بیست و سومین کنفرانس اپتیک و فوتونیک و نهمین کنفرانس مهندسی و فناوری فوتونیک ایران
دانشگاه تربیت مدرس
۱۴-۱۲ بهمن ۱۳۹۵
23rd Iranian Conference on Optics and Photonics and 9th Conference on Photonics Engineering and Technology
Tarbiat Modares University, Tehran, Iran
January 31- February 2, 2017

# تعیین ثابت گذردهی و جذب تک لایه‌های $WSe_2$ در ناحیه‌ی طول موج مرئی

نرگس انصاری، فریناز قربانی و مریم مرادی

گروه فیزیک، دانشگاه الزهرا، تهران

**چکیده - لایه‌های دوبعدی کلکوژنایدهای فلزات واسطه (*TMDC*) با گاف‌های نواری مستقیم افق جدیدی در کاربری این مواد در فوتونیک و الکترواپتیک ایجاد کرده است. تک لایه $WSe_2$ به عنوان یکی از *TMDC* ها دارای ویژگی‌های اپتیکی ویژه‌ایی می‌باشد. در این مقاله مدل لورنتس را برای ثابت گذردهی تک لایه $WSe_2$ در ناحیه طول موج مرئی و مادون قرمز نزدیک استفاده کرده‌ایم که تطابق بسیار خوبی با نتایج تجربی دارد. رفتار جذب ساختار همانند رفتار قسمت موهومی ثابت گذردهی تک لایه $WSe_2$ است و قله‌های جذب بر فرکانس‌های تشدید مدل لورنتس منطبق می‌باشد. جذب تک لایه $WSe_2$ در حضور چند زیرلایه‌ی متعارف در کارهای تجربی را بررسی نموده و دریافتیم که استفاده از زیرلایه باعث کاهش میزان جذب می‌شود و با افزایش ضریب شکست زیرلایه میزان جذب کاهش می‌یابد. نتایج ما برای استفاده از تک لایه $WSe_2$ در ادوات اپتوالکترونیک می‌تواند مفید باشد.**

کلید واژه- تک لایه $WSe_2$، ثابت گذردهی، جذب، کلکوژنایدهای فلزات واسطه، مدل لورنتس.

# Determination of Permittivity and Absorption of $WSe_2$ Monolayers in the Visible Wavelength

Narges Ansari, Farinaz Ghorbani, Maryam Moradi

Department of Physics, Alzahra University, Tehran

Abstract- Two dimensional transition metal dichalcogenide (TMDC) layers with direct band gap have opened new research horizon for application in photonics and optoelectronics. $WSe_2$ monolayer from TMDCs family shows interesting optical properties. In this paper, we applied the Lorentz model to determine the permittivity of single $WSe_2$ layer in visible and infrared range and found good agreement with those of experimental results. The absorption of the structure is similar to imaginary component of the single $WSe_2$ layer and absorption peaks are found to be coincidence with Lorentz resonance wavelength. We furthermore investigate the absorption of single $WSe_2$ layer on different substrates which is commonly used in experiments. It is found that the substrate has an important role to reduce the absorption and absorption decreases with increasing the refractive index of substrate. Our results can be useful to design optoelectronic devices designed based on TMDCs.

Keywords: absorption, Lorentz model, permittivity, transition metal dichalcogenide, $WSe_2$ monolayer

[ Downloaded from www.opsi.ir on 2026-11-01 ]



این مقاله به شرط در دسترس بودن در وبگاه www.opsi.ir معتبر است.

## ۱- مقدمه

پیشرفت‌های اخیر در توسعه لایه‌های اتمی نازک از بلورهای توده‌ایی با پیوند واندروالس برای اکتشاف لایه‌های دوبعدی، فرصت‌های جدیدی درکاربردهای مواد ایجاد کرده است. این مواد دو بعدی جدید دارای خواص مکانیکی، الکترونیکی و نوری قابل توجهی هستند که در همتایان توده‌ای‌شان وجود ندارد [۱]. با این خواص منحصر به فرد، بلورهای دو بعدی علاقه علمی و فن آوری فوق العاده ای را به‌خود جلب کرده‌اند. گرافن برجسته‌ترین مثال از بلورهای دو بعدی است که ساختار دو بعدی آن، خواص الکترونی و نوری منحصر به فردی را ایجاد کرده است اما عدم وجود یک شکاف انرژی تا حد زیادی کاربرد آن در نیمه هادی مورد نیاز را محدود می‌کند. تک لایه‌های کلکوژنایدهای فلزات واسطه[1] (TMDC) با فرمول شیمیایی $MX_2$ (M = Mo, W; X = S, Se)، گاف‌های نواری مستقیم در ناحیه‌ی مادون قرمز نزدیک و مرئی دارند که افق جدیدی در کاربری این لایه‌های دوبعدی برای فوتونیک به عنوان تابشگر و آشکارسازها و الکترونیک‌های نوری به‌عنوان ترانزیستور باز کرده اند [۲].

