فصل‌نامه علمی ـ پژوهشی
مواد پیشرفته در مهندسی

مطالعه ابتدا به‌ساکن ویژگی‌های اپتیکی و مغناطیسی تنگستن دی‌سولفید

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 دی‌سولفید شامل تابع دی‌الکتریک، ضریب شکست استاتیکی، سهم موهومی تابع دی‌الکتریک، شکاف اپتیکی، طیف اتلاف انرژی و خواص مغناطیسی آن مطالعه شده است. محاسبات توسط بسته محاسباتی کوانتوم اسپرسو برپایه نظریه تابعی چگالی و با روش شبه‌پتانسیل انجام شده است. ضرایب شکست استاتیکی مربوط به این ترکیب در راستاهای مختلف x و z به‌ترتیب معادل ۳/۶۶ و ۲/۵۵ محاسبه شد. اندازه شکاف اپتیکی حاصل از سهم موهومی تابع دی‌الکتریک، معادل ۱/۴۵ الکترون‌ولت محاسبه شد. همچنین انرژی پلاسمون حجمی حاصل از طیف اتلاف انرژی در راستاهای x و z به‌ترتیب برابر با ۱۷/۹۵ الکترون‌ولت و ۱۷/۲۵ الکترون‌ولت به‌دست آمد.

واژه‌های کلیدی: تنگستن دی‌سولفید، 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, ShahidChamran 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 diffrent 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

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 به‌گونه‌ای 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 مسطح 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 ۲/۷۴ آنگستروم قرار گرفته‌اند [۵]. محاسبات نظری لبه‌های زیگزاگی با سولفور فراوان را برای تک‌لایه‌های تنگستن دی‌سولفید نشان می‌دهد که موجب می‌شود این تک لایه‌ها دارای حالت‌های لبه‌فلزی باشند که پاسخ نوری تولید می‌کند و این چشمه‌های نوری با مقیاس نانو می‌تواند کاربردهای زیادی مثل ابزارهای الکترونوری 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 به‌صورت خودسازگار حل می‌شوند [۸]. شبه‌پتانسیل‌های مورد استفاده به‌روش فوق نرم و با استفاده از تقریب GGA ساخته شده‌اند. اوربیتال‌های ظرفیتی که در این 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 ۳/۲۳ آنگستروم=a و ۶۵/۱۳ آنگستروم=c است. در انجام محاسبات دقت همگرایی انرژی کل برابر با 1×10^{-7} ریدبرگ و با انجام ۱۴ چرخه درنظر گرفته شده است. مقادیر بهینه مربوط به انرژی قطع تابع موج و انرژی قطع چگالی بار به‌ترتیب برابر با ۱۰۰ ریدبرگ و ۴۰۰ ریدبرگ محاسبه شد. نمونه‌برداری از منطقه اول بریلوئن با یک توزیع دستی از نقاط k و با درنظرگیری مسیر Γ-M-K-Γ 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 $\varepsilon_1(\omega)$ و موهومی $\varepsilon_2(\omega)$ تشکیل شده است که با رابطه (۱) نشان داده می‌شود [۹]:

$$\varepsilon(\omega)=\varepsilon_1(\omega)+i\varepsilon_2(\omega) \qquad (۱)$$

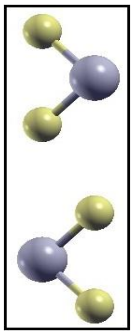
رابطه ضریب شکست استاتیکی با سهم حقیقی تابع دی‌الکتریک به‌صورت رابطه (۲) است که در آن $k(\omega)$ ضریب خاموشی است:

$$\varepsilon_1(\omega)=n^2(\omega)-k^2(\omega) \qquad (۲)$$

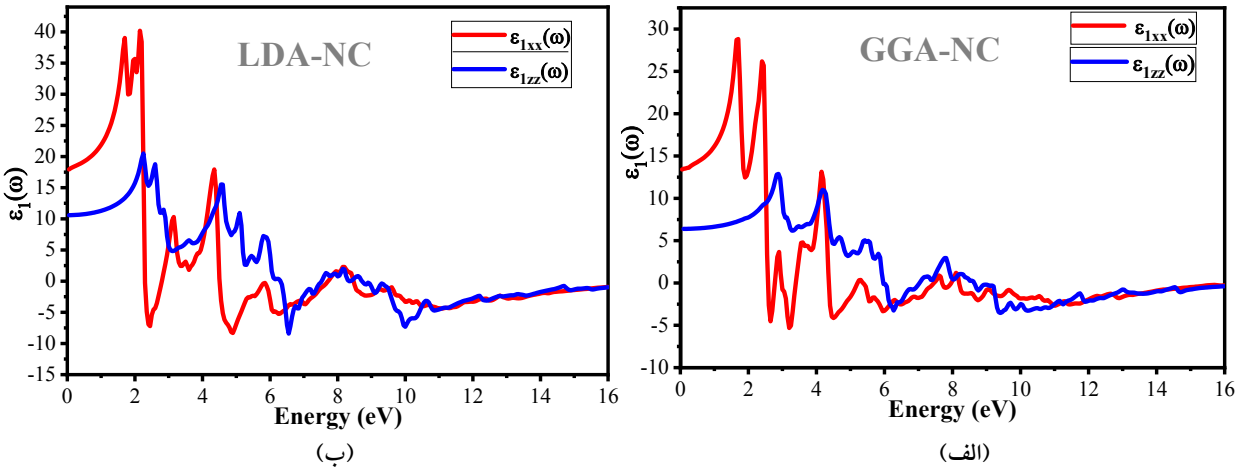
حد بسامد صفر سهم حقیقی تابع دی‌الکتریک از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است و جذر آن، ضریب شکست استاتیک ترکیب را نتیجه می‌دهد:

