

## مطالعه ابتدا به ساکن ویژگی های اپتیکی و مغناطیسی تنگستن دی سولفید

حمدا... صالحی\*، نسیم ژولایی باخدا و پیمان امیری

گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه شهید چمران اهواز، اهواز، ایران

(دریافت مقاله: ۱۳۹۷/۱۲/۲۸ - دریافت نسخه نهایی: ۱۳۹۸/۹/۱۸)

DOI: 10.47176/jame.38.4.19054

**چکیده**- در این پژوهش، خواص اپتیکی تنگستن دی سولفید شامل تابع دی الکتریک، ضریب شکست استاتیکی، سهم موهومی تابع دی الکتریک، شکاف اپتیکی، طیف اتلاف انرژی و خواص مغناطیسی آن مطالعه شده است. محاسبات توسط بسته محاسباتی کوانتوم اسپرسو بر پایه نظریه تابعی چگالی و با روش شبه پتانسیل انجام شده است. ضرایب شکست استاتیکی مربوط به این ترکیب در راستاهای مختلف  $x$  و  $z$  به ترتیب معادل  $۳/۶۶$  و  $۲/۵۵$  محاسبه شد. اندازه شکاف اپتیکی حاصل از سهم موهومی تابع دی الکتریک، معادل  $۱/۴۵$  الکترون ولت محاسبه شد. همچنین انرژی پلاسمون حجمی حاصل از طیف اتلاف انرژی در راستاهای  $x$  و  $z$  به ترتیب برابر با  $۱۷/۹۵$  الکترون ولت و  $۱۷/۲۵$  الکترون ولت به دست آمد.

واژه های کلیدی: تنگستن دی سولفید، نظریه تابعی چگالی، خواص اپتیکی

## Ab-Initio Study of Optical and Magnetic Properties of Tungsten Disulfide

H. Salehi\*, N. Zhulayi Bakhoda and P. Amiri

Department of Physics, Faculty of Science, Shahid Chamran University of Ahvaz, Ahvaz, Iran.

**Abstract:** *In this research, the optical properties of tungsten disulfide including dielectric function, the static refractive index, the imaginary part of the dielectric function, optical band gap, energy loss spectrum and its magnetic properties have been studied. Calculations have been done by using Quantum Espresso package which is based on density functional theory and pseudo-potential technique. The static refractive indices of this compound at different  $x$  and  $z$  directions were calculated 3.66 and 2.55, respectively. The amount of optical band gap, obtained from the imaginary part of dielectric function, was estimated to be 1.45 eV. In addition, bulk plasmon energy, obtained from energy loss spectrum at  $x$  and  $z$  directions, were obtained to be 17.95 eV and 17.25 eV, respectively.*

**Keywords:** *Tungsten disulfide, Density functional theory, Optical properties.*

\* : مسئول مکاتبات، پست الکترونیکی: salehi\_h@scu.ac.ir

## ۱- مقدمه

محاسبات از آنها استفاده شده است برای اتم  $W$  برابر  $6s^2$ ،  $5d^4$  و  $5p^6$  و برای اتم  $S$  برابر  $3p^4$  و  $3s^2$  است. مقادیر بهینه ثابت‌های شبکه مورد استفاده در ساختار هگزاگونال برابر با  $3/23$  آنگستروم  $a$  و  $65/13$  آنگستروم  $c$  است. در انجام محاسبات دقت همگرایی انرژی کل برابر با  $1 \times 10^{-7}$  ریدبرگ و با انجام ۱۴ چرخه در نظر گرفته شده است. مقادیر بهینه مربوط به انرژی قطع تابع موج و انرژی قطع چگالی بار به ترتیب برابر با  $100$  ریدبرگ و  $400$  ریدبرگ محاسبه شد. نمونه‌برداری از منطقه اول بریلوئن با یک توزیع دستی از نقاط  $k$  و با در نظرگیری مسیر  $\Gamma-M-K-\Gamma$  صورت گرفت.

## ۳- نتایج

### ۳-۱- سهم حقیقی تابع دی‌الکتریک

برای دستیابی به خواص اپتیکی یک جامد باید رفتار کمیت‌های اپتیکی مختلف برحسب انرژی تابش مورد بررسی قرار گیرد. یکی از مهم‌ترین کمیت‌های اپتیکی، تابع دی‌الکتریک مختلط است. این تابع نقطه شروع مناسبی برای دستیابی به سایر خواص اپتیکی است و از دو سهم حقیقی  $\epsilon_1(\omega)$  و موهومی  $\epsilon_2(\omega)$  تشکیل شده است که با رابطه (۱) نشان داده می‌شود [۹]:

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_1(\omega) + i\epsilon_2(\omega) \quad (1)$$

