

تنظیم پذیری مدهای نقص بلور فوتونی یک بعدی نقص دار متقارن و نامتقارن بر پایه‌ی تک لایه‌ی دو بعدی MoSe_2

نرگس انصاری* | انسیه محبی | عفت نظری

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

چکیده: نانو ساختار دی سلنید مولیبدن MoSe_2 با ساختار دوبعدی شش ضلعی، به علت ویژگی‌های منحصر به فرد از جمله جذب بالا و گاف نواری مستقیم انتخاب مناسبی برای کاربری‌های اپتوالکترونیکی است. یکی از روش‌های افزایش جذب در این تک لایه، قرار دادن آن به صورت نقص در ساختارهای بلور فوتونی یک بعدی است. قرارگیری نقص‌ها در ساختار بلور فوتونی به صورت متقارن یا نامتقارن است که بر تعداد و فرکانس مدهای نقص اثر می‌گذارد. در این مقاله، برای رسیدن به جذب بالا و تنظیم پذیری طول موج مد نقص، تاثیر عواملی مانند ضخامت لایه‌ی نقص، ضخامت لایه‌ها و دوره تناوب در بلورهای فوتونی نقص دار متقارن و نامتقارن بررسی شده است. در ساختارهای متقارن بهینه به یک مد نقص با جذب کامل در وسط گاف نواری و در ساختارهای نامتقارن به دو مد نقص با جذب در حدود ۷۰٪ و ۸۰٪ در لبه‌های گاف نواری دست یافته‌ایم. با تغییر ضخامت لایه‌ی نقص و طول موج طراحی، قابلیت تنظیم پذیری طول موج مد نقص وجود دارد که برای کاربری در آشکارسازها و فیلترهای جاذب مفید است.

واژگان کلیدی: بلورهای فوتونی نقص دار، تک لایه‌ی MoSe_2 ، تنظیم پذیری طول موج، ساختار متقارن و نامتقارن، فیلترهای جاذب، مد نقص.

n.ansari@alzahra.ac.ir

پژوهشگران بوده است [۵]. MoSe_2 هنگامی که از حالت توده به تک لایه تبدیل می‌شود، گاف نواری غیرمستقیم (۱/۱ الکترون ولت) آن به گاف نواری مستقیم (۱/۵۵ الکترون ولت) تبدیل می‌شود [۶] که به طور قابل توجهی باعث بهبود جذب نور می‌شود.

با توجه به جذب بالای تک لایه‌ی MoSe_2 در ضخامت نانومتری، لازم است برای استفاده در کاربردهای اپتوالکترونیکی این جذب افزایش یابد. بدین منظور از روش‌های مختلفی از جمله قراردگی تک لایه‌ی MoSe_2 در ساختارهایی مانند بلور فوتونی [۷] و شبه بلور فوتونی [۸]، پلاسمونیک [۹]، ناهمگون همراه با لایه میانی [۱۰] و ... برای افزایش جذب در گستره‌ی وسیعی از طول موج استفاده می‌شود. برای افزایش جذب در پهنای باریکی از طول موج، یکی از روش‌های مرسوم قرارگیری

