طراحی جاذب کامل نور در تک لایهٔ MoS₂ و MoSe2 با استفاده از لایهٔ پلاسمونیک و لایه میانی

نرگس انصاری*، انسیه محبی، فاطمه غلامی دانشگاه الزهرا، دانشکدهٔ فیزیک و شیمی، گروه فیزیک _{دریافت: ۹۸/۸/}۲۲

چکیدہ

لایههای کلکوژنایدهای فلزات واسطه (TMDC) با گافهای نواری مستقیم، افق جدیدی در کاربری این مواد در فوتونیک و الکترواپتیک ایجاد کردهاند. در این مقاله اثر ضخامت لایۀ نازک طلا و تأثیر لایه میانی بر جذب بررسی شده است. ویژگی اپتیکی ساختارها با روش ماتریس انتقال، TMM، در ناحیۀ طول موج مرئی به صورت نظری مورد بررسی قرار گرفته است. با بررسی ویژگیهای اپتیکی ساختار دریافتهایم حضور لایۀ میانی باعث افزایش میزان جذب میشود. درطراحی این ساختارها توانستهایم با ضخامت لایۀ پلاسمونیک ۲۵ نانومتر و لایه میانی ۳۳ نانومتر برای MoS2 و ۴۰ نانومتر برای MoSe2 به جذب بالای /۹۹ دست یابیم.

واژگان كليدى: كلكوژنايدهاى فلزات واسطه، پلاسمونيك، جذب، روش ماتريس انتقال.

مقدمه

تکلایههای کلکوژنایدهای فلزات واسطه (TMDC) با فرمول شیمیایی MX₂ (W (W NX دوبعه S, Se M = Mo, W) (W) کاربردهای ایتوالکترونیکی بسیار مورد توجه نانوساختارهای دوبعدی هستند که توانایی جذب بالای نور را دارند و برای کاربردهای ایتوالکترونیکی بسیار مورد توجه قرار گرفتهاند [1-۶]. از میان این نانو ساختارها، تکلایههای MoS₂ و MoS در سالهای اخیر به علت خواص منحصر به فرد الکترونیکی و ایتیکی در ترانزیستورها، آشکارسازها، سلولها خورشیدی، نانوحسگرهای زیستی، نانوموجبر، به فرد الکترونیکی و ایتیکی در ترانزیستورها، آشکارسازها، سلولها خورشیدی، نانوحسگرهای زیستی، نانوموجبر، پراکندگی رامان و ... بسیار مورد او ۲۰] که در بازهٔ طول موجی تراهرتز [۲۱] و مرئی [۱۰ و ۱۱] برسی شدهاند. این مواد به علت قرار گرفتهاند [۲-۹] که در بازهٔ طول موجی تراهرتز ای و مرئی او ۱۰ و ۱۱] بررسی شدهاند. این مواد به علت قرار گرفتهاند [۲-۹] که در بازهٔ طول موجی تراهرتز ای و مرئی او ۱۰ و ۱۱] بررسی شدهاند. این مواد به علت قرار گرفتهاند [۲-۹] که در بازهٔ طول موجی تراهرتز ای و ۲۱] به جذب بررسی شدهاند. این مواد به علت قرار گیری گافهای نواری مستقیم در ناحیهٔ طول موجی مرئی، میزان جذب قابل توجهی بررسی شدهاند. این مواد به علت قرار گرفتهاند و سیتگاههای ایتوالکترونیکی شامل تکلایهٔ کلایم توجهی بیشتری نیاز است. در سالهای اخیر روشهای تئوری و تجربی مختلفی به منظور افزایش جذب در پهنای گسترده از 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

* نویسندهٔ مسئول: n.ansari@alzahra.ac.ir

¹ Transition metal dichalcogenides

لایههای میانی^۲ به علت بازتابهای متوالی در لایهی میانی (SiO₂) و بازگشت نور به لایهٔ TMDC میتوانند منجر به افزایش جذب در ساختار شوند [۱۱]. علاوه بر این، جفتشدگی پلاسمونیک در لایهٔ فلزی به عنوان یکی دیگر از روشهای بهبود جذب تک لایهٔ TMDC مطرح شده است. این لایههای فلزی به دو صورت زیرلایه [۱۳–۱۴] یا لایهٔ نازک [۱۱ و ۱۵] استفاده میشوند که با توجه به نوع ساختار، باعث افزایش جذب در یک بازهٔ طول موجی یا یک طول موج خاص میشوند. استفاده از لایهٔ میانی همراه با جفتشدگی پلاسمونیک [۱۵–۱۲]، روش مرسومی 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 لایهٔ میانی همراه با جفت شدگی پلاسمونیک با استفاده از لایهٔ 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.