رابطه ضریب شکست استاتیکی با سهم حقیقی تابع دی‌الکتریک به صورت رابطه (۲) است که در آن  $k(\omega)$  ضریب خاموشی است:

$$\epsilon_1(\omega) = n^2(\omega) - k^2(\omega) \quad (2)$$

حد بسامد صفر سهم حقیقی تابع دی‌الکتریک از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است و جذر آن، ضریب شکست استاتیک ترکیب را نتیجه می‌دهد:

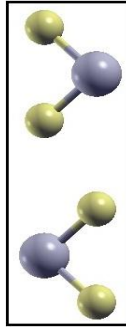
$$n(0) = \sqrt{\epsilon_1(0)} \quad (3)$$

در ساختار هگزاگونال ثابت‌های شبکه  $a$  و  $b$  با هم برابر و با ثابت شبکه  $c$  اختلاف دارند. بنابراین مؤلفه‌های اصلی تابع دی‌الکتریک در این ساختار به صورت  $\epsilon_{xx} = \epsilon_{yy} \neq \epsilon_{zz}$  هستند. نتیجه می‌شود ساختار هگزاگونال در راستای  $x$  و  $y$  همسانگرد است.

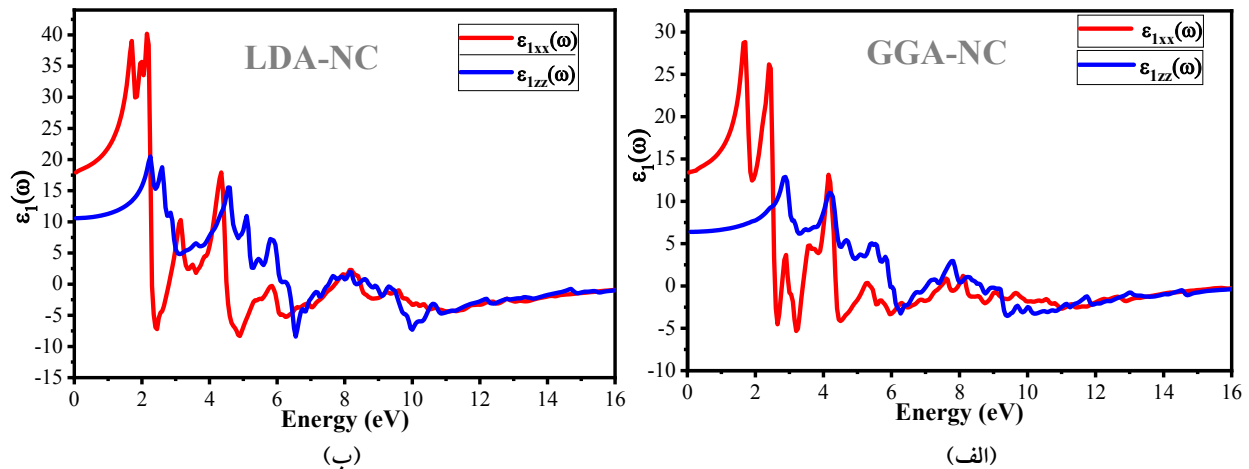
ترکیب تنگستن دی‌سولفید با فرمول  $WS_2$  یک نیم‌رسانا با شکاف نواری غیرمستقیم است. این ترکیب دارای ساختار هگزاگونال و گروه فضایی  $P6_3/mmc$  است. سلول واحد آن دارای شش اتم است که در شکل (۱) سلول واحد این ترکیب نشان داده شده است. تنگستن دی‌سولفید ساختاری لایه‌ای داشته که در هر لایه اتم تنگستن با اتم‌های  $S$  پیوندی کووالانسی دارد. پیوندهای  $S-W-S$  مربوط به لایه‌های مجاور ضعیف‌تر بوده و از جنس نیروی واندروالس است [۱ و ۲]. لایه‌های انباشته شده روی هم در این ساختار به گونه‌ای هستند که در هر لایه در امتداد محور انباشتگی اتم‌های  $W$  با یک دوره تناوب بعد از اتم‌های  $S$  قرار گرفته‌اند، که این موجب می‌شود لایه به‌طور کامل از حالت سطح منحرف شود [۳ و ۴]. داده‌های مربوط به پراش الکترون نشان می‌دهد که اتم‌های فلز در یک فرم زنجیری زیگزاگی با فاصله کوتاه  $W-W$  برابر  $2/74$  آنگستروم قرار گرفته‌اند [۵]. محاسبات نظری لبه‌های زیگزاگی با سولفور فراوان را برای تک‌لایه‌های تنگستن دی‌سولفید نشان می‌دهد که موجب می‌شود این تک‌لایه‌ها دارای حالت‌های لبه‌فلزی باشند که پاسخ نوری تولید می‌کند و این چشمه‌های نوری با مقیاس نانو می‌تواند کاربردهای زیادی مثل ابزارهای الکترونی داشته باشد [۶]. رسم ساختار نواری تنگستن دی‌سولفید در حالت دوبعدی توسط بسته محاسباتی کوانتوم اسپرسو، پدیده نوارهای تو در تو را در نواحی وسیعی از منطقه بریلوئن نشان می‌دهد که این قابلیت ساختار نواری منجر به پاسخ نوری بزرگ و قله‌هایی در رسانندگی اپتیکی می‌شود [۷].