تعامل ضعیف بین لایه ایِ واندروالس TMDC ها اجازه می‌دهد تا این مواد با طیف وسیعی از زیرلایه‌ها انطباق پیدا کنند که از ویژگی‌های مطلوب تابشگرهای کوانتومی دو بعدی است که روی زیرلایه‌های مختلف با ضریب اطمینان منتقل می‌شوند که ادغام بر روی تراشه مدارهای فوتونی کوانتومی را قادر می‌سازد [۳].

از سوی دیگر به دلیل برهمکنش قوی نور-ماده و گاف نواری مطلوب ۱ تا ۲ الکترون ولت این مواد، جذب نور خورشید در ضخامت کمتر از ۱ نانومتر درحدود ۵ تا ۱۰ درصد گزارش شده که جذب بیشتری از GaAs و Si را نشان داده است[۴]. جذب نوری تک لایه‌های TMDC در ناحیه‌ی طیفی مرئی و مادون قرمز نزدیک، از طریق انتقال مستقیم بین نوار ظرفیت و نوارهای رسانش است که توجه زیادی را به عنوان منابع تک فوتون بر اساس گاف مستقیم جلب کرده است. به عنوان مثال، تاکنون چندین آشکارساز نوری بر اساس منابع تک فوتون دی‌سولفید مولیبدن، $MoS_2$، و دی‌سلنید تنگستن، $WSe_2$، با راندمان بالا در طول موج‌های مرئی ساخته شده اند [۳].

برهم کنش‌های نور-ماده و توصیف خصوصیات مواد با کمک تابع دی‌الکتریک مواد امکان‌پذیر می‌شود. با استفاده از تابع دی‌الکتریک می‌توان بین داده‌های تجربی و تئوری طیف جذب و عبور و بازتاب ارتباط برقرار کرد. در مرجع [۵]، تابع دی‌الکتریک تک لایه‌های TMDC با استفاده از آنالیز مقید کرامرز کرونیگِ طیف بازتاب، بدست آمده است. استفاده از این روش مستلزم بکارگیری تعداد زیادی فرکانس تشدید در فرایند محاسبات است که زیاد بودن تعداد فرکانس‌ها از نظر فیزیکی مطلوب نیست.

ما در این مقاله به بررسی ویژگی‌های اپتیکی $WSe_2$ به عنوان یکی از مواد TMDC می‌پردازیم. با استفاده از مدل لورنتس در ناحیه مرئی و نزدیک مادون قرمز که فقط چهار فرکانس تشدید در آن بکار رفته تابع دی‌الکتریک تک‌لایه $WSe_2$ را بدست آورده‌ایم که تطابق بسیار خوبی بین نتایج تئوری در مورد طیف‌های بازتاب و جذب با طیف‌های تجربی در مرجع [۵] بدست‌آمده است. همچنین تاثیر زیرلایه بر ویژگی‌های اپتیکی این تک لایه و میزان جذب آن را نیز بررسی کرده‌ایم.

## ۲- تئوری

ساختار مورد بررسی شامل دو محیط دی الکتریک نیمه بی نهایت هوا و زیر لایه به ترتیب با ضریب شکست $n_0$ و $n_s$ می‌باشد که تک لایه $WSe_2$ در مرز بین دو محیط هوا و زیرلایه قرار دارد.

برای بدست‌آوردن مشخصه‌های اپتیکی ساختار، طیف عبور، جذب و بازتاب، نیازمند ارائه‌ی مدل برای ثابت گذردهی تک لایه $WSe_2$ هستیم. مدل لورنتس به عنوان مدل مناسب توجیح کننده خواص نوری تک لایه $WSe_2$ در محدوده‌ی طول موج مرئی، ۳۰۰ تا ۸۰۰ نانومتر پیشنهاد می‌شود که در این مدل ثابت گذردهی به صورت

$$\varepsilon(\omega) = \varepsilon_\infty + \sum_{j=1}^{4} \frac{a_j \omega_p^2}{\omega_j^2 - \omega^2 - i\omega b_j}$$

تعریف می‌شود که در آن $\omega_p$ فرکانس پلاسما، $\varepsilon_\infty$ گذردهی DC، $\omega_j$ فرکانس تشدید، $a_j$ قدرت نوسان و $b_j$ فاکتور میرایی نوسانگر $j$ ام می‌باشد[۶]. ثابت گذردهی تک لایه $WSe_2$ را می‌توان به صورت $\varepsilon = \varepsilon_{real} + \varepsilon_{imag}$ نمایش داد. که $\varepsilon_{real}$ و $\varepsilon_{imag}$ به ترتیب قسمت حقیقی و موهومی ثابت گذردهی می‌باشد.

