



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 TMDCها 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 TMDCها 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 TMDCها در سه ساختار بلور فوتونی شامل  $\text{SiO}_2$ ،  $\text{Si}_3\text{N}_4$  و TMDC با بهره گیری از روش ماتریس انتقال بررسی شده است. چهار ماده TMDC مورد بررسی مولیبدن دی سولفید ( $\text{MoS}_2$ )، مولیبدن دی سلینیوم ( $\text{MoSe}_2$ )، تنگستن دی سولفید ( $\text{WS}_2$ ) و تنگستن دی سلینیوم ( $\text{WSe}_2$ ) می باشند که در بهترین ساختار به جذب بالای ۶۶٪ (۹۲٪) در بازه ۴۰۰-۷۰۰ نانومتر (۴۰۰-۵۳۰ 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  $\text{SiO}_2$ ،  $\text{Si}_3\text{N}_4$  and TMDC has been investigated by using the transfer matrix method. Four TMDCs contains Molybdenum disulfide ( $\text{MoS}_2$ )، Molybdenum diselenide ( $\text{MoSe}_2$ )، Tungsten disulfide ( $\text{WS}_2$ ) and Tungsten diselenide ( $\text{WSe}_2$ ) 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<sup>۱</sup>) 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<sub>2</sub>)، مولیبدن دی سلنیوم (MoSe<sub>2</sub>)، تنگستن دی سولفید (WS<sub>2</sub>) و تنگستن دی سلنیوم (WSe<sub>2</sub>) 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<sub>2</sub>، MoSe<sub>2</sub>، WS<sub>2</sub> یا WSe<sub>2</sub> 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 ۴۰۰-۷۰۰ نانومتر (۵۳۰-۴۰۰ نانومتر) رسیده ایم که می توان به عنوان جذب کامل در بازه طول موج محدود یا در سلول های خورشیدی در کل بازه مرئی از آن استفاده کرد.

## تئوری

در این مقاله به بررسی ویژگی های اپتیکی سه ساختار بلور فوتونی (mb)<sup>n</sup>، (ma)<sup>n</sup> و (mamb)<sup>n</sup> پرداخته شده است که a، b و m به ترتیب SiO<sub>2</sub>، Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> و TMDC هستند و TMDC ها شامل یکی از تک لایه های MoS<sub>2</sub>، MoSe<sub>2</sub>، WS<sub>2</sub> یا WSe<sub>2</sub> می باشند. نور از هوا به صورت عمود به ساختارهای بلور فوتونی 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<sub>2</sub> و Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> و TMDC ها از مراجع [۷-۹] گرفته شده است. ضخامت TMDC ها [۶] و ضخامت SiO<sub>2</sub>، Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> متناسب با هر TMDC در جدول ۱ آورده شده است.

جدول ۱: ضخامت SiO<sub>2</sub>، Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> متناسب با هر TMDC و ضخامت تمامی TMDC ها

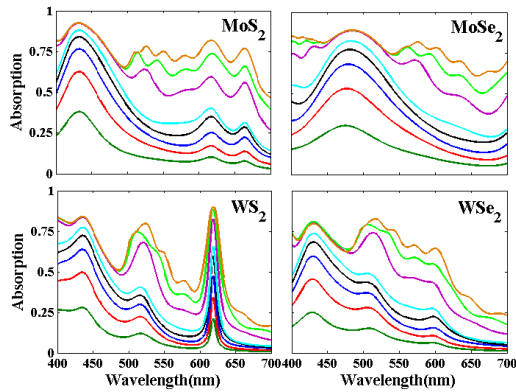
	$d_{SiO_2}$ (نانومتر)	$d_{Si_3N_4}$ (نانومتر)	$d_{TMDC}$ (نانومتر)
MoS <sub>2</sub>	۷۲/۱	۵۲/۴	۰/۶۱۵
MoSe <sub>2</sub>	۷۹/۱	۵۷/۶	۰/۶۴۶
WS <sub>2</sub>	۷۲/۳	۵۲/۶	۰/۶۱۸
WSe <sub>2</sub>	۷۱/۳	۵۱/۹	۰/۶۴۹

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

<sup>۱</sup> 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.



