



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 ساختار شبه بلور فوتونی رودین شاپیرو شامل تک لایه ی $\text{MoS}_2$ در بازه ی طول موج مرئی

نرگس انصاری، انسیه محبی و کیمیا فلاح

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

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

چکیده - امروزه مولیبدیم دی سولفات،  $\text{MoS}_2$ ، قابلیت چشمگیری برای استفاده در ابزارهای اپتوالکترونیکی نشان داده است که طراحی این ابزارها در بازه ی گسترده ی اپتیکی در مورد بحث و گفت و گو می باشد. در این مقاله در راستای افزایش پهنای باند و طیف جذب، از شبه بلورهای فوتونی رودین شاپیرو با لایه های دی الکتریک متشکل از  $\text{Si}_3\text{N}_4$  و  $\text{SiO}_2$  همراه با تک لایه ی  $\text{MoS}_2$  استفاده شده است. ویژگی اپتیکی ساختارها با روش ماتریس انتقال در ناحیه ی طول موج مرئی به صورت نظری مورد بررسی قرار گرفته است که ضریب شکست تک لایه ی  $\text{MoS}_2$  در ناحیه ی طول موج مرئی از روش لورنتس محاسبه می شود. جذب در این ساختارها به بالای ۷۰٪ در بازه ی طول موج مرئی رسیده است.

کلید واژه - روش ماتریس انتقال، روش لورنتس، شبه بلور رودین شاپیرو، طیف جذب، مولیبدیم دی سولفات.

## Increasing Absorption of Rudin-Shapiro Quasi-Photonic Crystals Including $\text{MoS}_2$ in Visible Range

Narges Ansari, Ensiyeh Mohebbi, and Kimya Fallah

Department of Physics, Alzahra University, Tehran, 1993893973, Iran.  
n.ansari@alzahra.ac.ir, e.mohebi@student.alzahra.ac.ir, k.fallah@student.alzahra.ac.ir.

**Abstract-** Nowadays Molybdenum Disulfides ( $\text{MoS}_2$ ) have represented potential applications in optoelectronic devices which design of these devices is under debate in a wide optical range. In this paper, we design Rudin-Shapiro quasi-photonic crystals (quasi-PCs) based on  $\text{Si}_3\text{N}_4$ ,  $\text{SiO}_2$  layers and  $\text{MoS}_2$  monolayers for increasing broadband and absorption spectra. Optical property of structures is calculated by Transfer matrix method theoretically which refractive index of the  $\text{MoS}_2$  monolayer was determined based on the Lorentz model. Absorption of this structure is achieved higher than 70% in visible range.

**Keywords:** Transfer Matrix Methods, Lorentz Model, Rudin-Shapiro Quasi-Photonic Crystals, Absorption Spectra, Molybdenum Disulfides.

## مقدمه

مواد تک‌لایه دوبعدی، مواد نوینی هستند که به عنوان لایه های فعال در دستگاه‌های با جذب کنندگی بالا مورد استفاده قرار می‌گیرند [۱]. از نانو ساختارهای دوبعدی، تک لایه‌ی مولیبدیم دی سولفات،  $MoS_2$ ، می‌باشد که با توجه به ضخامت نانومتری‌اش، میزان جذب قابل توجهی به علت گاف‌های نواری مستقیم در ناحیه‌ی طول موج مرئی دارد [۲] و افق جدیدی را در کاربری‌های اپتوالکترونیکی مانند ترانزیستورها، آشکارگرها، سلول‌ها خورشیدی و ... باز کرده است. گاف نواری مستقیم تک‌لایه‌ی  $MoS_2$  در سه طول موج ۴۳۳، ۶۱۸ و ۶۶۴ نانومتر به ترتیب با قله‌های جذب ۳۸٪، ۱۵٪ و ۱۳٪ می‌باشد [۳]. برای عملکرد بهتر دستگاه‌های اپتوالکترونیکی شامل تک‌لایه‌ی  $MoS_2$ ، جذب بالاتر با پهنای بیشتر لازم است. در سال‌های اخیر روش‌های تئوری و تجربی مختلفی همانند بلورهای فوتونی و ساختارهای لایه‌ای برای افزایش جذب در پهنای گسترده از طول موج در ساختارهای یک بعدی به دلیل سادگی در طراحی و ساخت پیشنهاد شده است [۴ و ۵].

