



بیست و ششمین کنفرانس اپتیک و
فوتونیک ایران و دوازدهمین کنفرانس
مهندسی و فناوری فوتونیک ایران،
دانشگاه خوارزمی،
تهران، ایران.
۱۵-۱۶ بهمن ۱۳۹۸



افزایش جذب و پهنای جذب TMDC ها با استفاده از بلور فوتونی

نرگس انصاری، کیمیا فلاح و انسیه محبی

گروه فیزیک، دانشکده فیزیک شیمی، دانشگاه الزهراء، تهران، ایران.

n.ansari@alzahra.ac.ir, k.fallah@student.alzahra.ac.ir, e.mohebi@student.alzahra.ac.ir,

چکیده- امروزه بلورهای دوبعدی کلکوژناید های فلزات واسطه (TMDCs) به علت گاف نواری مستقیم و جذب قابل توجه در ناحیه مرئی در دستگاه های اپتوالکترونیکی بسیار مورد توجه قرار گرفته اند. استفاده از TMDC ها در ساختارهای بلوری باعث افزایش جذب و کارایی آنها خواهد شد. در این مقاله، به منظور طراحی ساختاری با جذب بالا در بازه گسترده ای از طول موج، تاثیر قرارگیری TMDC ها در سه ساختار بلور فوتونی شامل SiO_2 ، Si_3N_4 و TMDC با بهره گیری از روش ماتریس انتقال بررسی شده است. چهار ماده TMDC مورد بررسی مولیبدن دی سولفید (MoS_2)، مولیبدن دی سelenium (MoSe_2)، تنگستن دی سولفید (WS_2) و تنگستن دی سelenium (WSe_2) می باشند که در بهترین ساختار به جذب بالای ۶۶٪ (۹۲٪) در بازه ۴۰۰-۷۰۰ نانومتر (۵۳۰-۴۰۰ نانومتر) دست یافته ایم.

کلید واژه- بلور فوتونی، پهنای جذب، تک لایه های کلکوژناید فلزات واسطه، جذب

Increasing the Absorption and the Broadband Absorption TMDCs with Using Photonic Crystals

Narges Ansari, Kimya Fallah, Ensiyeh Mohebbi

Department of Physics, Alzahra University, Tehran, 1993893973, Iran.

n.ansari@alzahra.ac.ir, k.fallah@student.alzahra.ac.ir, e.mohebi@student.alzahra.ac.ir

Abstract- Nowadays transition material dichalcogenide (TMDC) two-dimensional crystals due to direct band gap and a significant absorption in the visible region have been highly regarded in optoelectronic devices. The use of TMDCs in photonic crystals will increase the absorption and performances of them. In this paper, in order to design a structure with high absorption in a wide range of wavelength, TMDCs wrapping impact in three photonic crystals including SiO_2 , Si_3N_4 and TMDC has been investigated by using the transfer matrix method. Four TMDCs contains Molybdenum disulfide (MoS_2), Molybdenum diselenide (MoSe_2), Tungsten disulfide (WS_2) and Tungsten diselenide (WSe_2) which in best structures we reached to absorption higher than 66% (92%) in range of 400-700 nm (400-530nm).

Keywords: photonic crystals, broadband absorption, Transition material dichalcogenide monolayers, absorption

مقدمه

کلکوژناید های فلزات واسطه ($TMDC^1$) به علت گاف نواری مستقیم و جذب بالای نور در طول موج مرئی، در اپتوالکترونیک و فوتونیک مورد توجه قرار گرفته اند [۱]. از مهم ترین این تک لایه ها می توان به مولیبدن دی سولفید (MoS_2)، مولیبدن دی سلیوم ($MoSe_2$)، تنگستن دی سولفید (WS_2) و تنگستن دی سلیوم (WSe_2) اشاره کرد که نقش مهمی در ترانزیستورها، آشکارگرها، سلول های خورشیدی و ... دارند [۲ و ۳]. این مواد با توجه به ضخامت نازکشان، میزان جذب قابل توجهی دارند اما مقدار جذب آن ها برای کاربری در اپتوالکترونیک نیاز به افزایش دارد.

روش های متفاوتی برای افزایش میزان جذب یا پهنای جذب نوری پیشنهاد شده است که یکی از این روش ها قرار دادن تک لایه های $TMDC$ در بلورهای فوتونی می باشد [۴]. بلورهای فوتونی ساختارهای دی الکتریکی هستند که ضریب شکستشان به طور تناوبی تغییر می کند. به علت سادگی طراحی و ساخت بلورهای فوتونی یک بعدی نسبت به دو و سه بعدی، در این مقاله حالت یک بعدی بلورهای فوتونی مورد بررسی قرار گرفته اند [۳ و ۵].