تئورى

در شکل ۱ طرح کلی ساختار پیشنهادی به منظور افزایش جذب نشان داده شده است که در آن لایهٔ MoS₂) TMDC (MoS₂) یا MoS₂) بین هوا و لایهٔ میانی(SiO₂) قرار دارد و لایهٔ نازک طلا (Au) روی زیر لایه به عنوان لایهٔ پلاسمونیک قرار گرفته است که زیر لایه از جنس SiO₂ انتخاب شده است. نور از هوا با زاویهٔ عمود به ساختار تابانده می شود.



شكل۱. ساختار مورد بررسی شامل تکلایهٔ TMDC، لایهٔ میانی SiO₂، لایهٔ رسانای طلا و زیرلایه.

طیف عبور، جذب و بازتاب ساختار با استفاده از روش ماتریس انتقال^۳، TMM، محاسبه می شود [۱۸]. در روش TMM، ضریب شکست مختلط و ضخامت مواد مورد نیاز است. ضخامت تک لایهٔ MoS₂، ۱/۶۱۵، نانومتر و ضخامت تک لایهٔ

² Spacer

³ Transfer Matrix Method (TMM)

MoSe₂، ۱/۶۴۶ نانومتر است و ضخامت لایهٔ میانی و طلا بهترتیب به صورت d_s و d_{Au} نمایش داده می شود. ضریب شکست مختلط MoS₂، Au ،SiO₂، Au ،SiO₂ در بازهٔ طول موج مرئی از مراجع [۱۱،۱۹،۲۰،۲۲] گرفته شده است.

نتايج و بحث

به منظور بررسی تأثیر پلاسمونیک بر روی جذب، لایهٔ طلا بین تکلایهٔ TMDC و زیر لایه قرار گرفته است. طیف جذب ساختار بر حسب ضخامت لایهٔ طلا به صورت تابعی از طول موج در شکل ۲- الف و ۲- پ به ترتیب برای تکلایههای MoS2 و MoS2 رسم شده است. با افزایش ضخامت لایهٔ طلا، بیشینهٔ جذب در تمام بازهٔ طول موجی افزایش مییابد.



شكل۲. جذب ساختارها برحسب ضخامت طلا در ناحيهٔ طول موج مرئى بدون حضور لايهٔ ميانى (الف و پ) و با حضور Air/MoSe₂/Au/SiO₂ (پ) Air/SiO₂/MoS₂/Au/SiO₂ (پ) Air/MoSe₂/Au/SiO₂ (پ) Air/SiO₂ (پ) Air/SiO₂ /MoSe₂/Au/SiO₂ (ت)

هنگامی که ضخامت طلا صفر باشد، جذب کمتر از ۲۰۰ است و با افزایش ضخامت طلا از حدود ۵۵ نانومتر بیشینهٔ جذب تا ٪۶۸ می سد. قلههای جذب و پهنای فرکانسی در جدول ۱ قابل مشاهده است. برای افزایش جذب، لایهٔ میانی SiO2 با ضخامت ۵۰ نانومتر بین لایهٔ TMDC و طلا قرار داده می شود که طیف جذب آن برای تک لایههای MoS2 و MoS2 به ترتیب در شکل۲- ب و شکل۲- ت نشان داده شده است. میزان جذب در این حالت به ٪۹۹ می سد که نسبت به حالت بدون لایه میانی افزایش چشمگیری داشته است.

جدول۱. میزان جذب ساختارها با حضور لایه میانی و عدم حضور آن.

