

## طراحی جاذب کامل نور در تک لایه $\text{MoS}_2$ و $\text{MoSe}_2$ با استفاده از لایه پلاسمونیک و لایه میانی

نرگس انصاری<sup>\*</sup>، انسیه محبی، فاطمه غلامی

دانشگاه الزهراء، دانشکده فیزیک و شیمی، گروه فیزیک

دریافت: ۹۸/۸/۲۲

پذیرش: ۹۹/۱۰/۱۷

### چکیده

لایه‌های کلکوژناید های فلزات واسطه (TMDC) با گاف‌های نواری مستقیم، افق جدیدی در کاربری این مواد در فوتونیک و الکترواپتیک ایجاد کرده‌اند. در این مقاله اثر ضخامت لایه نازک طلا و تأثیر لایه میانی بر جذب بررسی شده است. ویژگی اپتیکی ساختارها با روش ماتریس انتقال، TMM، در ناحیه طول موج مرئی به صورت نظری مورد بررسی قرار گرفته است. با بررسی ویژگی‌های اپتیکی ساختار دریافته‌ایم حضور لایه میانی باعث افزایش میزان جذب می‌شود. در طراحی این ساختارها توانسته‌ایم با ضخامت لایه پلاسمونیک ۷۵ نانومتر و لایه میانی ۳۳ نانومتر برای  $\text{MoS}_2$  و ۴۰ نانومتر برای  $\text{MoSe}_2$  به جذب بالای ۹۹٪ دست یابیم.

**واژگان کلیدی:** کلکوژناید های فلزات واسطه، پلاسمونیک، جذب، روش ماتریس انتقال.

### مقدمه

تک‌لایه‌های کلکوژناید های فلزات واسطه<sup>۱</sup> (TMDC) با فرمول شیمیایی  $\text{MX}_2$  (X = S, Se M = Mo, W) در سال‌های اخیر به علت خواص منحصر به فرد الکترونیکی و اپتیکی در ترانزیستورها، آشکارسازها، سلول‌ها خورشیدی، نانوحسگرهای زیستی، نانوموجبر، پراکندگی رامان و ... بسیار مورد اهمیت قرار گرفته‌اند [۶-۹] که در بازه طول موجی تراهرتز [۲۱] و مرئی [۱۰ و ۱۱] بررسی شده‌اند. این مواد به علت قرارگیری گاف‌های نواری مستقیم در ناحیه طول موج مرئی، میزان جذب قابل توجهی با توجه به ضخامت نانومتری آنها دارند. برای عملکرد بهتر دستگاه‌های اپتوالکترونیکی شامل تک‌لایه TMDC به جذب بیشتری نیاز است. در سال‌های اخیر روش‌های تئوری و تجربی مختلفی به منظور افزایش جذب در پهنای گسترده از طول موج در ساختارهای یک بعدی [۱۲] به دلیل سادگی در طراحی و ساخت پیشنهاد شده است. حضور زیرلایه و

<sup>\*</sup> نویسنده مسئول: n.ansari@alzahra.ac.ir

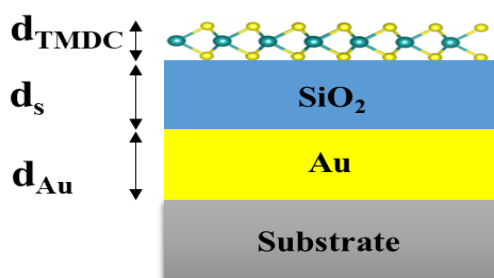
<sup>1</sup> Transition metal dichalcogenides

لایه‌های میانی<sup>۲</sup> به علت بازتاب‌های متوالی در لایه‌ی میانی ( $\text{SiO}_2$ ) و بازگشت نور به لایه‌ی TMDC می‌توانند منجر به افزایش جذب در ساختار شوند [۱۱]. علاوه بر این، جفت‌شدگی پلاسمونیک در لایه‌ی فلزی به عنوان یکی دیگر از روش‌های بهبود جذب تک لایه‌ی TMDC مطرح شده است. این لایه‌های فلزی به دو صورت زیرلایه [۱۳-۱۴] یا لایه‌ی نازک [۱۱] و [۱۵] استفاده می‌شوند که با توجه به نوع ساختار، باعث افزایش جذب در یک بازه‌ی طول موجی یا یک طول موج خاص می‌شوند. استفاده از لایه‌ی میانی همراه با جفت‌شدگی پلاسمونیک [۱۵-۱۷]، روش مرسوم به منظور افزایش جذب می‌باشد.