در این مقاله با قرار دادن یکی از تک لایه های MoS_2 ، $MoSe_2$ ، WS_2 یا WSe_2 در سه ساختار متفاوت بلورهای فوتونی یک بعدی به بررسی تاثیر نوع بلور فوتونی و دوره تناوب بر روی میزان جذب و پهنای جذب پرداخته ایم و در بهینه حالت به جذب بالای ۶۶٪ (۹۲٪) در بازه ی ۴۰۰-۷۰۰ نانومتر (۵۳۰-۴۰۰ نانومتر) رسیده ایم که می توان به عنوان جاذب کامل در بازه طول موج محدود یا در سلول های خورشیدی در کل بازه ی مرئی از آن استفاده کرد.

تئوری

در این مقاله به بررسی ویژگی های اپتیکی سه ساختار بلورفوتونی $(mb)^n$ ، $(ma)^n$ و $(mamb)^n$ پرداخته شده است که a ، b و m به ترتیب SiO_2 ، Si_3N_4 و $TMDC$ هستند و $TMDC$ ها شامل یکی از تک لایه های $MoSe_2$ ، MoS_2 ، WS_2 یا WSe_2 می باشند. نور از هوا به صورت عمود به ساختارهای بلورفوتونی می تابد. جذب ساختارها با استفاده از روش ماتریس انتقال محاسبه می شود [۶]. در این روش ماتریس انتقال ضریب شکست و ضخامت تمام لایه ها نیاز است. ضریب شکست SiO_2 و Si_3N_4 و $TMDC$ ها از مراجع [۷-۹] گرفته شده است. ضخامت $TMDC$ ها [۶] و ضخامت SiO_2 ، Si_3N_4 متناسب با هر $TMDC$ در جدول ۱ آورده شده است.

جدول ۱: ضخامت SiO_2 ، Si_3N_4 متناسب با هر $TMDC$ و ضخامت تمامی $TMDC$ ها

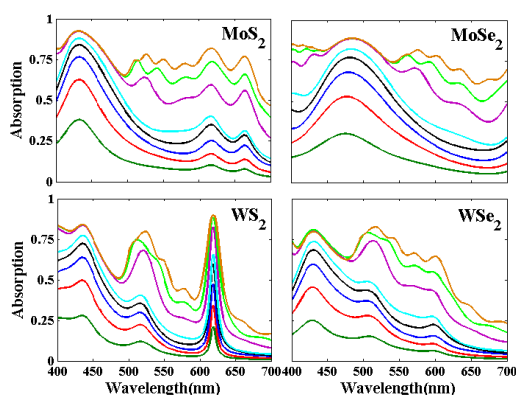
	d_{SiO_2} (نانومتر)	$d_{Si_3N_4}$ (نانومتر)	d_{TMDC} (نانومتر)
MoS_2	۷۲/۱	۵۲/۴	۰/۶۱۵
$MoSe_2$	۷۹/۱	۵۷/۶	۰/۶۴۶
WS_2	۷۲/۳	۵۲/۶	۰/۶۱۸
WSe_2	۷۱/۳	۵۱/۹	۰/۶۴۹

بحث و نتیجه گیری

نوع بلور فوتونی و عدد دوره تناوب بر روی میزان جذب و پهنای جذب تاثیر بسزایی دارد. به منظور یافتن بهترین ساختار با پهنای جذب بالا، طیف جذب سه ساختار $(mb)^n$ ، $(ma)^n$ و $(mamb)^n$ برای هر چهار $TMDC$ در بازه ی ۴۰۰-۷۰۰ نانومتر به ترتیب در شکل ۱ تا ۳ رسم شده است. در

¹ Transition material dichalcogenide

واضح تر میزان جذب سه بلور فوتونی برای هر ۴ تک لایه‌ی TMDC با تعداد ۸۰ لایه در شکل ۴ رسم شده است.