[1] Transition Metal Dichalcogenides (TMDC)



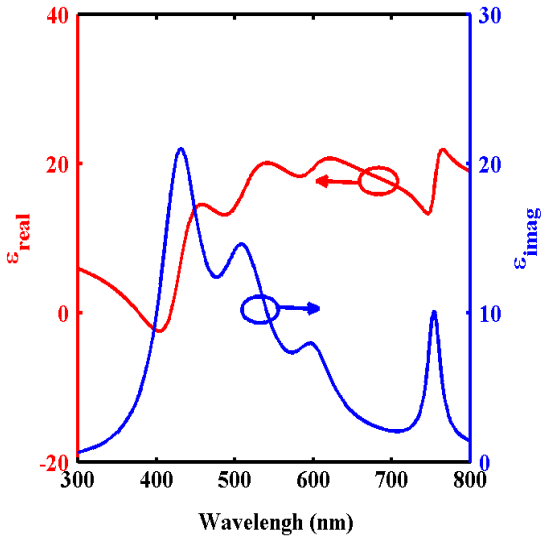
این مقاله به شرط در دسترس بودن در وبگاه www.opsi.ir معتبر است.

[ Downloaded from www.opsi.ir on 2026-11-01 ]

طیف عبور و بازتاب ساختار برای تابش عمودی، با استفاده از روش ماتریس انتقال[۲] محاسبه‌می‌شوند [۷]. با مشخص بودن میزان عبور (T) و بازتاب (R)، جذب (A) از رابطه $A=1-R-T$ بدست می‌آید. در محاسبات همه مواد غیر مغناطیسی فرض می‌شود($\mu = 1$) و ضخامت تک لایه $WSe_2$، ۰/۶۴۹ نانومتر می‌باشد. ضریب شکست مختلط $WSe_2$ با استفاده از $N(\lambda) = n + ik = \sqrt{\varepsilon_{WSe_2}}$ بدست می‌آید که $n$ و $k$ به ترتیب ضریب شکست و ضریب خاموشی ماده نامیده می‌شود.

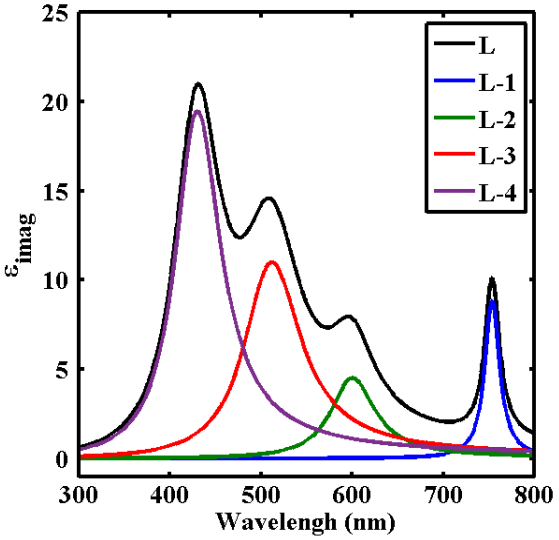
## ۳- نتایج

با توجه به وابستگی ویژگی‌های اپتیکی به ثابت گذردهی تک لایه $WSe_2$، قسمت حقیقی و موهومی $\varepsilon_{WSe_2}$ بدست آمده از روش لورنتس در شکل ۱ نشان داده شده است.



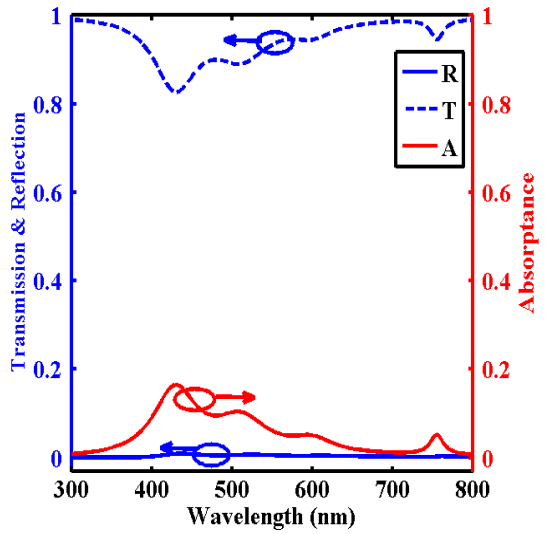

شکل۱- قسمت موهومی و حقیقی ثابت گذردهی تک لایه $WSe_2$ بر حسب طول موج.