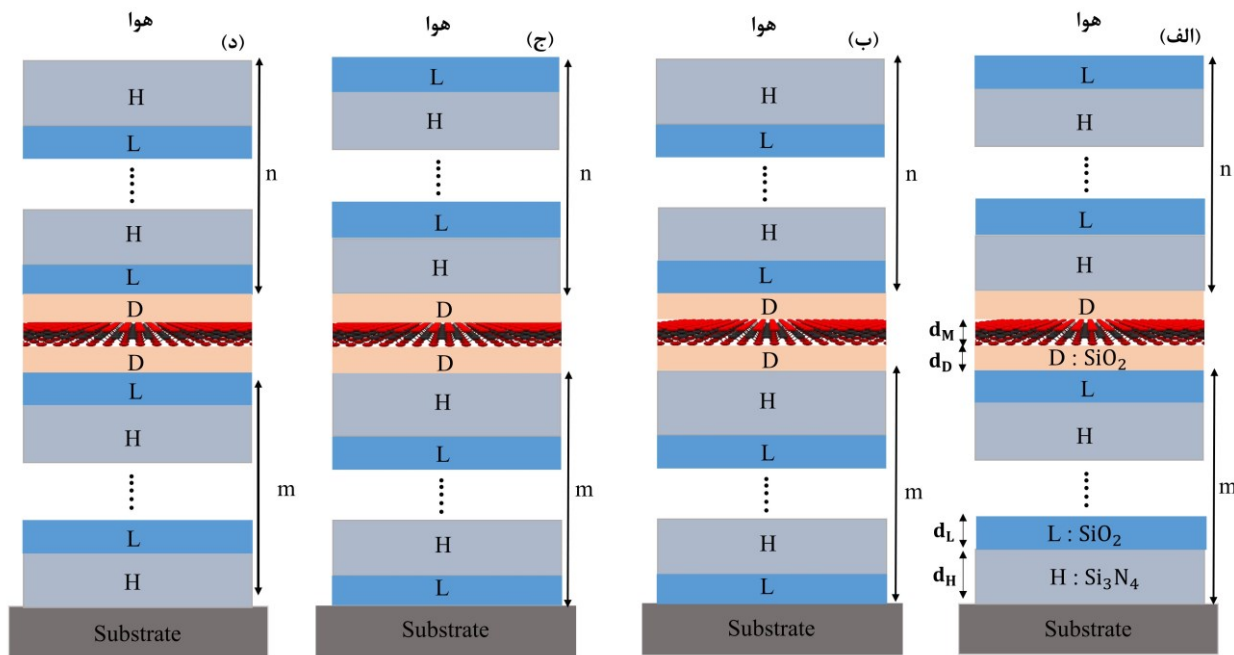
۱- مقدمه

تک لایه‌های کلکوژناید های فلزات واسطه^۱ (TMDC) با فرمول شیمیایی MX_2 ($X = \text{S, Se}$ $M = \text{Mo, W}$)، نانو ساختارهای دوبعدی هستند که در سال‌های اخیر به دلیل ویژگی‌های الکتریکی و نوری خاص برای موضوعات پژوهشی جاذب بوده اند [۲۱]. این مواد به علت گاف نواری مستقیم و ضریب جذب بالا در ناحیه طول موج مرئی برای کاربردهای اپتوالکترونیکی بسیار مورد توجه قرار گرفته‌اند [۳ و ۴]. تک لایه‌ی MoSe_2 با ضخامت ۰/۶۴۶ نانومتر با توجه به هدایت الکتریکی بالا، پهنای گاف نواری عریض، پایداری بالا و انعطاف پذیری مکانیکی بالا، به عنوان یکی از مهمترین TMDCها همواره مورد علاقه

¹ Transition metal dichalcogenides(TMDC)

مدهای نقص اثرگذار است که تغییر این عوامل باعث تنظیم پذیری طول موج مد نقص می‌شود [۱۴]. در این مقاله، با بهینه‌سازی پارامترهای ضخامت لایه نقص، ضخامت لایه‌ها و دوره تناوب در بلورهای فوتونی نقص دار متقارن و نامتقارن بر پایه‌ی تک لایه‌ی MoSe_2 جذب، تنظیم پذیری و تعداد مدهای نقص بررسی شده است.