$$n(0)=\sqrt{\varepsilon_1(0)} \qquad (۳)$$

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 به‌صورت $\varepsilon_{xx}=\varepsilon_{yy}\neq\varepsilon_{zz}$ هستند. نتیجه می‌شود ساختار هگزاگونال در راستای x و y همسانگرد است.



شکل ۱- سلول واحد تنگستن دی‌سولفید (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)

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 به‌صورت تجربی مطالعه‌ای انجام نشده است. علاوه براین تفاوت بین نتایج تجربی و داده‌های به‌دست آمده در این کار می‌تواند ناشی از استفاده از شبه‌پتانسیل‌ها باشد که خود ناشی از ناتوانی نظریه تابعی چگالی در محاسبه دقیق جمله تبادلی- همبستگی است و مشاهده می‌شود که شبه‌پتانسیل‌های شیب تعمیم‌یافته نتایج بهتری به‌دست آوردند.

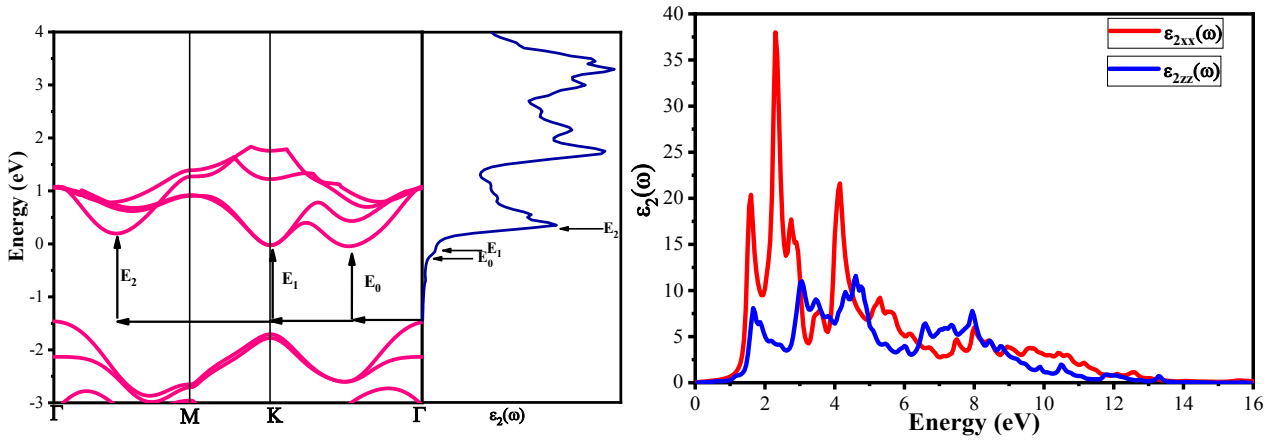
از نمودارهای سهم حقیقی دیده می‌شود که این نمودارها در محدوده کمی از انرژی دارای مقادیر منفی است. در ناحیه‌ای که ε_1 منفی است امواج منتشر نمی‌شوند و فرایندهای جذب و اتلاف صورت می‌گیرد. در تقریب‌های شیب تعمیم‌یافته با شبه‌پتانسیل بار پایسته (GGA-NC) و چگالی موضعی با شبه‌پتانسیل بار پایسته (LDA-NC) به‌ترتیب در انرژی‌های بالاتر از ۱۳٫۵ و ۱۱٫۲۵ الکترون‌ولت سامانه در هر دو راستای x و z از خود رفتاری همسانگرد نشان می‌دهد.