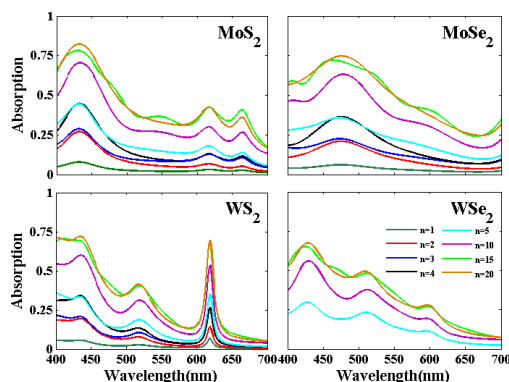
شکل ۳: طیف جذب ساختار $(mamb)^n$ با دوره تناوب‌های ۱، ۲، ۳، ۴، ۵، ۱۰، ۱۵، ۲۰ (با رنگ‌های مشابه شکل ۱) برای تک‌لایه‌های MoS_2 و $MoSe_2$ و WS_2 و WSe_2

جدول ۲: مقایسه‌ی میزان جذب بلورهای فوتونی با تعداد لایه‌ی برابر برای چهار TMDC در سه بازه‌ی مختلف

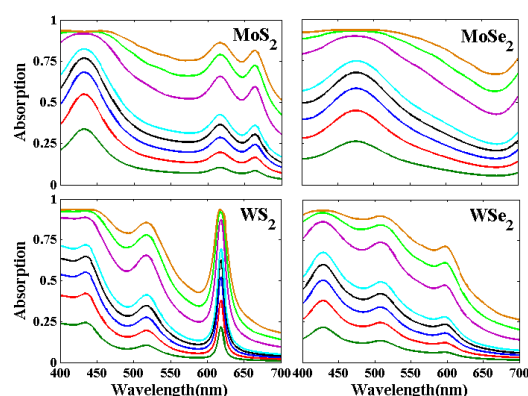
طول موج	بلور فوتونی	٪ جذب			
		MoS_2	$MoSe_2$	WS_2	WSe_2
۴۰۰-۵۳۰	$(mb)^{40}$	۳۵	۵۸	۳۵	۴۰
	$(ma)^{40}$	۸۰	۹۲	۸۰	۸۵
	$(mamb)^{20}$	۶۵	۷۷	۵۰	۶۳
۴۰۰-۶۴۰	$(mb)^{40}$	۳۱	۲۸	۱۱	۱۲
	$(ma)^{40}$	۷۵	۷۱	۳۸	۴۰
	$(mamb)^{20}$	۶۵	۶۸	۳۲	۳۵
۴۰۰-۶۷۵	$(mb)^{40}$	۲۹	۲۵	۶	۸
	$(ma)^{40}$	۷۲	۶۷	۲۱	۳۰
	$(mamb)^{20}$	۶۵	۶۰	۱۸	۲۵

همان طور که در شکل ۴ مشاهده می‌شود ساختار $(ma)^n$ نسبت به بقیه ساختارها در تمام بازه‌های طول موجی جذب بالاتر دارد. همچنین با مقایسه TMDC ها در ساختارها مشاهده می‌شود که MoS_2 ، $MoSe_2$ جذب بالاتری نسبت به WS_2 و WSe_2 در بازه‌ی ۴۰۰-۷۰۰ نانومتر دارند. به دلیل قله جذب تک‌لایه‌ی WS_2 معلق در طول موج ۶۱۹ نانومتر ساختارهای شامل تک‌لایه‌ی WS_2 در این قله جذب بالایی دارند اما با توجه به هدف جذب بالا با پهنای طول موج بیشتر $MoSe_2$ از میان TMDC ها انتخاب می‌شود. ساختار

تمامی شکل‌ها، با افزایش n ، میزان جذب افزایش می‌یابد و با افزایش تناوب از $n > 20$ ، تغییر قابل ملاحظه‌ای در میزان جذب دیده نمی‌شود.



شکل ۴: طیف جذب ساختار $(mb)^n$ با دوره تناوب‌های ۱، ۲، ۳، ۴، ۵، ۱۰، ۱۵، ۲۰ (به ترتیب سبز، قرمز، آبی، مشکی، فیروزه‌ای، بنفش، فسفری، نارنجی) برای تک‌لایه‌های MoS_2 و $MoSe_2$ و WS_2 و WSe_2



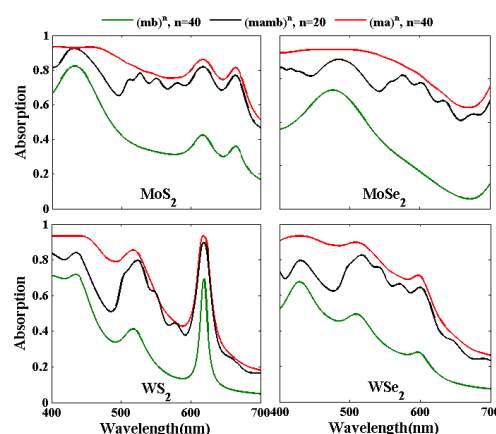
شکل ۵: طیف جذب ساختار $(ma)^n$ با دوره تناوب‌های ۱، ۲، ۳، ۴، ۵، ۱۰، ۱۵، ۲۰ (با رنگ‌های مشابه شکل ۱) برای تک‌لایه‌های MoS_2 و $MoSe_2$ و WS_2 و WSe_2