## ۲- روش محاسباتی

در این بسته محاسباتی معادلات کوهن-شم با استفاده از روش شبه‌پتانسیل و بسط تابع موج الکترون‌های ظرفیت بر اساس امواج تخت به صورت خودسازگار حل می‌شوند [۸]. شبه‌پتانسیل‌های مورد استفاده به روش فوق نرم و با استفاده از تقریب  $GGA$  ساخته شده‌اند. اوربیتال‌های ظرفیتی که در این



شکل ۱- سلول واحد تنگستن دی سولفید (کره‌های بزرگ‌تر بیانگر اتم تنگستن و کره‌های کوچک‌تر بیانگر اتم گوگرد هستند).



شکل ۲- تغییرات سهم حقیقی تابع دی‌الکتریک نسبت به انرژی فوتون‌های فرودی در راستای x و z در تقریب‌های الف (GGA-NC) و ب (LDA-NC) (رنگی در نسخه الکترونیکی)

محدوده کمی از انرژی دارای مقادیر منفی است. در ناحیه‌ای که  $\epsilon_1$  منفی است امواج منتشر نمی‌شوند و فرایندهای جذب و اتلاف صورت می‌گیرد. در تقریب‌های شیب تعمیم‌یافته با شبه‌پتانسیل بار پایسته (GGA-NC) و چگالی موضعی با شبه‌پتانسیل بار پایسته (LDA-NC) به ترتیب در انرژی‌های بالاتر از ۱۳/۵ و ۱۱/۲۵ الکترون‌ولت سامانه در هر دو راستای x و z از خود رفتاری همسانگرد نشان می‌دهد.

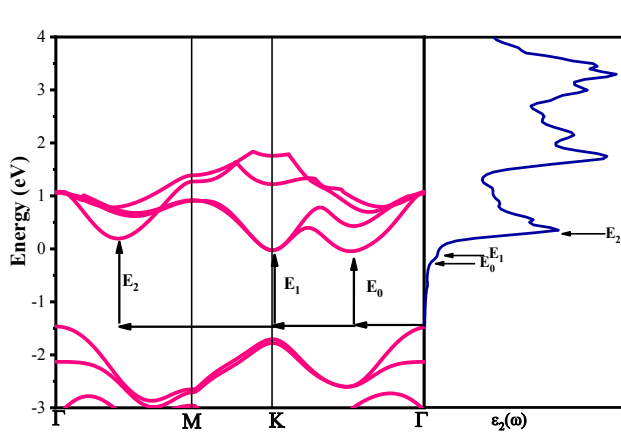
### ۲-۳- سهم موهومی تابع دی‌الکتریک

در شکل (۳) نمودار سهم موهومی تابع دی‌الکتریک در راستای x و z و همچنین تطابق نمودار سهم موهومی با ساختار نواری در تقریب GGA-NC آورده شده است. همان‌طور که در شکل نشان داده شده است، سهم موهومی تابع دی‌الکتریک تا قبل از انرژی ۱/۴۵ الکترون‌ولت دارای تغییراتی آرام است که این ناشی