نتایج عددی ثابت گذردهی $WSe_2$ با مدل لورنتس، تطابق بسیار خوبی با نتایج ذکر شده در مقاله [۵] دارد. همانطور که در شکل دیده می‌شود قسمت موهومی گذردهی دارای ۴ پیک در طول موج های ۴۳۰، ۵۰۸، ۵۹۸و ۷۵۳ نانومتر می-باشد که هر یک از طول موج‌ها همان طول موج‌های تشدید مدل لورنتس هستند. تاثیر هر یک از جملات نوسانی مدل لورنتس، در بخش موهومی گذردهی $WSe_2$، در شکل ۲ نشان داده شده است.




شکل۲- بخش‌های موهومی ثابت گذردهی مربوط به مدل لورنتس برای j=1,2,3,4.

ویژگی‌های اپتیکی، طیف عبور، بازتاب و جذب، تک لایه $WSe_2$ معلق یعنی برای حالتی که زیر لایه هوا باشد، در شکل ۳ نشان داده شده است.




شکل۳- طیف عبور، بازتاب و جذب تک لایه$WSe_2$ بر حسب طول موج.

میزان بازتاب در کل بازه‌ی طول موج مرئی تقریبا صفر است در نتیجه با افزایش جذب، عبور کاهش می‌یابد. با توجه به وابستگی جذب اپتیکی به قسمت موهومی گذردهی لایه‌ها و بزرگ بودن $\varepsilon_{imag}$ تک لایه $WSe_2$ در ناحیه مرئی نسبت به هوا، رفتار جذب ساختار تحت تاثیر قسمت موهومی گذردهی

[۲] Transfer Matrix Method (TMM)



این مقاله به شرط در دسترس بودن در وبگاه www.opsi.ir معتبر است.

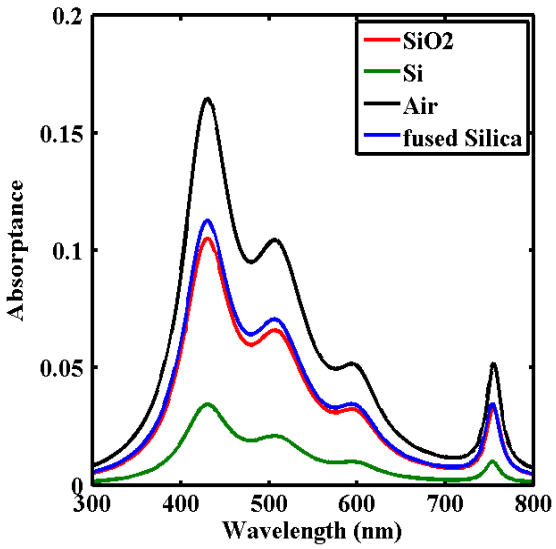
[ Downloaded from www.opsi.ir on 2026-11-01 ]

تک لایه $WSe_2$، $\varepsilon_{imag}$ ، قرار می‌گیرد و در فرکانس‌های تشدید، پیک‌های جذب مشاهده می‌شود. بیشینه مقدار جذب در طول موج ۴۳۰ نانومتر برابر با ۰/۱۶۴ است و در بازه‌ی ۴۰۳ تا ۵۱۶ نانومتر دارای کمینه جذب ۰/۱۰ است که با توجه به ضخامت کمتر از یک نانومتر تک لایه $WSe_2$ مقدار قابل توجهی است.

از آنجایی‌که تهیه‌ی تک لایه $WSe_2$ با زیرلایه هوا امکان پذیر نمی‌باشد باید ویژگی‌های $WSe_2$ در حضور زیرلایه بررسی شود. وجود زیرلایه به خاطر بازتاب‌های متوالی روی جذب ساختار اثر می‌گذارد. بدین منظور زیرلایه‌های fused Silica، Si و $SiO_2$ که بیشتر در کارهای تجربی مورد استفاده قرار می‌گیرند را انتخاب کردیم که ضریب شکست $n_{fusedSilica}=1.459$، ضریب شکست $n_{Si}$ از مرجع[۸] گرفته شده است و ضریب شکست $n_{SiO2}$ از رابطه‌ی

$$n_{SiO2}=\sqrt{1.28+\frac{1.07\lambda^2}{(\lambda\times10^{-3})^2-1.005\times10^{-2}}+\frac{1.102\lambda^2}{(\lambda\times10^{-3})^2-100}}$$

بدست می‌آید که در آن طول موج برحسب نانومتر است [۹].