ساختار	طول موج و جذب در قله اول	طول موج و جذب در قله دوم	پهنای فرکانسی و جذب	
Air/MoS ₂ /Au/SiO ₂	ሞየ۹ nm	40. nm	۴۹۵-۳۰۰ nm	
	۶λ%	89%	بالای ٪۵۴	
Air/MoS ₂ /SiO ₂ /Au/SiO ₂	840 nm	۴۴۰ nm	۴۷۲–۳۰۰ nm	
	99%	۹۳٪	بالای ٪۶۶	
Air/MoSe ₂ /Au/SiO ₂	867/.	۴۲۰nm ۵۹٪	۴۰۰–۳۰۰ nm بالای ٪۵۷	
Air/MoSe ₂ /SiO ₂ /Au/SiO ₂	۳۱۷ nm	۴۲۰ nm	۴۹۲–۳۰۰nm	
	۹۹٪	۸۹٪	بالای ٪۸۶	

برای بررسی دقیق تر، 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.

طلا.	و ۷۵ نانومتر	، ۷۰	.90 .9.	۵۵، ۵۵،	ضخامتهای	براى	ساختارها	جذب م	له بیشینه	یزان ق	ول ۲: م	جدو
------	--------------	-------------	---------	---------	----------	------	----------	-------	-----------	--------	---------	-----

ساختار	جذب برای d _{Au} =۵۰nm	جذب برای d _{Au} =۵۵nm	جذب برای d _{Au} =۶۰nm	جذب برای d _{Au} =۶۵nm	جذب برای d _{Au} =۲۰nm	جذب برای d _{Au} =۷۵nm
Air/MoS ₂ /Au/SiO ₂	۶۴٪.	88%.	۶۷٪.	۶۸٪.	۶۸/۵٪.	۶۸/۹٪.
Air/MoS2/SiO2/Au/SiO2	٩٨/١٪.	٩٨/٧٪.	٩٩/١٪.	٩٩/۴٪.	٩٩/۶٪.	۹٩/٧%
Air/MoSe ₂ /Au/SiO ₂	۶۱٪.	۶۳٪.	۶۴٪.	۶۴/۹٪	۶۵/۴٪	۶۵/۷%
Air/MoSe ₂ /SiO ₂ /Au/SiO ₂	٩٨/١%	٩٨/٧٪.	٩٩/١٪.	٩٩/۴٪.	٩٩/٪۵	٩٩/٧%

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

ساختار	پهنای جذب برای d _{Au} =۵۰nm	پهنای جذب برای d _{Au} =۵۵nm	پهنای جذب برای d _{Au} =۶۰nm	پهنای جذب برای d _{Au} =۶۵nm	پهنای جذب برای d _{Au} =۷۰nm	پهنای جذب برای d _{Au} =۷۵nm	جذب
Air/MoS ₂ /Au/SiO ₂	222-612	219-676	810-488	۳۰۰-۴۹۲	۳۰۰-۴۹۴	۳۰۰-۴۹۵	بالاى۵۴٪
Air/MoS ₂ /SiO ₂ /Au/SiO ₂	۳۰۰-۴۵۷	800-481	800-488	۳۰۰-۴۷۰	۳۰۰-۴۷۳	800-408	بالای ۸۶٪
Air/MoSe ₂ /Au/SiO ₂	8418	۳۰۰-۴۸۱	۳۰۰-۴۹۰	۳۰۰-۴۷۵	۳۰۰-۴۸۶	٣٠٠-۴٩٩	بالاى۵۴٪
Air/MoSe2/SiO2/Au/SiO2	۳۰۰-۴۵۸	800-498	8481	۳۰۰-۴۷۱	۳۰۰-۴۷۴	8492	بالای ۸۶٪

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

به منظور یافتن بهترین ضخامت لایهٔ میانی برای جذب بالا، با ثابت کردن ضخامت طلا در ۷۵ نانومتر، اثر ضخامت لایهٔ میانی بر جذب به ترتیب در شکل ۳- الف و ۳- ب برای تکلایهٔ MoS₂ و MoSe بررسی شده است. با توجه به شکل ۳- الف بیشینه میزان جذب ۹۹٪ برای تکلایهٔ MoS₂ در ضخامت لایهٔ میانی ۳۳ نانومتر در طول موج ۳۴۵ نانومتر مشاهده میشود. هم چنین با توجه به شکل ۳– ب، بهینهٔ ضخامت لایهٔ میانی در طول موج ۳۱۳ نانومتر برای تکلایهٔ MoSe2، ۴۰ نانومتر میباشد که در این ضخامت، بیشینهٔ میزان جذب ٪۹۹ مشاهده میشود.