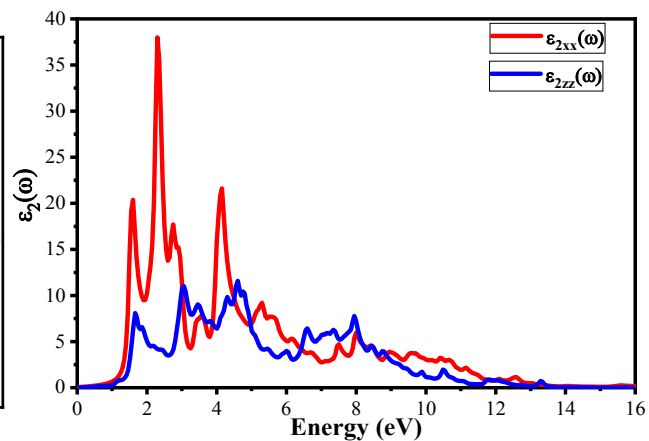
در شکل (۲) تغییرات سهم حقیقی تابع دی‌الکتریک نسبت به انرژی فوتون‌های فرودی در راستای x و z نشان داده شده است. با توجه به شکل (۲)، نتایج ضریب شکست استاتیکی در راستای x و z با تقریب‌های مختلف همراه نتایج دیگران در جدول (۱) آورده شده است. قابل ذکر است در مورد سهم حقیقی تابع دی‌الکتریک در راستای z به صورت تجربی مطالعه‌ای انجام نشده است. علاوه بر این تفاوت بین نتایج تجربی و داده‌های به دست آمده در این کار می‌تواند ناشی از استفاده از شبه‌پتانسیل‌ها باشد که خود ناشی از ناتوانی نظریه تابعی چگالی در محاسبه دقیق جمله تبدیلی-همبستگی است و مشاهده می‌شود که شبه‌پتانسیل‌های شیب تعمیم‌یافته نتایج بهتری به دست آوردند. از نمودارهای سهم حقیقی دیده می‌شود که این نمودارها در

جدول ۱- نتایج ضریب شکست استاتیکی در دو راستای x و z و مقایسه با نتایج دیگران

تقریب شیب تعمیم یافته	تقریب چگالی موضعی	کار نظری [۱۰]	کار تجربی [۱۲]	کمیت‌های محاسبه شده
۱۳٫۴۱	۱۷٫۹۲	۱۲٫۸۲	۱۳٫۶۹	$\epsilon_{xx}(0)$
۳٫۶۶	۴٫۲۳	۳٫۵۸	۳٫۷	$n_{xx}$
۱٫۰۳	۱۴٫۴۱	۳٫۲۴	.....	درصد خطای $n_{xx}$ نسبت به مقدار تجربی
۶٫۵۴	۱۰٫۵۹۰	۸٫۱۷۶	.....	$\epsilon_{zz}(0)$
۲٫۵۷	۳٫۲۵	۲٫۸۶	.....	$n_{zz}$



(ب)



(الف)

شکل ۳- الف) تغییرات سهم موهومی تابع دی‌الکتریک نسبت به انرژی فوتون‌های فرودی در راستای x و z، ب) تطابق سهم موهومی تابع دی‌الکتریک با ساختار نواری در تقریب GGA-NC (رنگی در نسخه الکترونیکی)

این تقریب نیز شکاف به دست آمده از ساختار نواری و چگالی حالت‌ها را تأیید می‌کند.

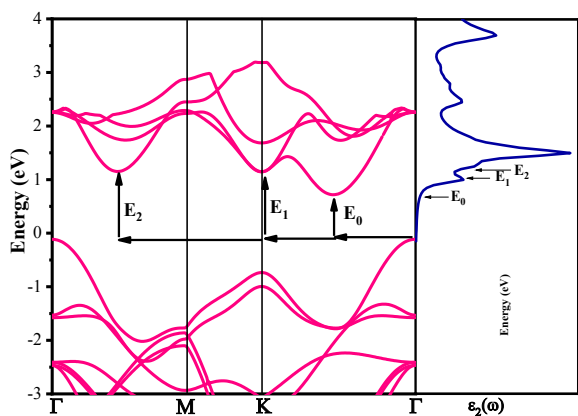
با توجه به قسمت (ب) هر دو شکل (۳) و (۴) مشاهده می‌شود مسیر گذارهای احتمالی در هر دو تقریب یکسان است. نتایج شکاف اپتیکی به دست آمده از سهم موهومی تابع دی‌الکتریک با نتایج شکاف نواری موجود در مطالعات تجربی و نظری مطابقت دارد [۱۱، ۱۳ و ۱۴] و خاصیت نیم‌رسانایی ترکیب تنگستن دی‌سولفید را نشان می‌دهد. به منظور انطباق شکاف اپتیکی با شکاف نواری، نمودار ساختار نواری تنگستن دی‌سولفید در شکل (۵) نشان داده است.

### ۳-۳- طیف اتلاف انرژی الکترونی

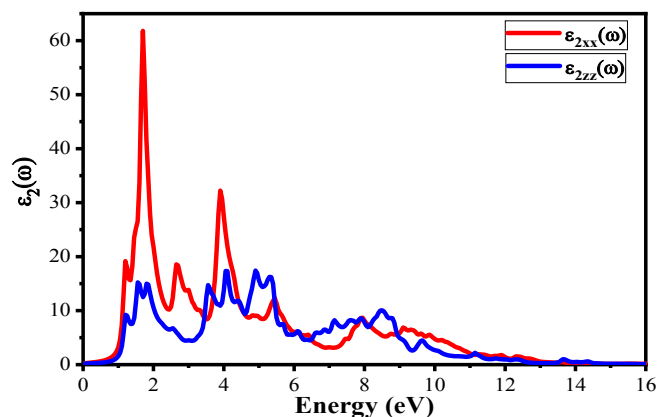
تابع اتلاف، سهم موهومی معکوس تابع دی‌الکتریک است و از