بررسی‌ها نشان داده میزان جذب با استفاده از ساختارهای شبه بلور فوتونی نیز افزایش می‌یابد. شبه بلورهای فوتونی نوعی بلور فوتونی هستند که هرکدام از آنها برای چیدمان لایه‌های خود از توابع خاصی پیروی می‌کنند. استفاده از تک‌لایه  $MoS_2$  در لایه‌های متناوب شبه بلور فوتونی فیبوناچی و تومورس، جذب را در پهنای وسیعی به بالای ۹۰٪ در نواحی طول موجی متفاوت رسانده‌اند [۶ و ۷].

در این مقاله به منظور افزایش جذب با پهنای جذب بالا از شبه بلور فوتونی رودین شاپیرو با لایه‌های دی الکتریک متشکل از  $Si_3N_4$  و  $SiO_2$  همراه با تک لایه‌ی  $MoS_2$  استفاده شده است که به پهنای وسیعی با جذب بالای ۷۰٪ در

نواحی طول موجی متفاوت دست یافته‌ایم. این ساختارهای جاذب افق جدیدی را برای کاربردهای اپتوالکترونیکی گشوده‌است.

## تئوری

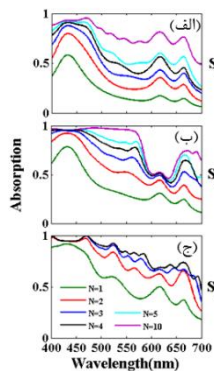
در این مقاله به منظور افزایش میزان جذب با پهنای طول موجی وسیع، از شبه بلور رودین شاپیرو استفاده شده است. در شبه بلور رودین شاپیرو، لایه‌ی  $S_0$  و  $S_1$  به ترتیب  $A$  و  $AA$  در نظر گرفته شده است. با استفاده از روابط  $AA \rightarrow AAAB$  و  $AB \rightarrow AABA$  و  $BA \rightarrow BBAB$  و  $BB \rightarrow BBBA$  می‌توانیم سایر جملات این شبه بلور فوتونی را بنویسیم که به ترتیب به صورت:  $S_2 = AAAB$ ،  $S_3 = AAABAABA$ ،  $S_4 = AAABAABAAAABBBAB$  می‌باشند که  $A=ma$  و  $B=mb$  می‌باشند و  $a$ ،  $b$  و  $m$  به ترتیب  $SiO_2$ ،  $Si_3N_4$  و تک‌لایه‌ی  $MoS_2$  انتخاب شده اند.

برای بدست آوردن مشخصات اپتیکی، نور از هوا عمود به ساختار، هوا /  $(S_n)^N$  / زیرلایه، تابیده می‌شود که در تابش عمود قطبش الکتریکی عرضی (TE) و مغناطیسی عرضی (TM) یکسان است. زیر لایه از جنس  $SiO_2$  می‌باشد و  $N$  تعداد دوره تناوب را نشان می‌دهد. طیف جذب ساختار با استفاده از روش ماتریس انتقال، محاسبه می‌شود [۸]. در این روش ضریب شکست مختلط و ضخامت مواد مورد نیاز است.

در بازه‌ی طول موج مرئی وابستگی ضریب شکست  $SiO_2$  و  $Si_3N_4$  به طول موج از مراجع [۹، ۱۰] گرفته شده است. ضریب شکست مختلط و ثابت گذردهی تک لایه‌ی تک لایه‌ی  $MoS_2$  با استفاده از روش لورنتس از مرجع [۱۱] گرفته شده است که قسمت حقیقی و موهومی ضریب گذردهی  $MoS_2$ ،  $\epsilon_{real}$  و  $\epsilon_{image}$ ، در شکل ۱ رسم شده است.

## بحث و نتیجه گیری

مرتبه‌های مختلف رودین شاپیرو و دوره‌ی تناوب از عوامل موثر در جذب ساختار می‌باشند. به منظور دستیابی به بازه‌ی وسیعی از طول موج با جذب بالا، اثر دوره‌ی تناوب بر روی جذب رودین شاپیرو  $S_2$ ،  $S_3$  و  $S_4$  برای سه ساختار I، II و III به ترتیب در شکل ۲ تا ۴ نمایش داده شده است.

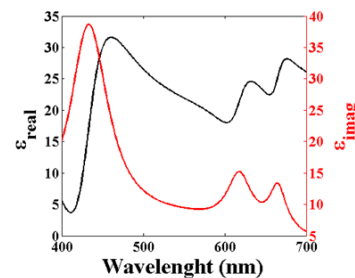


شکل ۲: اثر دوره‌ی تناوب بر روی جذب  $S_2$ ،  $S_3$  و  $S_4$  در ساختار I.