در این مقاله به منظور رسیدن به پهنای وسیع طول موج با جذب بالا در ساختارهای شامل TMDC، به بررسی تأثیر لایه‌ی میانی همراه با جفت‌شدگی پلاسمونیک با استفاده از لایه‌ی نازک طلا بر روی زیر لایه پرداخته شده است. با توجه به نتایج، با استفاده از لایه‌ی میانی به جذب بالای ۹۹٪ و پهنای جذب وسیع با جذب بالای ۸۶٪ دست یافته‌ایم که این ساختار جاذب برای کاربری در فتوولتاییک و اپتوالکترونیک مفید است.

## تئوری

در شکل ۱ طرح کلی ساختار پیشنهادی به منظور افزایش جذب نشان داده شده است که در آن لایه‌ی TMDC ( $\text{MoS}_2$ ) یا  $\text{MoSe}_2$  بین هوا و لایه‌ی میانی ( $\text{SiO}_2$ ) قرار دارد و لایه‌ی نازک طلا ( $\text{Au}$ ) روی زیر لایه به عنوان لایه‌ی پلاسمونیک قرار گرفته است که زیر لایه از جنس  $\text{SiO}_2$  انتخاب شده است. نور از هوا با زاویه عمود به ساختار تابانده می‌شود.



شکل ۱. ساختار مورد بررسی شامل تک لایه‌ی TMDC، لایه‌ی میانی  $\text{SiO}_2$ ، لایه‌ی رسانای طلا و زیر لایه.

طیف عبور، جذب و بازتاب ساختار با استفاده از روش ماتریس انتقال<sup>۳</sup>، TMM، محاسبه می‌شود [۱۸]. در روش TMM، ضریب شکست مختلط و ضخامت مواد مورد نیاز است. ضخامت تک لایه‌ی  $\text{MoS}_2$ ، ۰/۶۱۵ نانومتر و ضخامت تک لایه‌ی

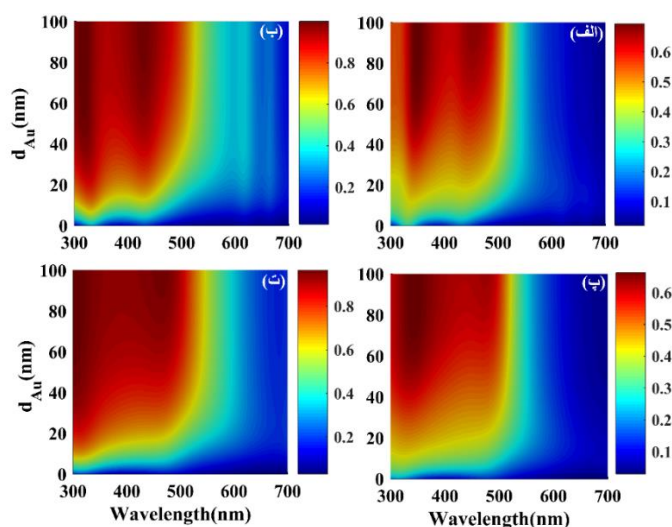
<sup>2</sup> Spacer

<sup>3</sup> Transfer Matrix Method (TMM)

MoSe<sub>2</sub>، ۰/۶۴۶ نانومتر است و ضخامت لایه میانی و طلا به ترتیب به صورت  $d_s$  و  $d_{Au}$  نمایش داده می شود. ضریب شکست مختلط MoSe<sub>2</sub>، Au، SiO<sub>2</sub> و MoS<sub>2</sub> در بازه طول موج مرئی از مراجع [۱۱، ۱۹، ۲۰، ۲۲] گرفته شده است.

### نتایج و بحث

به منظور بررسی تأثیر پلاسمونیک بر روی جذب، لایه طلا بین تک لایه TMDC و زیر لایه قرار گرفته است. طیف جذب ساختار بر حسب ضخامت لایه طلا به صورت تابعی از طول موج در شکل ۲-الف و ۲-ب به ترتیب برای تک لایه های MoSe<sub>2</sub> و MoS<sub>2</sub> رسم شده است. با افزایش ضخامت لایه طلا، بیشینه جذب در تمام بازه طول موجی افزایش می یابد.