۳-۲- 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

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

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



(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)

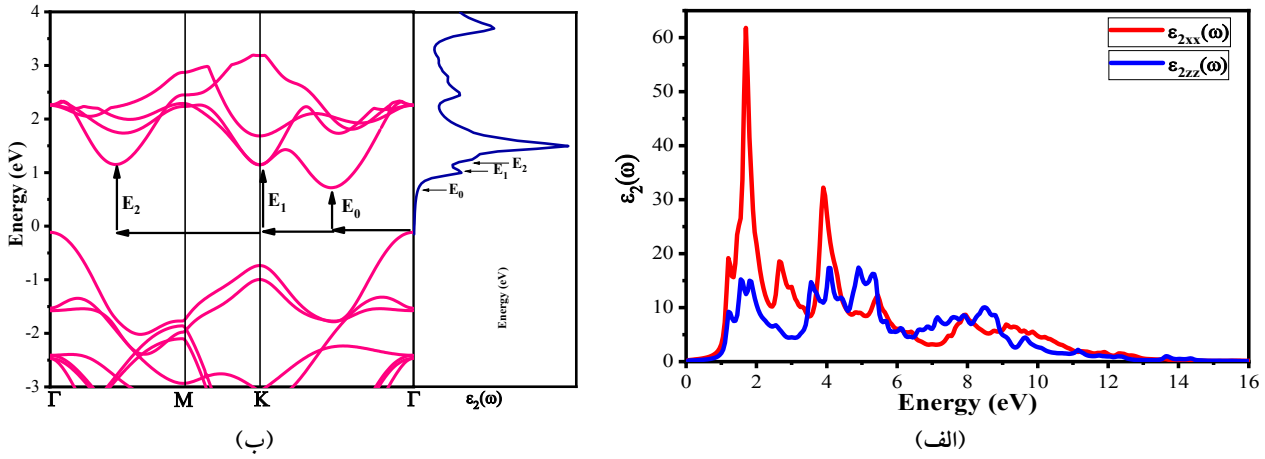
از جذب فوتون‌های کم‌انرژی است و منجر به گذارهای درون‌نواری می‌شود. بعد از این انرژی، سهم موهومی به‌صورت ناگهانی افزایش می‌یابد. این امر بیانگر جذبی است که به‌دنبال آن گذارهای میان نواری رخ می‌دهد. این انرژی برابر با اندازه شکاف اپتیکی است. سه نقطه در نمودار با نام‌های E_0 و E_1 و E_2 نشان داده شده‌اند. 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 این تقریب نیز شکاف به‌دست آمده از ساختار نواری و چگالی حالت‌ها را تأیید می‌کند.

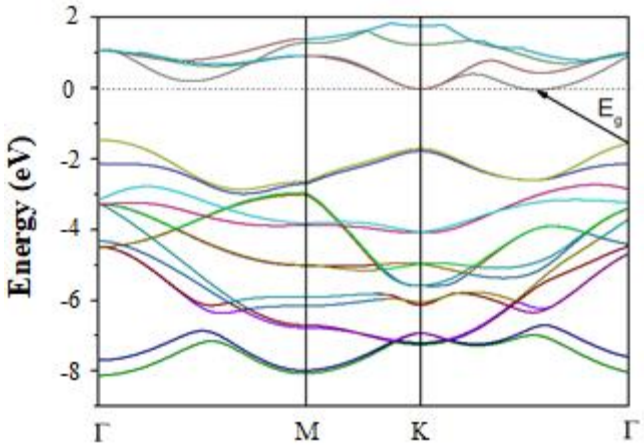
با توجه به قسمت (ب) هر دو شکل (۳) و (۴) مشاهده می‌شود مسیر گذارهای احتمالی در هر دو تقریب یکسان است. نتایج شکاف اپتیکی به‌دست آمده از سهم موهومی تابع دی‌الکتریک با نتایج شکاف نواری موجود در مطالعات تجربی و نظری مطابقت دارد [۱۱، ۱۳ و ۱۴] و خاصیت نیم‌رسانایی ترکیب تنگستن دی‌سولفید را نشان می‌دهد. به‌منظور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



