

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



# افزایش جذب و پهنای جذب TMDCها با استفاده از بلور فوتونی

نرگس انصاری، کیمیا فلاح و انسیه محبی

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

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

چکیده – امروزه بلورهای دوبعدی کلکوژنایدهای فلزات واسطه (TMDCs) به علت گاف نواری مستقیم و جذب قابل توجه در ناحیهی مرئی در د ستگاههای اپتوالکترونیکی ب سیار مورد توجه قرار گرفتهاند. ا ستفاده از TMDC ها در ساختارهای بلوری باعث افزایش جذب و کارایی آنها خواهد شـد. در این مقاله، به منظور طراحی سـاختاری با جذب بالا در بازهی گسـتردهای از طول موج، تاثیر قرارگیری TMDCها در سه ساختار بلور فوتونی شامل SiO<sub>2</sub>، Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> او TMDC با جذب بالا در بازهی گسـتردهای از طول موج، تاثیر است. چهار مادهی TMDCها در سه ساختار بلور فوتونی شامل SiO<sub>2</sub>، MoS<sub>2</sub> و TMDC با بهره گیری از روش ماتریس انتقال برر سی شده و تنگ ستن دی سلنیوم (WSe) می با شند که در بهترین ساختار به جذب بالای ۶۶٪ (۲۰٪) در بازهی در بازهی ۲۰۰– ۵۲۰ نانومتر نانومتر) دست یافتهایم.

کلید واژه- بلورفوتونی، پهنای جذب، تکلایههای 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<sub>2</sub>, Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> and TMDC has been investigated by using the transfer matrix method. Four TMDCs contains Molybdenum disulfide (MoS<sub>2</sub>), Molybdenum diselenide (MoSe<sub>2</sub>), Tungsten disulfide (WS<sub>2</sub>) and Tungsten diselenide (WSe<sub>2</sub>) 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

کلکوژنایدهای فلزات واسطه ('TMDC) به علت گاف نواری مستقیم و جذب بالای نور در طول موج مرئی، در اپتوالکترونیک و فوتونیک مورد توجه قرار گرفتهاند [۱]. از مهمترین این تکلایهها میتوان به مولیبدن دی سولفید (MoS2)، مولیبدن دی سلنیوم (MoSe2)، تنگستن دی سولفید (WSe) و تنگستن دی سلنیوم (WSe2) اشاره کرد که نقش مهمی در ترانزیستورها، آشکارگرها، سلولهای خورشیدی و ... دارند [۲ و ۳]. این مواد با توجه به ضخامت نازکشان، میزان جذب قابل توجهی دارند اما مقدار جذب آنها 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 تکلایههای MoS<sub>2</sub> مقاله در سه ساختار متفاوت بلورهای MoS<sub>2</sub> فوتونی یک بعدی به بررسی تاثیر نوع بلور فوتونی و دوره تناوب بر روی میزان جذب و پهنای جذب پرداختهایم و در بهینه حالت به جذب بالای ۶۶٪ (٪۹۲) در بازهی ۴۰۰-معینه حالت به جذب بالای ۶۶٪ (٪۹۲) در بازهی ۴۰۰-عنوان جاذب کامل در بازه طول موج محدود یا در سلولهای خورشیدی در کل بازهی مرئی از آن استفاده کرد.

#### تئورى

در این مقاله به بررسی ویژگیهای اپتیکی سه ساختار بلورفوتونی (ma)، (ma) و (mamb) پرداخته شده است که A d و m به ترتیب  $(ma)^2$ ،  $Si_3N_4$  ،SiO<sub>2</sub> و TMDC هستند و MoSe<sub>2</sub> ،MoS<sub>2</sub> و MoS<sub>2</sub>  $(mas)^2$  و MoSe<sub>2</sub>  $(mas)^2$  we WS<sub>2</sub> اشامل یکی از تک لایههای  $(mas)^2$  and  $(mas)^2$  we we we ve to motion and the matrice of the matrice of the matrice it (وش ماتریس انتقال محاسبه می شود [۶]. در این روش ماتریس انتقال ضریب شکست و ضخامت تمام لایهها نیاز از روش ماتریس انتقال محاسبه می شود [۶]. در این روش ماتریس انتقال ضریب شکست و ضخامت تمام لایهها نیاز از روش ماتریس انتقال محاسبه می شود [۶]. در این روش ماتریس انتقال محاسبه می شود [۶]. در این روش ماتریس انتقال ضریب شکست و ضخامت تمام لایه از مراجع است. ضریب شده است. ضخامت  $(mas)^2$  و  $(mas)^2$  ( $\gamma$ فخامت  $(mas)^2$  ( $\gamma$ ) متناسب با هر  $(mas)^2$  ( $\gamma$ ) ( $\gamma$ آورده شده است.

جدول۱:. ضخامت Si<sub>3</sub>N4 ،SiO<sub>2</sub> متناسب با هر TMDC و ضخامت تمامیTMDC ها

	d <sub>SiO2</sub> (نانومتر)	d <sub>Si<sub>3</sub>N4</sub> (نانومتر)	dтмос (نائومتر)
MoS <sub>2</sub>	۲/۱	٥٢/٤	•/٦١٥
MoSe <sub>2</sub>	٧٩/١	٥٧/٦	•/٦٤٦
WS <sub>2</sub>	۲۲/۳	٥٢/٦	•/٦١٨
WSe <sub>2</sub>	۷١/٣	٥١/٩	•/٦٤٩

### بحث و نتيجه گيرى

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 <sup>n</sup>(mb)، (ma) و <sup>n</sup>(mamb) برای هر چهار TMDC در بازهی ۴۰۰-۷۰۰ نانومتر به ترتیب درشکل ۱ تا ۳ رسم شده است. در

<sup>&</sup>lt;sup>\</sup> Transition material dichalcogenide

تمامی شکلها، با افزایش n، میزان جذب افزایش مییابد و با افزایش تناوب از ۲۰<n، تغییر قابل ملاحظهای در میزان جذب دیده نمی شود.