در شکل ۲ برای ساختار I، با افزایش  $N$ ، میزان جذب افزایش می‌یابد و با افزایش تناوب از  $N$  بیش از ۱۰٪، تغییر قابل ملاحظه‌ای در میزان جذب دیده نمی‌شود. نمودارهای  $S_2$ ،  $S_3$  و  $S_4$  با تعداد تقریبی ۸۰ لایه در بازه ۴۰۰-۵۷۳ نانومتر به ترتیب دارای جذب بالای ۷۲٪، ۸۱٪ و ۷۶٪ هستند. برای انتخاب بهترین ساختار، مشخصه میزان جذب بالاتر با پهنای بیشتر در نظر گرفته می‌شود که  $S_3$  در بازه ۴۰۰-۵۷۳ نانومتر بهترین انتخاب در ساختار I می‌باشد. شاخصه‌های مورد نظر مشابه ساختار I در ساختار II و III به ترتیب در شکل ۳ و ۴ بررسی شده است که برای  $S_2$ ،  $S_3$  و  $S_4$  با تعداد تقریبی ۸۰ لایه در ساختار II در بازه ۵۴۷-۶۸۰ نانومتر به ترتیب دارای جذب بالای ۶۰٪، ۷۰٪ و ۶۸٪ و برای ساختار III در بازه ۴۰۰-۵۲۰ نانومتر به ترتیب دارای جذب بالای ۷۸٪، ۷۸٪ و ۶۱٪ می‌باشند.

با توجه به شکل ۱، قله جذب دقیقاً بر روی قله  $\epsilon_{\text{image}}$  قرار می‌گیرد به همین علت سه قله  $\epsilon_{\text{image}}$  تک لایه‌ی  $\text{MoS}_2$  که به ترتیب طول موج تشدید  $\lambda_{1\text{res}}$ ،  $\lambda_{2\text{res}}$  و  $\lambda_{3\text{res}}$  نامیده می‌شوند از اهمیت ویژه‌ای برخوردارند.

ضخامت تک لایه‌ی  $\text{MoS}_2$  برابر با  $0.61$  نانومتر و ضخامت  $\text{SiO}_2$  و  $\text{Si}_3\text{N}_4$  از رابطه‌ی  $d = \frac{\lambda_{\text{res}}}{4 \times n(\lambda_{\text{res}})}$  بدست می‌آید که  $\lambda_{\text{res}}$  طول موج تشدید تک‌لایه‌های  $\text{MoS}_2$  و  $n(\lambda_{\text{res}})$  ضریب شکست  $\text{SiO}_2$  و  $\text{Si}_3\text{N}_4$  در  $\lambda_{\text{res}}$  می‌باشد.



شکل ۱: قسمت حقیقی و موهومی ضریب گذردهی تک‌لایه‌ی  $\text{MoS}_2$ .

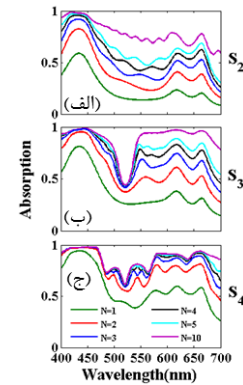
جدول ۱: ضخامت لایه‌های  $\text{SiO}_2$  و  $\text{Si}_3\text{N}_4$  در سه طول موج تشدید برای تک لایه‌ی  $\text{MoS}_2$ .

طول موج تشدید	ساختار	ضخامت $\text{Si}_3\text{N}_4$ (نانومتر)	ضخامت $\text{SiO}_2$ (نانومتر)
$\lambda_{1\text{res}}=433$	I	۵۲/۴	۷۲
$\lambda_{2\text{res}}=618$	II	۷۶/۲	۱۰۲/۸
$\lambda_{3\text{res}}=664$	III	۸۲/۲	۱۱۰/۶

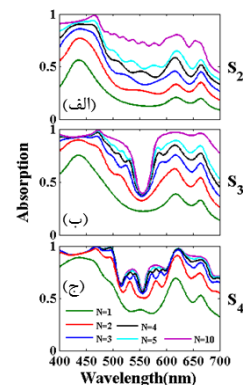
با توجه به داشتن سه طول موج تشدید برای  $\text{MoS}_2$ ، سه ضخامت متفاوت برای  $\text{SiO}_2$  و  $\text{Si}_3\text{N}_4$  بدست می‌آید که در جدول ۱ ذکر شده است. ساختار I، II و III به ترتیب به ازای ضخامت لایه‌ها در  $\lambda_{1\text{res}}$ ،  $\lambda_{2\text{res}}$  و  $\lambda_{3\text{res}}$  برای تک لایه‌ی  $\text{MoS}_2$  طراحی شده است.

