم (در توافق با نتایج تجربی و تئوری قبلی [۵ و ۳]) بدست آمده است. اکنون با بهره گیری از مقادیر بدست آمده برای  $a$  و  $c$  و با استفاده از کد  $PWSCF$  تابع دی الکتریک محاسبه می شود. با استفاده از تابع دی الکتریک که برای توصیف پاسخ بلور به میدان الکترومغناطیسی به کار می رود، می توان ویژگی های اپتیکی ماده، رسانندگی الکتریکی و کاربردهای تکنولوژی بسیاری را تعیین کرد. این تابع از دو سهم حقیقی و موهومی به صورت رابطه (۱) تشکیل شده است [۶]:

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_1(\omega) + i\varepsilon_2(\omega) \quad (1)$$

بخش موهومی تابع دی الکتریک،  $\varepsilon_2(\omega)$  توسط رابطه زیر محاسبه می شود:

$$\varepsilon_2(\omega) = \frac{Ve^2}{2\pi m^2 \omega^2} \int d^3k \sum_{nn} |\langle \vec{K}_n | \vec{P} | \vec{K}_n \rangle|^2 f(\vec{K}_n) [1 - f(\vec{K}_n)] \delta(E_{\vec{K}_n} - E_{\vec{K}_n} - \hbar\omega) \quad (2)$$

در این رابطه  $\omega$  انرژی فوتون فرودی،  $|\vec{K}_n|$  ویژه تابع با ویژه مقدار  $E_{kn}$ ،  $P(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x})$  عملگر تکانه و  $f(\vec{K}_n)$  تابع توزیع فرمی دیراک هستند. بخش حقیقی تابع دی الکتریک  $\varepsilon_1(\omega)$  با استفاده از بخش موهومی آن توسط تبدیلات کرامرز-کرونیکر به صورت زیر بدست می آید:

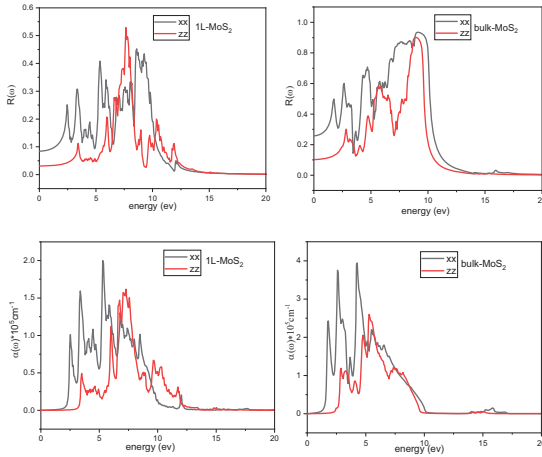
$$\varepsilon_1(\omega) = 1 + \frac{2}{\pi} \int_0^\infty \frac{\varepsilon_2(\omega') \omega' d\omega'}{\omega'^2 - \omega^2} \quad (3)$$

پاسخ های اپتیکی دی سولفید مولیبدن و تک لایه ای آن به موج الکترومغناطیس در صفحه  $XY$  (موازی) و عمود بر صفحه  $XY$  متفاوت است. لذا تانسور تابع دی الکتریک دو مولفه مستقل  $\varepsilon^{xx}(\omega)$  و  $\varepsilon^{zz}(\omega)$  به صورت زیر دارد.

$$\varepsilon^{xx}(\omega) = \varepsilon_1^{xx}(\omega) + i\varepsilon_2^{xx}(\omega) \quad (4)$$

$$\varepsilon^{zz}(\omega) = \varepsilon_1^{zz}(\omega) + i\varepsilon_2^{zz}(\omega) \quad (5)$$

ضرایب شکست  $n(\omega)$ ، خاموشی  $k(\omega)$ ، بازتابش  $R(\omega)$  جذب  $\alpha(\omega)$  با استفاده از بخش حقیقی و موهومی تابع



شکل ۱: مقایسه بخش حقیقی و موهومی تابع دی الکتریک، ضریب شکست، دو شکستی، خاموشی، بازتاب و ضریب جذب در انبوهه و تک لایه دی سولفید مولیبدن.