شکل۴- اثر زیرلایه‌های متفاوت در میزان جذب ماده $WSe_2$.

تاثیر زیرلایه در جذب را با حالتی که زیرلایه هوا باشد در شکل۴ مقایسه کرده‌ایم. می‌توان مشاهده نمود که استفاده از زیرلایه باعث کاهش میزان جذب می‌شود. در بین زیرلایه-های انتخاب شده کمترین ضریب شکست مربوط fused Silica و بیشترین مربوط به Si است. مشاهده می‌شود که میزان جذب در ساختاری با زیرلایه با ضریب شکست بالاتر نسبت به حالت معلق بیشتر کاهش می‌یابد.

## ۴-نتیجه‌گیری

ثابت گذردهی تک لایه $WSe_2$ در ناحیه طول موج مرئی و مادون قرمز نزدیک با استفاده از مدل لورنتس را بررسی کرده‌ایم که تطابق بسیار خوبی با نتایج تجربی دارد. رفتار جذب ساختار همانند رفتار قسمت موهومی ثابت گذردهی تک لایه $WSe_2$ است و قله‌های جذب بر فرکانس‌های تشدید مدل لورنتس منطبق می‌باشد. جذب تک لایه $WSe_2$ در حضور چند زیرلایه‌ی متعارف در کارهای تجربی را بررسی نموده و دریافتیم که استفاده از زیرلایه باعث کاهش میزان جذب می‌شود و با افزایش ضریب شکست زیرلایه میزان جذب کاهش می‌یابد.

## ۵-مراجع


[1] K. F. Mak and J. Shan, “Photonics and optoelectronics of 2D semiconductor transition metal dichalcogenides”, Nat. Photonics, Vol. 10, No. 282, pp. 216-226, 2016.

[2] K. L. Seyler, J. R. Schaibley, P. Gong, P. Rivera, A. M. Jones, S. Wu, J. Yan, D. G. Mandrus, W. Yao and X. Xu, “Electrical control of second-harmonic generation in a $WSe_2$ monolayer transistor”, Nat. Nanotechnology, Vol. 10, pp. 407-411, 2015.

[3] Y. J. Noori, Y. Cao, J. Roberts, C. Woodhead, R. Bernardo-Gavito, P. Tovee, and R. J. Young, “Photonic crystals for enhanced light extraction from 2D materials”, ACS Photonics, Vol.3, No.12, pp. 2515-2520, 2016.

[4] Z. Zheng, T. Zhang, J. Yao, Y. Zhang, J. Xu and G. Yang, “Flexible transparent and ultra-broadband photodetector based on large-area $WSe_2$ film for wearable devices”, Nanotechnology, Vol. 27, No. 22, pp. 225501-225512, 2016.

[5] Y. Li, A.Chernikov, X. Zhang, A. Rigosi, H. M. Hill, A. M. Zande, D. A. Chenet, E. M. Shih, J. Hone, and T. F. Heinz, “Measurement of the optical dielectric function of monolayer transition-metal dichalcogenides: $MoS_2$, $MoSe_2$, $WS_2$, and$WSe_2$”, Phys. Rev. B, Vol. 90, pp. 205422-205427, 2014.

[6] B. Mukherjee, F. Tseng, D. Gunlycke, K. Kumar, G. Eda and E. Simsek, “Complex electrical permittivity of the monolayer molybdenum disulfide ($MoS_2$) in near UV and visible”. Opt. Mat. Express, Vol. 5, pp. 447-455, 2015.

[7] T. Zhan, X. Shi, Y. Dai, X. Liu, and J. Zi, “Transfer matrix method for optics in Graphene layers”, J. Phys. Condens. Matter, Vol. 25, No. 21, pp.5301-5309, 2013.

[8] M. A. Green, and M. J. Keevers, “Optical peroperties of intrinsic silicon at 300 K”, Progress in photovoltaics, Vol. 3, pp. 189-192, 1995.

[9] G. Ghosh, “Dispersion-equation coefficients for the reflective index and birefringence of calcite and quartz crystals,” Opt. Commun., Vol. 163, pp. 95-102, 1999.




این مقاله به شرط در دسترس بودن در وبگاه www.opsi.ir معتبر است.

[ Downloaded from www.opsi.ir on 2026-11-01 ]