از جذب فوتون‌های کم‌انرژی است و منجر به گذارهای درون‌نواری می‌شود. بعد از این انرژی، سهم موهومی به صورت ناگهانی افزایش می‌یابد. این امر بیانگر جذبی است که به دنبال آن گذارهای میان‌نواری رخ می‌دهد. این انرژی برابر با اندازه شکاف اپتیکی است. سه نقطه در نمودار با نام‌های  $E_0$  و  $E_1$  و  $E_2$  نشان داده شده‌اند.  $E_0$  انرژی لازم برای عبور از شکاف را نشان می‌دهد که بیانگر شکاف اپتیکی بلور است و دو نقطه  $E_1$  و  $E_2$  انرژی مورد نیاز برای گذارهای احتمالی بعدی را نشان می‌دهند. از تطابق نمودار سهم موهومی با ساختار نواری می‌توان راستای گذارهای احتمالی را دریافت که در شکل مشخص شده‌اند.

در شکل (۴) نمودارهای قبل در تقریب LDA-NC رسم شده‌اند. مشاهده می‌شود نمودار سهم موهومی تا قبل از انرژی ۰٫۹۵ الکترون‌ولت دارای تغییراتی آرام است. شکاف اپتیکی در

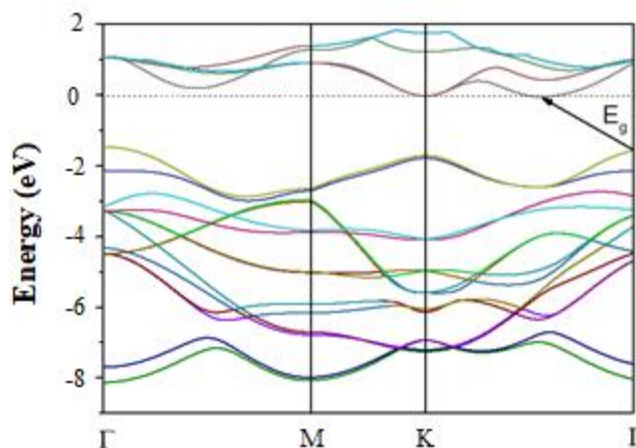


(ب)



(الف)

شکل ۴- الف) تغییرات سهم موهومی تابع دی الکتریک نسبت به انرژی فوتون‌های فرودی و ب) تطابق سهم موهومی تابع دی الکتریک با ساختار نواری در تقریب LDA-NC (رنگی در نسخه الکترونیکی)



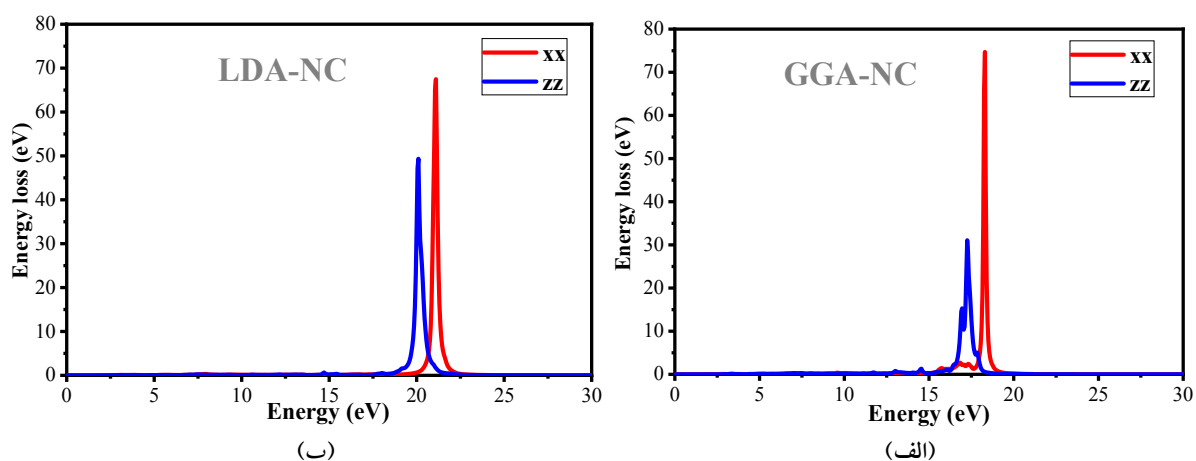
شکل ۵- ساختار نواری ترکیب تنگستن دی سولفید (انرژی صفر منطبق بر انرژی فرمی در نظر گرفته شده است).