با توجه به نتایج بدست آمده برای سهم حقیقی تابع دی الکتریک دیده می‌شود که این نمودار در محدوده‌ای از انرژی دارای مقادیر منفی است که حاکی از این است که در این ناحیه فرایندهای جذب و اتلاف صورت می‌گیرد. از طرفی تابع دی الکتریک استاتیک با محاسبه تابع دی الکتریک در حد انرژی‌های پایین به دست می‌آید. بخش‌های حقیقی  $\epsilon_1^{xx}(0)$  و  $\epsilon_1^{zz}(0)$  تابع دی الکتریک استاتیک برای دی سولفید مولیبدن و تک لایه آن به ترتیب برابر است با (۳.۸ و ۹.۴) و (۲.۱ و ۳.۳). نتایج نمودارهای بخش موهومی حاکی از آن است که در ابتدا سهم موهومی تابع دی الکتریک دارای تغییرات آرامی است. این تغییرات آرام که ناشی از جذب فوتون های کم انرژی است می‌تواند منجر به گذارهای درون نواری شود سپس سهم موهومی به طور ناگهانی افزایش می‌یابد که این امر بیانگر جذبی است که به دنبال گذارهای بین نواری اتفاق می‌افتد و الکترون ها با بدست آوردن این انرژی گاف نواری را طی کرده و از نوار ظرفیت وارد نوار رسانش می‌شوند [۷]. با توجه به نتایج بخش حقیقی و موهومی کاهش مقدار تابع دی الکتریک و افزایش گستره انرژی از حالت انبوهه به تک لایه کاملاً مشهود است. از طرفی جذر سهم حقیقی تابع دی الکتریک در انرژی صفر منجر

دی الکتریک به کمک روابط زیر قابل محاسبه‌اند:

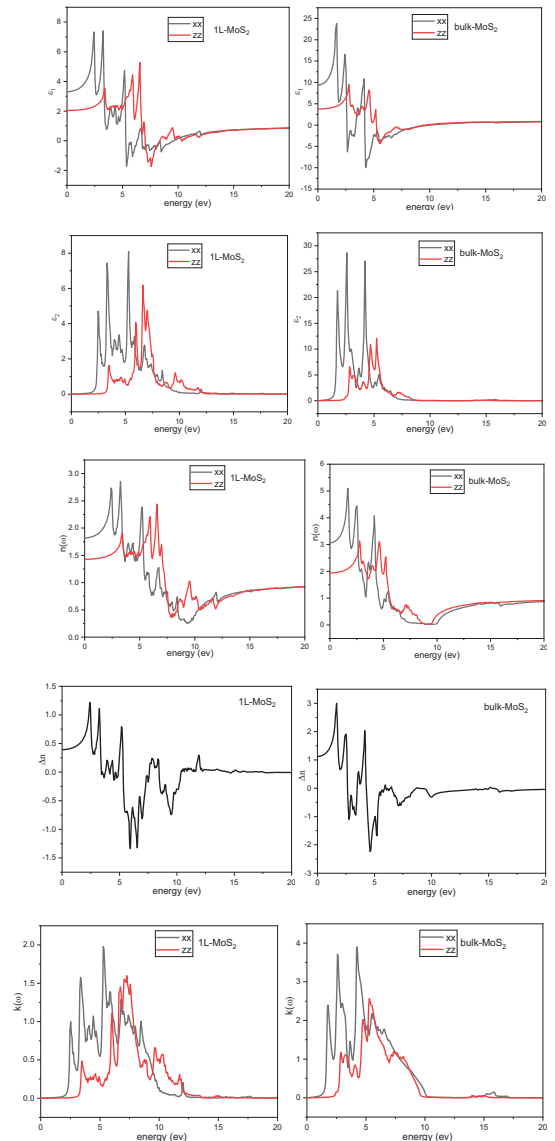
$$n(\omega) = \left( \frac{\sqrt{\epsilon(\omega)} + \epsilon_1}{2} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (6)$$

$$k(\omega) = \left( \frac{\sqrt{\epsilon(\omega)} - \epsilon_1}{2} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (7)$$

$$R(\omega) = \frac{(n-1)^2 + k^2}{(n+1)^2 + k^2} \quad (8)$$

$$\alpha(\omega) = 2 \frac{\omega k(\omega)}{c} \quad (9)$$

ضرایب ذکر شده در صفحه  $XY$  و عمود بر صفحه  $XY$  محاسبه و نتایج حاصل در نمودارهای زیر رسم شده‌اند.



قرار گرفت. محاسبات در چارچوب نظریه تابعی چگالی انجام شده است. تابع دی الکتریک برای دو حالت قطبش موازی و عمود بر سطح رسم شده و نتایج نشان می‌دهد که خواص اپتیکی به جهت قطبش نور بستگی دارد و نشان‌دهنده ناهمسانگرد بودن دی سولفید مولیبدن در دو حالت انبوهه و تک لایه می‌باشد.