شکل ۲. جذب ساختارها بر حسب ضخامت طلا در ناحیه طول موج مرئی بدون حضور لایه میانی (الف و ب) و با حضور لایه میانی (ب و ت) (الف) Air/MoS<sub>2</sub>/Au/SiO<sub>2</sub> (ب) Air/SiO<sub>2</sub>/MoS<sub>2</sub>/Au/SiO<sub>2</sub> (پ) Air/MoSe<sub>2</sub>/Au/SiO<sub>2</sub> (ت) Air/SiO<sub>2</sub>/MoSe<sub>2</sub>/Au/SiO<sub>2</sub>

هنگامی که ضخامت طلا صفر باشد، جذب کمتر از ۳۰٪ است و با افزایش ضخامت طلا از حدود ۵۵ نانومتر بیشینه جذب تا ۶۸٪ می رسد. قله های جذب و پهنای فرکانسی در جدول ۱ قابل مشاهده است. برای افزایش جذب، لایه میانی SiO<sub>2</sub> با ضخامت ۵۰ نانومتر بین لایه TMDC و طلا قرار داده می شود که طیف جذب آن برای تک لایه های MoS<sub>2</sub> و MoSe<sub>2</sub> به ترتیب در شکل ۲-ب و شکل ۲-ت نشان داده شده است. میزان جذب در این حالت به ۹۹٪ می رسد که نسبت به حالت بدون لایه میانی افزایش چشمگیری داشته است.

جدول ۱. میزان جذب ساختارها با حضور لایه میانی و عدم حضور آن.

پهنای فرکانسی و جذب	طول موج و جذب در قله دوم	طول موج و جذب در قله اول	ساختار
۴۹۵-۳۰۰ nm بالای ۵۴٪	۴۵۰ nm ۶۹٪	۳۴۹ nm ۶۸٪	Air/MoS <sub>2</sub> /Au/SiO <sub>2</sub>
۴۷۲-۳۰۰ nm بالای ۸۶٪	۴۴۰ nm ۹۳٪	۳۴۵ nm ۹۹٪	Air/MoS <sub>2</sub> /SiO <sub>2</sub> /Au/SiO <sub>2</sub>
۴۰۰-۳۰۰ nm بالای ۵۷٪	۴۷۰ nm ۵۹٪	۳۴۲ nm ۶۵٪	Air/MoSe <sub>2</sub> /Au/SiO <sub>2</sub>
۴۹۲-۳۰۰ nm بالای ۸۶٪	۴۷۰ nm ۸۹٪	۳۱۷ nm ۹۹٪	Air/MoSe <sub>2</sub> /SiO <sub>2</sub> /Au/SiO <sub>2</sub>

برای بررسی دقیق‌تر، جذب و پهنای جذب برای ساختار با ضخامت‌های ۵۰، ۵۵، ۶۰، ۶۵، ۷۰ و ۷۵ نانومتر لایه‌ی طلا در جدول ۲ و ۳ آورده شده است.

جدول ۲: میزان قله بیشینه جذب ساختارها برای ضخامت‌های ۵۰، ۵۵، ۶۰، ۶۵، ۷۰ و ۷۵ نانومتر طلا.

ساختار	جذب برای d <sub>Au</sub> =۵۰ nm	جذب برای d <sub>Au</sub> =۵۵ nm	جذب برای d <sub>Au</sub> =۶۰ nm	جذب برای d <sub>Au</sub> =۶۵ nm	جذب برای d <sub>Au</sub> =۷۰ nm	جذب برای d <sub>Au</sub> =۷۵ nm
Air/MoS <sub>2</sub> /Au/SiO <sub>2</sub>	۶۴٪	۶۶٪	۶۷٪	۶۸٪	۶۸/۵٪	۶۸/۹٪
Air/MoS <sub>2</sub> /SiO <sub>2</sub> /Au/SiO <sub>2</sub>	۹۸/۱٪	۹۸/۷٪	۹۹/۱٪	۹۹/۴٪	۹۹/۶٪	۹۹/۷٪
Air/MoSe <sub>2</sub> /Au/SiO <sub>2</sub>	۶۱٪	۶۳٪	۶۴٪	۶۴/۹٪	۶۵/۴٪	۶۵/۷٪
Air/MoSe <sub>2</sub> /SiO <sub>2</sub> /Au/SiO <sub>2</sub>	۹۸/۱٪	۹۸/۷٪	۹۹/۱٪	۹۹/۴٪	۹۹/۵٪	۹۹/۷٪