انرژی ۱۷/۹۵ الکترون‌ولت و در راستای zz در انرژی ۱۷/۲۵ الکترون‌ولت قرار گرفته است که چندان هم دور از انتظار نیست، زیرا در هر دو راستا در این انرژی، سهم حقیقی منفی و سهم موهومی تابع دی الکتریک بسیار ناچیز است.

$$\text{eels} = -\text{Im} \left[ -\frac{1}{\epsilon(\omega)} \right] = \frac{\epsilon_2}{\epsilon_1^2 + \epsilon_2^2} \quad (4)$$

در تقریب LDA-NC نیز قله پلاسمونی در راستای xx و zz به ترتیب در انرژی‌هایی برابر ۲۱/۱ الکترون‌ولت و ۲۰/۱ الکترون‌ولت قرار دارد که چندان هم دور از انتظار نیست، زیرا در هر دو راستا در این انرژی، سهم حقیقی منفی و سهم موهومی تابع دی الکتریک بسیار ناچیز است.

رابطه زیر به دست می‌آید [۱۵]. طیف اتلاف دربردارنده تحریک دسته جمعی الکترون‌های ظرفیت (پلاسمون‌ها) به داخل حالت‌های اشغال شده در نوار رسانش است. شاخص‌ترین قله در طیف اتلاف انرژی به عنوان قله پلاسمونی شناخته می‌شود که انرژی در این نقطه، انرژی پلاسمون حجمی نامیده می‌شود و بیانگر برانگیختگی‌های جمعی چگالی بار در محیط است. این انرژی منطبق بر بسامدهایی است که  $\epsilon_1(\omega)$  در آنها منفی و مقدار  $\epsilon_2(\omega)$  کوچک است و بنابراین دامنه اتلاف انرژی بزرگ است. در شکل (۶) طیف اتلاف انرژی در بازه صفر تا ۳۰ الکترون‌ولت مربوط به دو راستای x و z در تقریب‌های LDA-NC و GGA-NC رسم شده است. در تقریب GGA-NC بلندترین قله در راستای xx در



شکل ۶- طیف اتلاف انرژی تنگستن دی سولفید در تقریب‌های: الف) GGA-NC و ب) LDA-NC (رنگی در نسخه الکترونیکی)

جدول ۲- انرژی کل محاسبه شده در نظم‌های مغناطیسی مختلف

غیرمغناطیس	پادفرومغناطیس	فرومغناطیس	نظم‌های مغناطیسی
-۱۱۲٫۷۲۳۲۸۴	-۱۱۲٫۷۲۳۲۷۹	-۱۱۲٫۷۲۳۲۷۸	انرژی (برحسب ری‌دبرگ)

فرومغناطیس و پادفرومغناطیس و غیرمغناطیس در جدول (۲) آورده شده است.

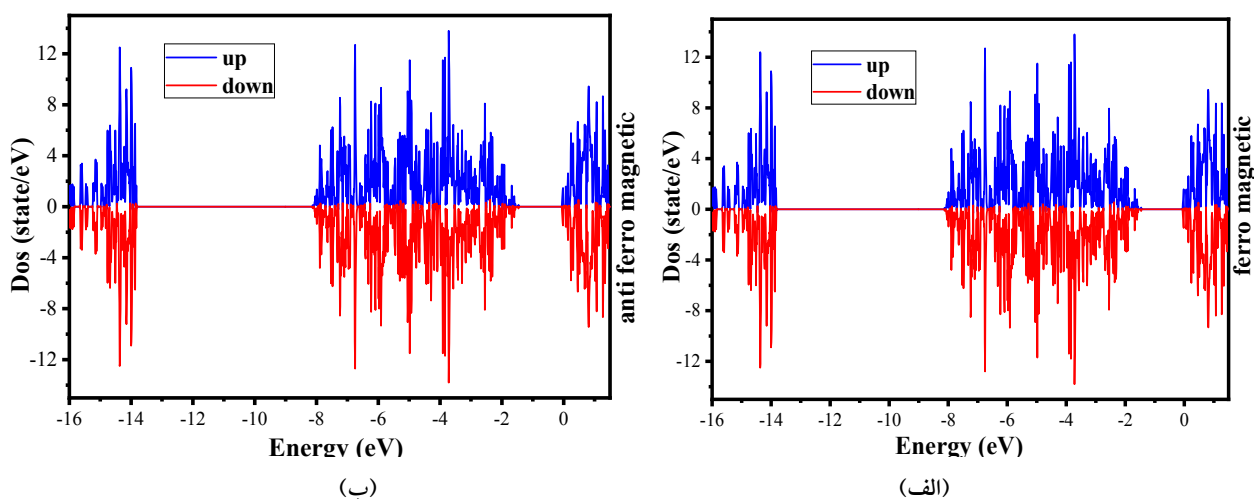
مشاهده می‌شود که ترکیب تنگستن دی سولفید هیچ خاصیت مغناطیسی ندارد و در حالت غیرمغناطیس پایدارترین حالت را دارا است که با دیگر داده‌های موجود سازگاری دارد [۱۶]. همچنین اگر چگالی حالت‌های کل را در هر دو حالت فرومغناطیس و پادفرومغناطیس رسم کنیم مشاهده می‌شود که با در نظر گرفتن میدان مغناطیسی هیچ اسپین و جهت‌گیری خاصی ارجحیت نداشته و نمودار چگالی حالت‌های کل برای اسپین بالا و پایین کاملاً با هم برابر است و هیچ تفاوتی بین آنها وجود ندارد و جهت‌گیری خاصی اتفاق نیفتاده است. در شکل (۷) نمودار چگالی حالت‌های کل برای اسپین بالا و پایین در هر دو حالت فرومغناطیس و پادفرومغناطیس آورده شده است.