### سپاسگزاری

مراتب تقدیر و تشکر صمیمانه خود را جهت استفاده از امکانات پردازی مرکز پردازش‌های سریع دانشگاه شهید چمران اهواز اعلام می‌نماییم.

### مرجع‌ها

- [1] A. Bano, N. K. Gaur, "Interfacial coupling effect on electron transport in  $MoS_2/SrTiO_3$  heterostructure: An Ab initio study", Scientific reports, Vol. 8, No. 1, pp. 1-8, 2018.
- [2] J. Pešić, J. Vujin, T. Tomašević-Ilić, M. Spasenović, R. Gajić, "DFT study of optical properties of  $MoS_2$  and  $WS_2$  compared to spectroscopic results on liquid phase exfoliated nanoflakes", Optical and Quantum Electronics, Vol. 50, No. 7, pp. 291-298, 2018.
- [3] Q. H. Wang, K. Kalantar-Zadeh, A. Kis, J. N. Coleman, and M. S. Strano, "Electronics and optoelectronics of two-dimensional transition metal dichalcogenides", Nature nanotechnol, Vol. 7, No. 11, pp. 699-712, 2012.
- [4] [www.quantum-espresso.org](http://www.quantum-espresso.org)
- [5] R. M. Khalil, F. Hussain, A. Manzoor Rana, M. Imran, G. Murtaza, "Comparative Study of Polytype 2H- $MoS_2$  and 3R- $MoS_2$  Systems by employing DFT", Systems and Nanostructures, Vol. 106, pp. 338-345, 2018.
- [6] T. V. Vu, N. V. Hieu, H. V. Phuc, N. N. Hieu, H. D. Bui, M. Idrees, B. Amin, "Graphene/WSeTe van der Waals heterostructure: controllable electronic properties and schottky barrier via interlayer coupling and electric field", Applied Surface Science, Vol. 507, pp. 145-152, 2020.
- [7] J. Q. Hu, X. H. Shi, S. Q. Wu, K. M. Ho, Z. Zhu, "dependence of electronic and optical properties of multilayers on the interlayer coupling and Van Hove Singularity", Nanoscale Research Letters, Vol. 14, No. 1, pp. 288-302, 2019.

به ضریب شکست استاتیک سیستم می‌شود که از رابطه (۱۰) به دست می‌آید:

$$n_0(\omega) = \sqrt{\epsilon_1(0)} \quad (10)$$

ضریب شکست استاتیک برای انبوهه و تک لایه دی سولفید مولیبدن به ترتیب برابر است با (۳.۰۷ و ۱.۹۵) و (۱.۸۲ و ۱.۴۵). با توجه به این مقادیر و همچنین نمودارهای رسم شده کاهش ضریب شکست از حالت توده به تک لایه منجر به کاهش اختلاف ضریب شکست خواهد شد، که این کاهش در نمودارهای  $\Delta n$  (که تحت عنوان ضریب دو شکستی شناخته می‌شود) مشخص شده است. در نواحی که ضریب شکست با افزایش فرکانس افزایش می‌یابد، (که رفتار معمول کلیه مواد شفاف است) پاشندگی عادی است. در نواحی که ضریب شکست منفی است منجر به افزایش جذب نور در طول موج‌های بلندتر نسبت به کوتاه‌تر می‌شود که این رفتار را می‌توان پاشندگی غیر عادی سیستم دانست. با توجه به نتایج نمودارهای رسم شده برای ضریب خاموشی کاملاً مشخص است که با گذار از حالت انبوهه به تک لایه ضریب خاموشی کاهش می‌یابد. بنابراین موج الکترومغناطیسی از تک لایه نسبت به حالت انبوهه راحت‌تر عبور می‌کند. از طرفی با توجه به رابطه (۹) که وابستگی مستقیم ضریب جذب به ضریب خاموشی را نشان می‌دهد، نمودارهای ضریب جذب مشابه با ضریب خاموشی با عبور از حالت انبوهه به تک لایه کاهش یافته و گستره‌ی انرژی افزایش می‌یابد و نمودارهای رسم شده برای بازتاب نیز همین نتیجه را نشان می‌دهد. بنابراین تمامی نتایج گزارش شده نشان‌دهنده این است که خواص اپتیکی در تک لایه با کاهش ضخامت از خواص متناظر در انبوهه فاصله می‌گیرد که این امر بدلیل افزایش آثار سطحی است.

### نتیجه‌گیری

در این مقاله ویژگی‌های اپتیکی در دو ساختار انبوهه و تک لایه دی سولفید مولیبدن مورد بررسی و مقایسه