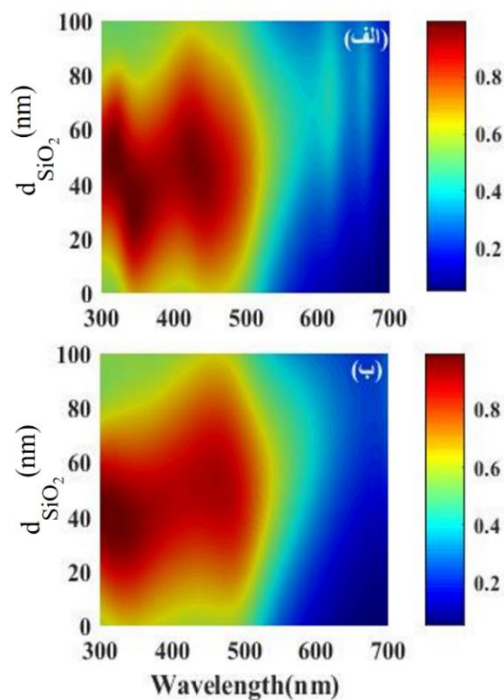
جدول ۳: پهنای جذب ساختارها برای ضخامت‌های ۵۰، ۵۵، ۶۰، ۶۵، ۷۰ و ۷۵ نانومتر طلا.

ساختار	پهنای جذب برای d <sub>Au</sub> =۵۰ nm	پهنای جذب برای d <sub>Au</sub> =۵۵ nm	پهنای جذب برای d <sub>Au</sub> =۶۰ nm	پهنای جذب برای d <sub>Au</sub> =۶۵ nm	پهنای جذب برای d <sub>Au</sub> =۷۰ nm	پهنای جذب برای d <sub>Au</sub> =۷۵ nm	جذب
Air/MoS <sub>2</sub> /Au/SiO <sub>2</sub>	۳۲۲-۴۷۸	۳۱۹-۴۸۴	۳۱۵-۴۶۶	۳۰۰-۴۹۲	۳۰۰-۴۹۴	۳۰۰-۴۹۵	بالای ۵۴٪
Air/MoS <sub>2</sub> /SiO <sub>2</sub> /Au/SiO <sub>2</sub>	۳۰۰-۴۵۷	۳۰۰-۴۶۲	۳۰۰-۴۶۶	۳۰۰-۴۷۰	۳۰۰-۴۷۳	۳۰۰-۴۷۶	بالای ۸۶٪
Air/MoSe <sub>2</sub> /Au/SiO <sub>2</sub>	۳۰۰-۴۱۶	۳۰۰-۴۸۱	۳۰۰-۴۹۰	۳۰۰-۴۷۵	۳۰۰-۴۸۶	۳۰۰-۴۹۹	بالای ۵۴٪
Air/MoSe <sub>2</sub> /SiO <sub>2</sub> /Au/SiO <sub>2</sub>	۳۰۰-۴۵۸	۳۰۰-۴۶۳	۳۰۰-۴۶۷	۳۰۰-۴۷۱	۳۰۰-۴۷۴	۳۰۰-۴۹۲	بالای ۸۶٪

با توجه به جدول‌های ۲ و ۳، در ضخامت طلای بالاتر از ۵۵ نانومتر بیشینه جذب افزایش چشمگیری ندارد اما پهنای طول موجی با جذب بالای ۸۶٪ در ضخامت طلای ۷۵ نانومتر برای هر دو تک‌لایه TMDC بیشترین مقدار است به همین علت ضخامت لایه طلا ۷۵ نانومتر به عنوان ضخامت بهینه انتخاب شده است.