#### ۴- نتیجه‌گیری

در این کار ویژگی‌های اپتیکی و مغناطیسی ترکیب تنگستن دی سولفید با استفاده از بسته محاسباتی کوانتوم اسپرسو و با تقریب‌های مختلف انجام شده است. محاسبات انجام شده روی

#### ۳-۴- خواص مغناطیسی

واکنشی که مواد مختلف به میدان مغناطیسی از خود نشان می‌دهند در علامت و بزرگی کمیت پذیرفتاری مغناطیسی، نمود پیدا می‌کند و مواد در برابر عبور میدان مغناطیسی رفتار متفاوتی از خود نشان می‌دهند. لذا بر همین اساس مواد مغناطیسی را می‌توان به سه دسته دیامغناطیس، پارامغناطیس و فرومغناطیس تقسیم کرد. در بررسی خواص مغناطیسی یک ترکیب نرم‌افزار کوانتوم اسپرسو قادر به توصیف نظم‌های فرومغناطیس و پادفرومغناطیس است. مواد فرومغناطیس دارای مغناطیدگی خودبه‌خود هستند و جهت‌گیری اسپین‌ها در جهتی یکسان رخ می‌دهد اما موادی نیز وجود دارند که در آنها جهت‌گیری اسپین‌ها در یک راستا نیست بلکه نیمی از الکترون‌ها در جهت اسپین بالا و بقیه آنها در جهت اسپین پایین قرار می‌گیرند که این امر منجر به ایجاد موادی موسوم به مواد پادفرومغناطیس می‌شود. در این دسته از مواد مغناطش کل صفر است. برای مشخص شدن حالت مغناطیسی ماده باید در میان نظم‌های مغناطیسی مختلف پایدارترین حالت سامانه از لحاظ انرژی را برگزید. انرژی ترکیب تنگستن دی سولفید در حالت‌های



شکل ۷- نمودار چگالی حالت‌های کلی برای اسپین بالا و پایین در حالت‌های: الف) فرومغناطیس و ب) پادفرومغناطیس

از انطباق ساختار نواری با سهم موهومی تابع دی‌الکتریک و همچنین برابری تقریبی شکاف نواری با شکاف اپتیکی است. انرژی پلاسمون حجمی نتیجه شده از طیف اتلاف انرژی در راستای x و z به ترتیب برابر با ۱۷/۹۵ و ۱۷/۲۵ الکترون‌ولت به دست آمد.

ترکیب تنگستن دی‌سولفید نشان می‌دهد که ضریب شکست این ترکیب در راستای x، ۳/۶۶ و در راستای z برابر با ۲/۵۵ است. نتایج مربوط به ساختار نواری و محاسبات اپتیکی نشان می‌دهد که این ترکیب یک نیم‌رسانا با شکاف اپتیکی ۱/۴۵ الکترون‌ولت است که سازگاری خوبی با دیگر نتایج تجربی و نظری موجود دارد. نتایج به دست آمده از خواص اپتیکی حاکی