تک لایه‌ی MoSe_2 به صورت نقص در بلور فوتونی است. وارد کردن لایه‌ی نقص در بلور فوتونی باعث انتشار مدهایی در ناحیه گاف نواری می‌شود که به آن مد نقص می‌گویند که به دلیل جایگزینی نور در لایه نقص اهمیت ویژه‌ای در فیلترهای باند باریک و حسگرها پیدا کرده‌اند [۱۱-۱۳]. عواملی مانند متقارن یا نامتقارن بودن ساختار بلور فوتونی نقص دار نسبت به لایه‌های نقص و ضخامت لایه‌های تشکیل دهنده بر اندازه و تعداد



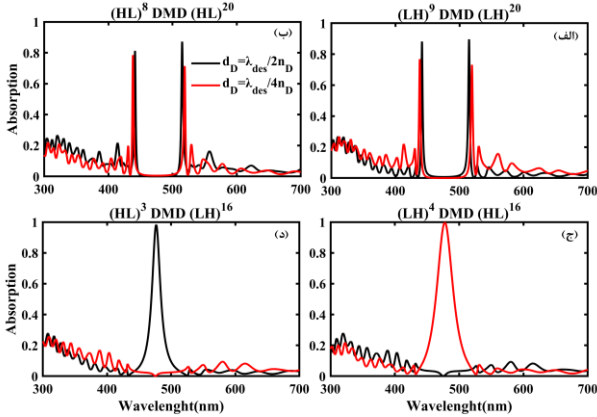
شکل ۱: طرحواره دو بعدی ساختارهای (الف) $(LH)^m DMD (LH)^n$ ، (ب) $(HL)^n DMD (HL)^m$ ، (ج) $(LH)^n DMD (HL)^m$ و (د) $(HL)^n DMD (LH)^m$

داده شده است که دوره تناوب لایه‌های بلور فوتونی بالا و پایین لایه نقص با n و m نشان داده می‌شود. لایه‌ی نقص به صورت DMD است که D ، از جنس SiO_2 است و با ضخامت d_D نشان داده می‌شود. M ، نشانگر تک لایه‌ی MoSe_2 با ضخامت d_M برابر با 0.646 نانومتر است که دارای سه گاف نواری مستقیم در طول موج‌های 475 ، 710 و 800 نانومتر به ترتیب با قله‌های جذب 19% ، 7% و 6% است [۱۵]. زیرلایه، لایه‌ی L و H به ترتیب SiO_2 ، SiO_2 و Si_3N_4 انتخاب شده است. ضخامت لایه‌ی L و H با ضریب شکست n_L و n_H به ترتیب برابر با $d_L = \frac{\lambda_{des}}{4n_L}$ و $d_H = \frac{\lambda_{des}}{4n_H}$ است که طول موج طراحی است و برابر با طول موج قله‌های جذب تک لایه‌ی MoSe_2 انتخاب می‌شود.

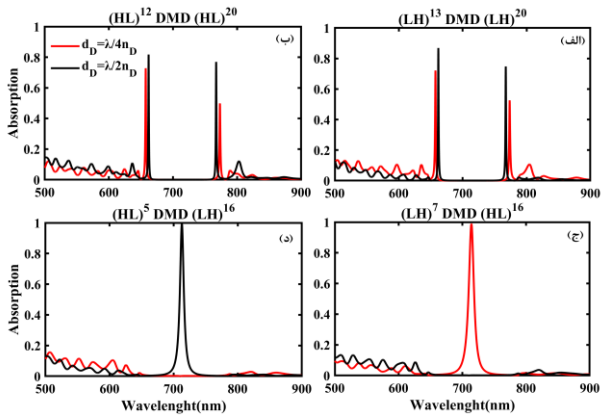
۲- تئوری

در این مقاله، به منظور افزایش مقدار جذب و تنظیم پذیری مد نقص، بلور فوتونی نقص دار به دو حالت متقارن و نامتقارن مورد مطالعه قرار می‌گیرد. اگر در طرفین نقص، لایه‌ها یکسان نباشد همانند $(LH)^m DMD (LH)^n$ (ساختار I) و $(HL)^n DMD (HL)^m$ (ساختار II)، بلور فوتونی را نقص دار نامتقارن و اگر لایه‌ها طرفین نقص یکسان باشند، همانند $(LH)^n DMD (HL)^m$ (ساختار III) و $(HL)^n DMD (LH)^m$ (ساختار IV)، بلور فوتونی را نقص دار متقارن می‌نامند. طرحواره دو بعدی بلورهای فوتونی نقص دار متقارن و نامتقارن به ترتیب در شکل (۱-الف) تا (۱-د) نشان