## مرجع‌ها

- [1] H. Song, S. Jiang, D. Ji, X. Zeng, N. Zhang, K. Liu, Ch. Wang, Y. Xu and Q. Gan, "Nanocavity absorption enhancement for two-dimensional material monolayer systems," *Opt. Express*. Vol. **23**, pp. 7120-7130, 2015.
- [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] B. Mukherjee, F. Tseng, D. Gunlycke, K. Amara, G. Eda, E. Simsek, "Complex electrical permittivity of the monolayer molybdenum disulfide (MoS<sub>2</sub>) in near UV and visible," *Opt. Mater. Express*. VOL. **5**, pp. 447-455, 2015.
- [4] N. Ansari, M. Moradi, "Optical absorption in air/monolayer MoS<sub>2</sub>/S (S=SiO<sub>2</sub> or Si) trilayer stacks at oblique incidence," *Superlattices and Microstructures*. VOL. **104**, pp. 104-111 2017.
- [5] N. Ansari, E. Mohebbi, "Increasing optical absorption in one-dimensional photonic crystals including MoS<sub>2</sub> monolayer for photovoltaics applications," *Opt. Mater*. VOL. **62**, pp 152-158 2016.
- [6] N. Ansari, E. Mohebbi. "Broadband and high absorption in Fibonacci photonic crystal including MoS<sub>2</sub> monolayer in the visible range." *Journal of Physics D: Appl. Phys*. VOL **51**; pp. 115101. 2018.
- [7] N. Ansari, E. Mohebbi, K. Fallah, submitted.
- [8] Liu JT, Liu NH, Li J, Jing Li X, Huang JH. "Enhanced absorption of graphene with one-dimensional photonic crystal." *Appl. Phys. Lett*. VOL **101**; pp. 052104. 2012.
- [9] Ghosh G. "Dispersion-equation coefficients for the refractive index and birefringence of calcite and quartz crystals." *Opt. Commun.*; VOL **163**: pp. 95-102. 1999.
- [10] Khanna A, Subramanian AZ, Häyrynen M, Selvaraja S, Verheyen P, Van Thourhout D, Honkanen S, Lipsanen H, Baets R. "Impact of ALD grown passivation layers on silicon nitride based integrated optic devices for very-near-infrared wavelengths." *Opt. exp.*; VOL **22**: pp. 5684-92. 2014.
- [11] Ansari N, Ghorbani F. "Light absorption optimization in two-dimensional transition metal dichalcogenide van der Waals heterostructures." *JOSA B*.; VOL **35**: pp. 1179-85. 2018.



شکل ۳: اثر N بر روی جذب S<sub>2</sub>, S<sub>3</sub> و S<sub>4</sub> در ساختار II.



شکل ۴: اثر N بر روی جذب S<sub>2</sub>, S<sub>3</sub> و S<sub>4</sub> در ساختار III.

با مقایسه سه ساختار I، II و III دیده می‌شود که در ساختار I با تعداد لایه‌های برابر، S<sub>3</sub> در بازه‌ی محدودتری جذب بالای ۸۱٪ و برای S<sub>2</sub> دارای جذب ۶۱٪ در بازه‌ی وسیع‌تری از طول موج، ۴۰۰ تا ۶۷۵ نانومتر می‌باشد.

## نتیجه‌گیری

با هدف دست‌یابی به بازه‌ی وسیعی از طول موج با جذب بالا، از شبه بلور فوتونی رودین شاپیرو با لایه‌های دی-الکترونیک متشکل از SiO<sub>2</sub> و Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> همراه با تک‌لایه‌های MoS<sub>2</sub> استفاده شده است. با بررسی ویژگی‌های اپتیکی در سه ساختار دریافته‌ایم که S<sub>3</sub> در ساختار I برای بازه‌ی ۴۰۰-۵۷۳ نانومتر جذب بالای ۸۱٪ و برای S<sub>2</sub> دارای جذب ۶۱٪ در بازه‌ی وسیع‌تری از طول موج، ۴۰۰ تا ۶۷۵ نانومتر می‌باشد که برای کاربردهای اپتوالکترونیکی پیشنهاد می‌شود.