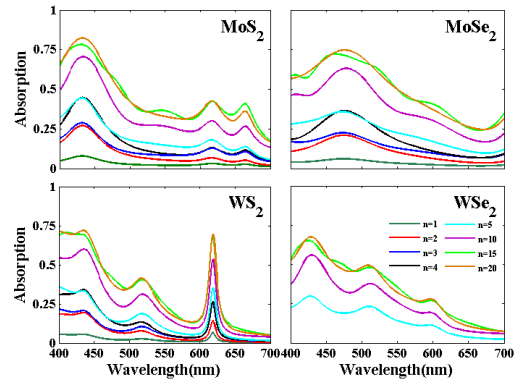
شکل ۳: طیف جذب ساختار  $(mamb)^n$  با دوره تناوب‌های ۱، ۲، ۳، ۴، ۵،  
 ۱۰، ۱۵، ۲۰ (با رنگ‌های مشابه شکل ۱) برای تک‌لایه‌های  $MoS_2$  و  
 $MoSe_2$  و  $WS_2$  و  $WSe_2$

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

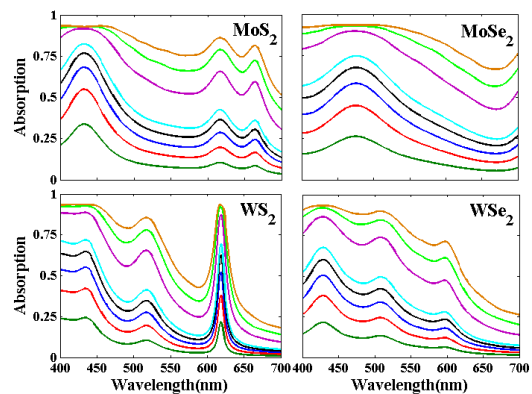
طول موج	بلور فوتونی	٪ جذب			
		$MoS_2$	$MoSe_2$	$WS_2$	$WSe_2$
۴۰۰-۵۳۰	$(mb)^{40}$	۳۵	۵۸	۳۵	۴۰
	$(ma)^{40}$	۸۰	۹۲	۸۰	۸۵
	$(mamb)^{20}$	۶۵	۷۷	۵۰	۶۳
۴۰۰-۶۴۰	$(mb)^{40}$	۳۱	۲۸	۱۱	۱۲
	$(ma)^{40}$	۷۵	۷۱	۳۸	۴۰
	$(mamb)^{20}$	۶۵	۶۸	۳۲	۳۵
۴۰۰-۶۷۵	$(mb)^{40}$	۲۹	۲۵	۶	۸
	$(ma)^{40}$	۷۲	۶۷	۲۱	۳۰
	$(mamb)^{20}$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



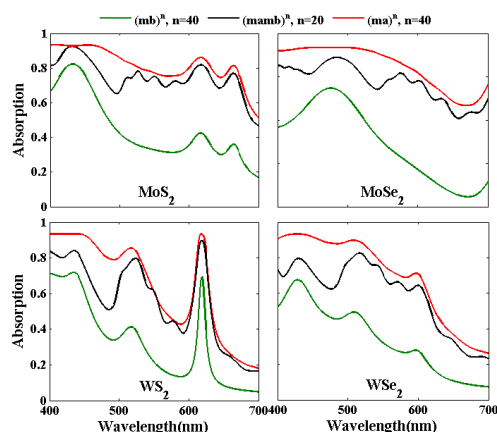
شکل ۵: طیف جذب ساختار  $(ma)^n$  با دوره تناوب‌های ۱، ۲، ۳، ۴، ۵، ۱۰، ۱۵، ۲۰ (با رنگ‌های مشابه شکل ۱) برای تک‌لایه‌های  $MoS_2$  و  $MoSe_2$  و  $WS_2$  و  $WSe_2$

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 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<sub>2</sub> 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: 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.

$(ma)^n$  شامل 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 دی‌الکتریک 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  $(ma)^n$  برای MoSe<sub>2</sub> دارای جذب بالای ۶۶٪ (۹۲٪) در بازه‌ی ۴۰۰-۷۰۰ نانومتر (۵۳۰-۴۰۰ نانومتر) می‌باشد که می‌تواند برای توسعه‌ی ابزارهای اپتوالکترونیکی مفید واقع شود.