شکل IV در طول موج ۷۱۵ و ساختار متقارن IV شکل (۳-د)، برای حالت $d_D = \frac{\lambda_{des}}{2n_D}$ مد نقصی در طول موج ۷۱۳ نانومتر با جذب نزدیک ۱۰۰٪ دارد.



شکل ۲: طیف جذب بر حسب طول موج با طول موج طراحی ۴۷۵ نانومتر و ضخامت $d_D = \frac{\lambda_{des}}{2n_D}$ (مشکی) و با ضخامت $d_D = \frac{\lambda_{des}}{4n_D}$ (قرمز) برای ساختارهای (الف) I (ب) II (ج) III (د) IV.



شکل ۳: طیف جذب بر حسب طول موج با طول موج طراحی ۷۱۰ نانومتر و ضخامت $d_D = \frac{\lambda_{des}}{2n_D}$ (مشکی) و با ضخامت $d_D = \frac{\lambda_{des}}{4n_D}$ (قرمز) برای ساختارهای (الف) I (ب) II (ج) III (د) IV.

طیف جذب برای طول موج طراحی ۸۰۰ نانومتر در شکل ۴ نشان داده شده است که ناحیه گاف نواری در محدوده ۷۲۰ تا ۸۸۰ نانومتر است. برای ساختارهای نامتقارن I و II، شکل (۴-الف) و (۴-ب)، دو مد نقص برای حالت $d_D = \frac{\lambda_{des}}{2n_D}$ (با جذب ۸۳٪ و ۵۸٪) و $d_D = \frac{\lambda_{des}}{4n_D}$ (با جذب ۷۲٪ و ۳۵٪) در طول موج‌های ۷۴۶ و ۸۶۴ (۷۴۱ و ۸۷۱) نانومتر مشاهده می‌شود.

نور از هوا با تابش عمود به ساختار تابیده می‌شود و طیف جذب ساختار با استفاده از روش ماتریس انتقال محاسبه می‌شود [۱۶]. در این روش ضریب شکست مواد مورد نیاز است که در بازه‌ی طول موج مرئی ضریب شکست مختلط $\text{Si}_3\text{N}_4, \text{SiO}_2$ و MoSe_2 از مراجع [۱۵ و ۱۷ و ۱۸] گرفته شده است.

۳- نتایج و بحث

به منظور بررسی اثر ساختار متقارن و نامتقارن نقص MoSe_2 بر تعداد و طول موج مد نقص، طیف جذب برای ساختارهای شکل ۱ بر حسب طول موج برای سه طول موج طراحی ۴۷۵، ۷۱۰ و ۸۰۰ نانومتر به ترتیب در شکل‌های ۲، ۳ و ۴ برای دو حالت $d_D = \frac{\lambda_{des}}{2n_D}$ (سیاه) و $d_D = \frac{\lambda_{des}}{4n_D}$ (قرمز) رسم شده است. تغییر λ_{des} به معنای تغییر d_L و d_H است و این ضخامت‌ها تعیین کننده بازه‌ی گاف نواری می‌باشند.