برای پیدا کردن بهترین ساختار با پهنای طول موجی بالا، میزان جذب هر سه ساختار در سه بازه‌ی طول موجی انتخابی با تعداد لایه‌ی برابر در جدول ۲ بررسی شده‌اند. با توجه به جدول ۲، میزان جذب ساختار $(ma)^n$ از دو ساختار دیگر در هر کدام از بازه‌های انتخابی بیشتر است. جذب بیشتر ساختار $(ma)^n$ به دلیل اختلاف بیشتر ضریب شکست m با a نسبت به m با b است و این عامل بر روی ویژگی مشخصه‌های اپتیکی از جمله جذب موثر است. برای بررسی

مرجع‌ها

- [1] N. P. Sergeant, O. Pincon, M. Agrawal, P. Peumans, "Design of wide-angle solar-selective absorbers using aperiodic metal-dielectric stacks", Opt. Express, Vol. 17, pp. 22800-22812, 2009.
- [2] O. Lopez-Sanchez, D. Lembke, M. Kayci, A. Radenovic, A. Kis, "Ultrasensitive photodetectors based on monolayer MoS₂", Nat. Nanotech. Vol. 8, pp. 497-501, 2013.
- [3] Z. Yin, H. Li, H. Li, L. Jiang, Y. Shi, Y. Sun, G. Lu, Q. Zhang, X. Chen, H. Zhang, "Single-layer MoS₂ phototransistors" ACS. Nano, Vol. 6, pp. 74-80, 2011.
- [4] N. Ansari, E. Mohebbi, "Increasing optical absorption in one-dimensional photonic crystals including MoS₂ monolayer for photovoltaics applications", Opt. Mat., Vol. 62, pp. 152-158, 2016.
- [5] N. Bonod, G. Tayeb, D. Maystre, S. Enoch, E. Popov, "Total absorption of light by lamellar metallic gratings", J. Opt. Express Vol. 16, pp. 15431-15438, 2008.
- [6] N. Ansari, F. Ghorbani, "Light absorption optimization in two-dimensional transition metal dichalcogenide van der Waals heterostructures", J. Opt. Soc. Am. B, Vol. 35, pp. 1179-1185, 2018.
- [7] S. Sahel, R. Amri, D. Gamra, M. Lejeune, M. Benlahsen, K. Zellama, H. Bouchriha, "Effect of sequence built on photonic band gap properties of one-dimensional quasi-periodic photonic crystals: Application to Thue-Morse and Double-period structures", Superlattices and Microstructures, Vol. 111, PP. 1-9, 2017.
- [8] Y. Li, A. Chernikov, X. Zhang, A. Rigosi, M. H. Hill, A. M. van der Zande, D. A. Chenet, E.-M. Shih, J. Hone, and T. F. Heinz, "Measurement of the optical dielectric function of monolayer transition-metal dichalcogenides: MoS₂, MoSe₂, WS₂, and WSe₂", Phys. Rev. B, Vol. 90, pp. 205422, 2014.
- [9] G. Ghosh, "Dispersion-equation coefficients for the refractive index and birefringence of calcite and quartz crystals" Opt. Commun., Vol. 163, pp. 95-102, 1999.

$(ma)^n$ شامل MoSe₂ دارای جذب بالای ۶۶٪ (۹۲٪) در بازه‌ی ۴۰۰-۷۰۰ نانومتر (۵۳۰-۴۰۰ نانومتر) می‌باشد که می‌توان به عنوان جاذب کامل در بازه طول موج ۱۳۰ نانومتر یا در کاربری دستگاه‌های اپتوالکترونیکی با پهنای جذب بالا استفاده کرد.



شکل ۴: طیف جذب هر سه بلور فوتونی برای هر چهار TMDC با تعداد لایه‌ی برابر

نتیجه‌گیری

با هدف داشتن بازه‌ی وسیعی از طول موج با جذب بالا، سه بلور فوتونی با لایه‌های دی الکتریک متشکل از SiO₂ و Si₃N₄ همراه با تک لایه‌ی TMDC بررسی شده است. جذب ساختارها برای تابش عمودی با روش ماتریس انتقال محاسبه می‌شود. در نهایت ساختار $(ma)^n$ برای MoSe₂ دارای جذب بالای ۶۶٪ (۹۲٪) در بازه‌ی ۴۰۰-۷۰۰ نانومتر (۵۳۰-۴۰۰ نانومتر) می‌باشد که می‌تواند برای توسعه‌ی ابزارهای اپتوالکترونیکی مفید واقع شود.