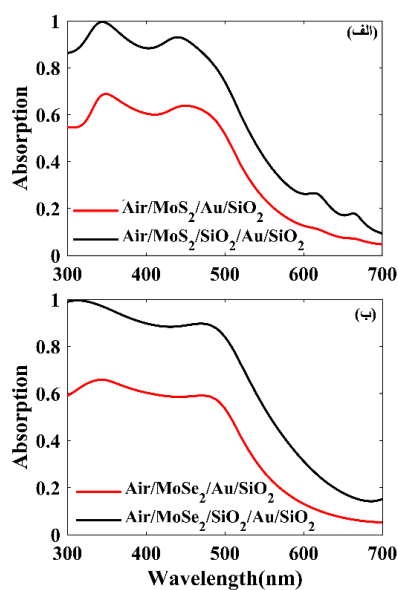
به منظور یافتن بهترین ضخامت لایه میانی برای جذب بالا، با ثابت کردن ضخامت طلا در ۷۵ نانومتر، اثر ضخامت لایه میانی بر جذب به ترتیب در شکل ۳- الف و ۳- ب برای تک‌لایه MoS<sub>2</sub> و MoSe<sub>2</sub> بررسی شده است. با توجه به شکل ۳- الف بیشینه میزان جذب ۹۹٪ برای تک‌لایه MoS<sub>2</sub> در ضخامت لایه میانی ۳۳ نانومتر در طول موج ۳۴۵ نانومتر

مشاهده می‌شود. هم چنین با توجه به شکل ۳-ب، بهینه ضخامت لایه میانی در طول موج ۳۱۳ نانومتر برای تک‌لایه  $\text{MoSe}_2$ ، ۴۰ نانومتر می‌باشد که در این ضخامت، بیشینه میزان جذب ۹۹٪ مشاهده می‌شود.



شکل ۳. اثر ضخامت لایه میانی بر جذب برای  $\text{MoS}_2$  (الف) و  $\text{MoSe}_2$  (ب)

طیف جذب حالت بهینه برای مقایسه ساختار بدون لایه میانی و با لایه میانی با ضخامت‌های ۳۳ و ۴۰ نانومتر به ترتیب برای  $\text{MoS}_2$  و  $\text{MoSe}_2$  در شکل ۴-الف و شکل ۴-ب نمایش داده شده است. با توجه به شکل ۴-الف برای  $\text{MoS}_2$  در عدم حضور لایه میانی پهنای فرکانسی ۳۰۰-۴۹۵ جذب بالای ۵۴ درصد خواهد بود. در حضور لایه میانی پهنای فرکانسی ۳۰۰-۴۷۲، جذب به بالای ۸۶ درصد افزایش خواهد یافت. شکل ۴-ب برای  $\text{MoSe}_2$  در عدم حضور لایه میانی پهنای فرکانسی ۳۰۰-۴۸۲ جذب بالای ۵۸ درصد خواهد بود اما در حضور لایه میانی پهنای فرکانسی ۳۰۰-۴۸۵ جذب به بالای ۸۶ درصد افزایش خواهد یافت. با توجه به این نتایج، استفاده از لایه میانی، روش مناسبی برای طراحی جاذب کامل نور خواهد بود.



شکل ۴. طیف جذب ساختار برای ضخامت انتخاب شده لایه میانی MoS<sub>2</sub> (الف) MoSe<sub>2</sub> (ب)

## نتیجه‌گیری

با هدف دستیابی به جذب کامل با پهنای وسیع در ساختار شامل تک‌لایه TMDC، اثر ضخامت لایه نازک طلا و تأثیر لایه میانی بررسی شده است. با بررسی ویژگی‌های اپتیکی ساختار دریافته‌ایم حضور لایه میانی باعث افزایش میزان جذب می‌شود و جذب بیشینه برای این ساختار به بالای ۹۹٪ می‌رسد علاوه بر این پهنای جذب وسیع با جذب بالای ۸۶٪ برای هر دو تک‌لایه‌های MoS<sub>2</sub> و MoSe<sub>2</sub> ایجاد می‌شود که برای کاربری در فوتونیک و الکترواپتیک مفید است.

## منابع

1. Pillai S., Catchpole K. R., Trupke T., Green M. A., "Surface plasmon enhanced silicon solar cells", JAP., 101 (2007) 093105.
2. Huo N., Kang J., Wei Z., Li S. S., Li J., Wei S. H., "Novel and enhanced optoelectronic performances of multilayer MoS<sub>2</sub>-WS<sub>2</sub> heterostructure transistors", Advanced Functional Materials., 24 (2014) 7025-7031.