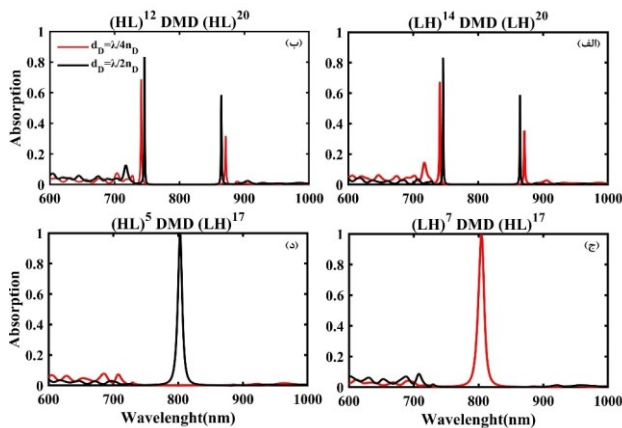
در شکل ۲ برای طول موج طراحی ۴۷۵ نانومتر، ناحیه گاف نواری از ۴۳۰ تا ۵۲۰ نانومتر است و طول موج طراحی وسط گاف نواری قرار گرفته است. برای ساختارهای نامتقارن I و II، شکل (۲-الف) و (۲-ب)، دو مد نقص تیز در حالت $d_D = \frac{\lambda_{des}}{2n_D}$ (با مقدار جذب ۸۹٪ و ۸۷٪) و $d_D = \frac{\lambda_{des}}{4n_D}$ (با مقدار جذب ۷۳٪ و ۷۸٪) در طول موج‌های ۵۱۵ و ۴۴۲ نانومتر (۵۱۹ و ۴۳۸ نانومتر) مشاهده می‌شود. در ساختار متقارن III، شکل (۲-ج)، در حالت $d_D = \frac{\lambda_{des}}{4n_D}$ در طول موج ۴۷۸ نانومتر و ساختار متقارن IV، شکل (۲-د)، در حالت $d_D = \frac{\lambda_{des}}{2n_D}$ در طول موج ۴۷۶ نانومتر مد نقصی با جذب نزدیک ۱۰۰٪ دارند. در ساختار متقارن III در حالت $d_D = \frac{\lambda_{des}}{2n_D}$ و IV در حالت $d_D = \frac{\lambda_{des}}{4n_D}$ مد نقصی با جذب قابل توجه دیده نمی‌شود.

با تغییر طول موج طراحی به ۷۱۰ نانومتر، شکل ۳، بازه گاف نواری به ۶۵۰ تا ۷۸۰ نانومتر تغییر می‌یابد که طول موج طراحی وسط آن قرار می‌گیرد. برای ساختارهای نامتقارن I و II، شکل (۳-الف) و (۳-ب)، دو مد نقص در حالت $d_D = \frac{\lambda_{des}}{2n_D}$ (با مقدار جذب ۸۶٪ و ۷۶٪) و $d_D = \frac{\lambda_{des}}{4n_D}$ (با مقدار جذب ۷۲٪ و ۵۰٪) در طول موج‌های ۶۶۲ و ۷۶۷ نانومتر (۶۵۷ و ۷۷۳ نانومتر) مشاهده می‌شود. در ساختار متقارن III، شکل (۳-ج)، برای حالت

جدول ۱: بیشینه مقدار جذب، پهنای گاف و طول موج‌های مد نقص، بهینه مقدار m و n برای بلور فوتونی نقص دار در طول موج‌های طراحی تک لایه $MoSe_2$.