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

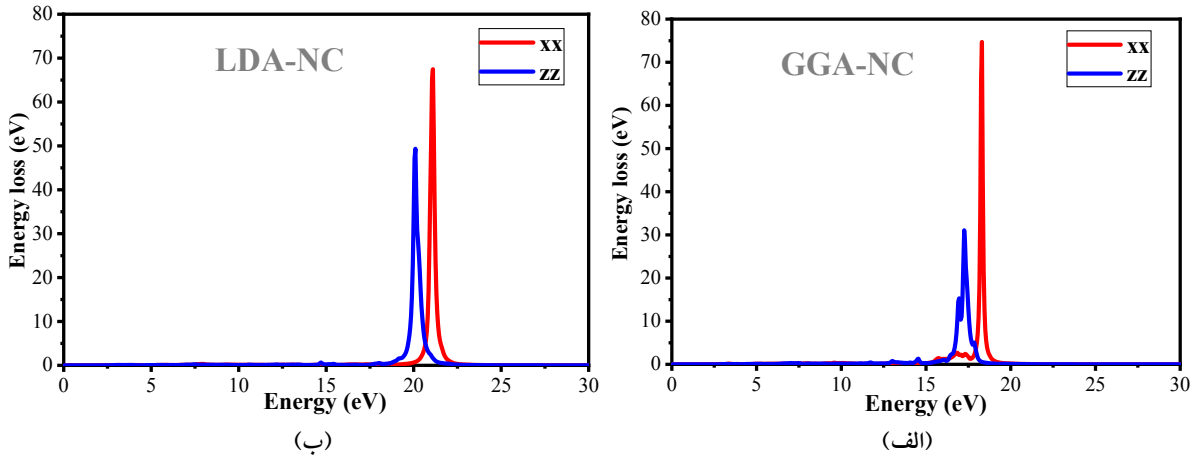


شکل ۵- ساختار نواری ترکیب تنگستن دی‌سولفید (انرژی صفر منطبق بر انرژی فرمی درنظر گرفته شده است.)

رابطه زیر به‌دست 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 به‌عنوان 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 $\varepsilon_1(\omega)$ در آنها منفی و مقدار $\varepsilon_2(\omega)$ 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 GGA-NC و LDA-NC رسم شده است. در تقریب GGA-NC بلندترین قله در راستای xx در انرژی ۱۷٫۹۵الکترون‌ولت 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 دی‌الکتریک بسیار ناچیز است.

$$\text{eels} = -\text{Im}\left[-\frac{1}{\varepsilon(\omega)}\right] = \frac{\varepsilon_2}{\varepsilon_1^2+\varepsilon_2^2} \qquad (۴)$$

در تقریب LDA-NC نیز قله پلاسمونی در راستای xx و zz به‌ترتیب در انرژی‌هایی برابر ۲۱٫۱ الکترون ولت 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 دی‌الکتریک بسیار ناچیز است.



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

جدول ۲- انرژی کل محاسبه شده در نظم‌های مغناطیسی مختلف

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

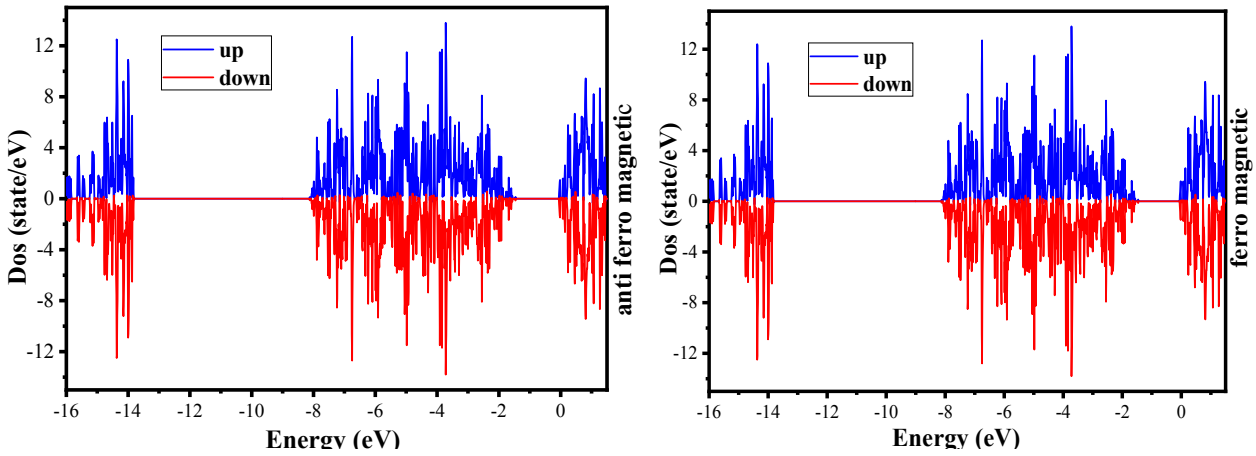
۳-۴- خواص مغناطیسی

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

مشاهده می‌شود که ترکیب تنگستن دی‌سولفید هیچ خاصیت مغناطیسی ندارد و درحالت 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 درنظر 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 دی‌سولفید با استفاده از بسته محاسباتی کوانتوم اسپرسو و با تقریب‌های مختلف انجام شده است. محاسبات انجام شده روی



(ب) (الف)

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

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 به‌دست آمده از خواص اپتیکی حاکی 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 به‌ترتیب برابر با ۱۷/۹۵ و ۱۷/۲۵ الکترون‌ولت به‌دست آمد.

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_2-WS_2 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_2 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_2 (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_2 Nanoribbons", *Journal of Applied Physics*, Vol. 114, p. 093710, 2013.