شکل۱: طیف جذب ساختار "(mb) با دوره تناوبهای ۱، ۲، ۳، ۴، ۵، ۱۰، ۱۵، ۲۰ (به ترتیب سبز، قرمز، آبی، مشکی، فیروزهای، بنفش، فسفری، نارنجی) برای تکلایههای MoS2 و MoSe و WS2 و WS2



، ۱۰، ۵۱، ۱۰ (با رنگهای مشابه سکل) برای نگلایههای MoS<sub>2</sub> و MoS<sub>2</sub> و WS2 و WS2

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 شده¬اند. با توجه به جدول۲، میزان جذب ساختار <sup>n</sup>(ma) از دو ساختار دیگر در هر کدام از بازههای انتخابی بیشتر است. جذب بیشتر ساختار<sup>n</sup>(ma) به دلیل اختلاف بیشتر ضریب شکست بیشتر ساختار<sup>n</sup>(ma) به دلیل اختلاف بیشتر ضریب شکست m با a نسبت به m با d است و این عامل بر روی ویژگی مشخصههای اپتیکی از جمله جذب موثر است. برای بررسی

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



شکل۳: طیف جذب ساختار "(mamb) با دورهتناوبهای ۱، ۲، ۳، ۴، ۵، ۱۰، ۱۵، ۲۰ (با رنگهای مشابه شکل ۱) برای تکلایههای MoS<sub>2</sub> و MoSe<sub>2</sub> و WSe

جدول۲:مقایسهی میزان جذب بلورهای فوتونی با تعداد لایهی برابر برای چهار TMDC در سه بازهی مختلف

طول	بلور فوتونى	جذب ٪			
موج		MoS <sub>2</sub>	MoSe <sub>2</sub>	WS <sub>2</sub>	WSe <sub>2</sub>
-4	(mb) <sup>*.</sup>	۳۵	۵۸	۳۵	4.
۵۳۰	(ma) <sup>*.</sup>	٨٠	٩٢	٨٠	٨۵
	(mamb) <sup>r.</sup>	۶۵	۷۷	۵۰	۶۳
-4	(mb) <sup>*.</sup>	۳۱	۲۸	11	١٢
66.	(ma) <sup>*.</sup>	۷۵	۷۱	۳۸	۴.
	(mamb) <sup>r.</sup>	۶۵	۶۸	۳۲	۳۵
-4	(mb) <sup>*.</sup>	۲۹	۲۵	۶	٨
۶۷۵	(ma) <sup>*.</sup>	۷۲	۶۷	۲۱	٣٠
	(mamb) <sup>r.</sup>	۶۵	۶.	۱۸	۲۵

همان طور که در شکل ۴ مشاهده می شود ساختار "(ma) نسبت به بقیه ساختارها در تمام بازههای طول موجی جذب بالاتر دارد. همچنین با مقایسه TMDC ها در ساختارها مشاهده می شود که MoSe MoSe جذب بالاتری نسبت به S2و WSe در بازهی ۴۰۰–۲۰۰ نانومتر دارند. به دلیل قله جذب تک لایه ی S2 معلق در طول موج ۶۱۹ نانومتر ساختارهای شامل تک لایه ی S2 در این قله جذب بالایی دارند اما با توجه به هدف جذب بالا با پهنای طول موج بیشتر MoSe از میان TMDC ها انتخاب می شود . ساختار

#### مرجعها

- 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 MoS<sub>2</sub>", 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 MoS<sub>2</sub> phototransistors" ACS. Nano, Vol. 6, pp. 74-80, 2011.
- [4] N. Ansari, E. Mohebbi, "Increasing optical absorption in one-dimensional photonic crystals including  $MoS_2$  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 transitionmetal dichalcogenides: MoS<sub>2</sub>, MoSe<sub>2</sub>, WS<sub>2</sub>, and WSe<sub>2</sub>", 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) شامل MoSe2 دارای جذب بالای ۶۶٪ (٬۹۲٪) در بالای ۵۶٪ (٬۹۲٪) در بازهی ۴۰۰–۲۰۰ نانومتر (۴۲۰–۴۰۰ نانومتر) میباشد که می توان به عنوان جاذب کامل در بازه طول موج ۱۳۰ نانومتر یا در کاربری دستگاههای اپتوالکترونیکی با پهنای جذب بالا استفاده کرد.



شکل۴: طیف جذب هر سه بلورفوتونی برای هر چهار TMDC با تعداد لایهی برابر

## نتيجهگيرى

با هدف داشتن بازهی وسیعی از طول موج با جذب بالا، سه بلور فوتونی با لایههای دی الکتریک متشکل از SiO<sub>2</sub> و Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> همراه با تک لایهی TMDC بررسی شده است. جذب ساختارها برای تابش عمودی با روش ماتریس انتقال محاسبه میشود. در نهایت ساختار <sup>(ma)</sup> برای MoSe<sub>2</sub> محاسبه میشود. در نهایت ساختار <sup>(ma)</sup> برای در انومتر دارای جذب بالای ۶۶٪ (۲۰٪) در بازهی ۴۰۰–۷۰۰ نانومتر (۵۳۰–۴۰۰ نانومتر) میباشد که میتواند برای توسعهی ابزارهای اپتوالکترونیکی مفید واقع شود.