 $MoSe_2$ (ب) شکل ۳. اثر ضخامت لایه میانی بر جذب برای (الف) MoS_2 و (ب)

طیف جذب حالت بهینه برای مقایسهٔ ساختار بدون لایهٔ میانی و با لایهٔ میانی با ضخامتهای ۳۳ و ۴۰ نانومتر به ترتیب برای MoS2 و MoS2 در شکل ۴- الف و شکل ۴- ب نمایش داده شده است. با توجه به شکل ۴- الف برای MoS2 در عدم حضور لایهٔ میانی پهنای فرکانسی ۳۰۰–۴۹۵ جذب بالای ۵۴ درصد خواهد بود. در حضور لایهٔ میانی پهنای فرکانسی مراح ۴۷۲-۳۰۰ ، جذب به بالای ۸۶ درصد افزایش خواهد یافت. شکل ۴- ب برای MoSe2 در عدم حضور لایهٔ میانی پهنای فرکانسی فرکانسی ۳۰۰-۴۸۲ جذب بالای ۵۸ درصد خواهد بود اما در حضور لایهٔ میانی پهنای فرکانسی ۳۰۰-۴۸۵ جذب به بالای ۸۶ درصد افزایش خواهد یافت. با توجه به این نتایج، استفاده از لایهٔ میانی، روش مناسبی برای طراحی جاذب کامل نور خواهد بود.



 MoSe_2 (ب) MoSe_2 (باغا مناه الله میانی الف) MoSe_2 (با MoSe_2 (با MoSe_2

نتيجهگيرى

با هدف دستیابی به جذب کامل با پهنای وسیع در ساختار شامل تکلایه TMDC، اثر ضخامت لایهٔ نازک طلا و تأثیر لایهٔ میانی بررسی شده است. با بررسی ویژگیهای اپتیکی ساختار دریافتهایم حضور لایهٔ 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 MoS2 و MoS2 ایجاد میشود که برای کاربری در فوتونیک و الکترواپتیک مفید است.

منابع

- Pillai S., Catchpole K. R., Trupke T., Green M. A., "Surface plasmon enhanced silicon solar cells", JAP., 101 (2007) 093105.
- Huo N., Kang J., Wei Z., Li S. S., Li J., Wei S. H.," Novel and enhanced optoelectronic performances of multilayer MoS₂–WS₂ 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.
- 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.
- Lopez-Sanchez O., Lembke D., Kayci M., Radenovic A., Kis A., "Ultrasensitive photodetectors based on monolayer MoS₂", Nat. nanotech., 8 (2013) 497.
- Yin Z., Li H., Li H., Jiang L., Shi Y., Sun Y., Zhang H. "Single-layer MoS₂ phototransistors", ACS nano., 6 (2011) 74-80.
- 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.
- Akbari A., Tait R. N., Berini P., "Surface plasmon waveguide Schottky detector", Opt. exp., 18 (2010) 8505-8514.
- 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.

 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 MoS₂ with resonant back reflector", JAP, 115 (2014) 193511.

- Long Y., Deng H., Xu H., Shen L., Guo W., Liu C., Guo C., "Magnetic coupling metasurface for achieving broad-band and broad-angular absorptionintheMoS₂ monolayer", Opt. Mater. Exp., 7 (2017) 100-110.
- Long L., Yang Y., Ye H., Wang L., "Optical absorption enhancement in monolayer MoS₂ using multi-order magnetic polaritons", Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer., 200 (2017) 198-205.
- Jia G. Y., Zhang Q., Huang Z. X., Huang S. B., Xu J., "Ultrathin gold film modified optical properties of excitons in monolayer MoS₂", Physical Chemistry Chemical Physics, 19 (2017) 27259-27265.
- 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.
- Song J., Lu L., Cheng Q., Luo Z., "Surface plasmon-enhanced optical absorption in monolayer MoS₂ 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.

- 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.
- 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 MoS₂ 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.