## مراجع

1. Kuc, A., Zibouche, N., and Heine, T., "How Does Quantum Confinement Influence the Electronic Structure of Transition Metal Sulfides  $TmS_2$ ", *Physical Review B*, Vol. 83, p. 245213, 2011.
2. Liu, B., Han, Y. H., Gao, C. X., Yanzhang, M., Gang, P., Baojia, W., Cailong, L., Yue, W., Tingjing, H., Xiaoyan, C., Wanbin, R., Yan, L., Ningning, S., Hongwu, L., and Guangtian, Z., "Pressure Induced Semiconductor- Semimetal Transition in  $WSe_2$ ", *Journal of Physical Chemistry C*, Vol. 114, pp. 14251-14254, 2010.
3. Brien, M. O., Lee, K., Morrish, R., Berner, N. C., McEvoy, N., Wolden, C. A., and Duesberg, G. S., "Plasma Assisted Synthesis of  $WS_2$  for Gas Sensing Applications", *Chemical Physics Letters*, Vol. 615, pp. 6-10, 2014.
4. Prouzet, E., Heising, J., and Kanatzidis, M. G., "Structure of Restacked and Pillared  $WS_2$ : An X-ray Absorption Study", *Chemistry of Materials*, Vol. 15, pp. 412-418, 2003.
5. Heising, J., and Kanatzidis, M. G., "Structure of Restacked  $MoS_2$  and  $WS_2$  Elucidated by Electron Crystallography", *Journal of the American Chemical Society*, Vol. 121, pp. 638-643, 1999.
6. Gutiérrez, H. R., Perea-López, N., Elías, A. L., Berkdemir, A., Wang, B., Lv, R., López-Urías, F., Crespi, V. H., Terrones, H., and Terrones, M., "Extraordinary Room-Temperature Photoluminescence in  $WS_2$  Monolayers", *Nano Letters*, Vol. 13, No. 8, pp. 3447-3454, 2013.
7. Carvalho, A., Ribeiro, R. M., and Castro Neto, A. H., "Band Nesting and the Optical Response of Two-Dimensional Semiconducting Transition Metal Dichalcogenides", *Physical Review*, Vol. 88, p. 115205, 2013.
8. Giannozzi, P., Baroni, S., Bonini, N., Calandra, M., Car, R., Cavazzoni, C., Ceresoli, D., Chiarotti, G. L., Cococcioni, M., Dabo, I., Dal Corso, A., de Gironcoli, S., Fabris, S., Fratesi, G., Gebauer, R., Gerstmann, U., Gougoussis, C., Kokalj, A., Lazzeri, M., Martin-Samos, L., Marzari, N., Mauri, F., Mazzarello, R., Paolini, S., Pasquarello, A., Paulatto,

- L., Sbraccia, C., Scandolo, S., Sclauzero, G., Seitsonen, A. P., Smogunov, A., Umari, P., Wentzcovitch, R. M., "Quantum Espresso: A Modular and Open-Source Software Project for Quantum Simulations of Materials", *Journal of Physics: Condensed Matter*, Vol. 21, pp. 395502-395536, 2009.
9. Dresselhaus, M., "Optical Properties of Solids", *Proceedings of the International School of Physics, Enrico Fermi*, Academic Press, NY, 1966.
  10. Ahuja, U., Dashora, A., Tiwari, H., Kothari, D. C., and Venugopalan, K., "Electronic and Optical Properties of MoS<sub>2</sub>-WS<sub>2</sub> Multi-Layers: First Principles Study", *Computational Materials Science*, Vol. 92, pp. 451-456, 2014.
  11. Koch, S. W., *Quantum Theory of the Optical and Electronic Properties of Semiconductors*, World Scientific Publishing Company Incorporated, 1994.
  12. Ballif, C., Regula, M., and Levy, F., "Optical and Electrical Properties of Semiconducting WS<sub>2</sub> Thin Films: From Macroscopic to Local Probe Measurements", *Solar Energy Materials & Solar Cells*, Vol. 57, pp. 189-207, 1999.
  13. Bhattacharyya, S., and Singh, A. K., "Semiconductor-Metal Transition in Semiconducting Bilayer Sheets of Transition Metal Dichalcogenides", *Physical Review B*, Vol. 86, p. 075454, 2012.
  14. Frey, G. L., Tenne, R., Matthews, M. J., Dresselhaus, M. S., and Dresselhaus, G., "Optical Properties of MS<sub>2</sub> (M = Mo, W) Inorganic Fullerene-Like and Nanotube Material Optical Absorption and Resonance Raman Measurements", *Journal of Materials Research*, Vol. 13, No. 9, pp. 2412-2417, 1998.
  15. Ambrosch-Draxl, C., and Sofo, J. O., "Linear Optical Properties of Solids Within the Full-Potential Linearized Augmented Planewave Method", *Computer Physics Communications*, Vol. 175, No. 1, pp. 1-14, 2006.
  16. Zhang, H., Li, X. B., and Liu, L. M., "Tunable Electronic and Magnetic Properties of WS<sub>2</sub> Nanoribbons", *Journal of Applied Physics*, Vol. 114, p. 093710, 2013.