3. Sergeant N. P., Pincon O., Agrawal M., Peumans P., "Design of wide-angle solar-selective absorbers using aperiodic metal-dielectric stacks", *Opt. exp.*, 17 (2009) 22800-22812.
4. Song H., Jiang S., Ji D., Zeng X., Zhang N., Liu K., Gan Q., "Nanocavity absorption enhancement for two-dimensional material monolayer systems", *Opt. exp.*, 23 (2015) 7120-7130.
5. Lopez-Sanchez O., Lembke D., Kayci M., Radenovic A., Kis A., "Ultrasensitive photodetectors based on monolayer MoS<sub>2</sub>", *Nat. nanotech.*, 8 (2013) 497.
6. Yin Z., Li H., Li H., Jiang L., Shi Y., Sun Y., Zhang H. "Single-layer MoS<sub>2</sub> phototransistors", *ACS nano.*, 6 (2011) 74-80.
7. Regatos D., Sepúlveda B., Fariña D., Carrascosa L. G., Lechuga L. M., "Suitable combination of noble/ferromagnetic metal multilayers for enhanced magneto-plasmonic biosensing", *Opt. exp.*, 19 (2011) 8336-8346.
8. Akbari A., Tait R. N., Berini P., "Surface plasmon waveguide Schottky detector", *Opt. exp.*, 18 (2010) 8505-8514.
9. Meyer S. A., Le Ru E. C., Etchegoin P. G., "Combining surface plasmon resonance (SPR) spectroscopy with surface-enhanced Raman scattering (SERS)", *Analytical chemistry*, 83 (2011) 2337-2344.
10. Ponraj J. S., Xu Z. Q., Dhanabalan S. C., Mu H., Wang Y., Yuan J., Zhang Y., "Photonics and optoelectronics of two-dimensional materials beyond grapheme", *Nanotech.*, 27 (2016) 462001.
11. Ansari N., Ghorbani F., "Light absorption optimization in two-dimensional transition metal dichalcogenide van der Waals heterostructures", *JOSA B.*, 35 (2018) 1179-1185.
12. Liu J. T., Wang T. B., Li X. J., Liu N. H., "Enhanced absorption of monolayer MoS<sub>2</sub> with resonant back reflector", *JAP*, 115 (2014) 193511.

13. Long Y., Deng H., Xu H., Shen L., Guo W., Liu C., Guo C., “Magnetic coupling metasurface for achieving broad-band and broad-angular absorption in the MoS<sub>2</sub> monolayer”, *Opt. Mater. Exp.*, 7 (2017) 100-110.
14. Long L., Yang Y., Ye H., Wang L., “Optical absorption enhancement in monolayer MoS<sub>2</sub> using multi-order magnetic polaritons”, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer.*, 200 (2017) 198-205.
15. Jia G. Y., Zhang Q., Huang Z. X., Huang S. B., Xu J., “Ultrathin gold film modified optical properties of excitons in monolayer MoS<sub>2</sub>”, *Physical Chemistry Chemical Physics*, 19 (2017) 27259-27265.
16. Lu H., Gan X., Mao D., Fan Y., Yang D., Zhao J., “Nearly perfect absorption of light in monolayer molybdenum disulfide supported by multilayer structures”, *Opt. exp.*, 25 (2017) 21630-21636.
17. Song J., Lu L., Cheng Q., Luo Z., “Surface plasmon-enhanced optical absorption in monolayer MoS<sub>2</sub> with one-dimensional Au grating”, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 211 (2018) 138-143.
18. Liu J. T., Liu N. H., Li J., Jing Li X., Huang J. H., “Enhanced absorption of graphene with one-dimensional photonic crystal”, *Appl. Phys. Lett.*, 101 (2012) 052104.
19. Brandão E. R., Costa C. H., Vasconcelos M. S., Anselmo D. H. A. L., Mello V. D., “Octonacci photonic quasicrystals”, *Opt. Mater.*, 46 (2015) 378-383.
20. Johnson P.B., Christy R.W., “Optical constants of the noble metals”, *Phys. Rev. B.*, 6 (1972) 4370.
۲۱. انصاری نرگس، مرادی مریم، بررسی انتشار امواج تراهرتز در MoS<sub>2</sub> در مرز بین دو دی الکتریک، مجله پژوهش سیستم‌های بس ذره ای ۳ (۱۳۹۲) ۴۲-۴۷.
۲۲. انصاری نرگس، قربانی فریناز، مرادی مریم، بررسی تاثیر مدل گاوس در بهبود ثابت گذردهی و جذب تک لایه‌های TMDC در ناحیه طول موج مرئی، مجله پژوهش سیستم‌های بس ذره‌ای ۸ (۱۳۹۷) ۱-۱۱.