ساختر متقارن IV			ساختارهای متقارن III			ساختر نامتقارن II			ساختر نامتقارن I			$\lambda_{des}(nm)$ و پهنای گاف نواری (nm)
n	m	$\frac{\lambda_{des}}{2n_D}$	n	m	$\frac{\lambda_{des}}{4n_D}$	n	m	$\frac{\lambda_{des}}{2n_D}$	n	m	$\frac{\lambda_{des}}{2n_D}$	
۳	۱۶	$\lambda_{d1} = 476nm$ $A = \%97$	۴	۱۶	$\lambda_{d1} = 478nm$ $A = \%99$	۸	۲۰	$\lambda_{d1} = 442nm$ $A = \/.81$ $\lambda_{d2} = 515nm$ $A = \/.87$	۹	۲۰	$\lambda_{d1} = 442nm$ $A = \/.87$ $\lambda_{d2} = 515nm$ $A = \/.89$	۴۷۵ ۵۲۰ تا ۴۳۰
۵	۱۶	$\lambda_{d1} = 713nm$ $A = \%99$	۷	۱۶	$\lambda_{d1} = 715nm$ $A = \%98$	۱۲	۲۰	$\lambda_{d1} = 662nm$ $A = \/.81$ $\lambda_{d2} = 767nm$ $A = \/.76$	۱۳	۲۰	$\lambda_{d1} = 662nm$ $A = \/.86$ $\lambda_{d2} = 767nm$ $A = \/.73$	۷۱۰ ۷۸۰ تا ۶۵۰
۵	۱۷	$\lambda_{d1} = 803nm$ $A = \%99$	۷	۱۷	$\lambda_{d1} = 805nm$ $A = \%99$	۱۲	۲۰	$\lambda_{d1} = 746nm$ $A = \/.83$ $\lambda_{d2} = 864nm$ $A = \/.58$	۱۴	۲۰	$\lambda_{d1} = 746nm$ $A = \/.83$ $\lambda_{d2} = 864nm$ $A = \/.58$	۸۰۰ ۸۸۰ تا ۷۲۰

است که بدین صورت ضخامت بهینه d_D برای هر ساختار تعیین می‌شود.



شکل ۴: طیف جذب بر حسب طول موج با طول موج طراحی ۸۰۰ نانومتر و ضخامت $d_D = \frac{\lambda_{des}}{2n_D}$ (مشکی) و با ضخامت $d_D = \frac{\lambda_{des}}{4n_D}$ (قرمز) برای ساختارهای (الف) I (ب) II (ج) III (د) IV.

با تغییر طول موج طراحی، بازه‌ی گاف نواری و طول موج مد نقص تنظیم می‌شوند اما مقدار جذب در مدهای نقص برای هر سه طول موج طراحی، تقریباً ثابت می‌ماند و تعداد مدهای نقص وابسته به ساختار متقارن و نامتقارن است. در بلورهای فوتونی

در ساختار متقارن III، شکل (۴-ج)، برای حالت $d_D = \frac{\lambda_{des}}{4n_D}$ در طول موج ۸۰۵ نانومتر و در ساختار متقارن IV، شکل (۴-د)، برای حالت $d_D = \frac{\lambda_{des}}{2n_D}$ مد نقصی در طول موج ۸۰۳ نانومتر با جذب نزدیک ۱۰۰٪ دارند.

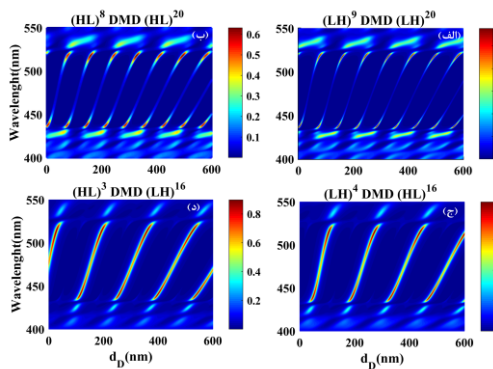
با تغییر طول موج طراحی، بازه‌ی گاف نواری و طول موج مد نقص تنظیم می‌شوند اما مقدار جذب در مدهای نقص برای هر سه طول موج طراحی، تقریباً ثابت می‌ماند و تعداد مدهای نقص وابسته به ساختار متقارن و نامتقارن است. در بلورهای فوتونی نقص دار متقارن در طول موج طراحی ۴۷۵ نانومتر، مد نقص پهن شدگی بیشتری نسبت به بقیه طول موج‌های طراحی دارد. بیشینه مقدار جذب، پهنای گاف و طول موج‌های مد نقص برای بلور فوتونی نقص دار متقارن و نامتقارن در طول موج‌های طراحی تک لایه $MoSe_2$ در جدول ۱ آمده است. بیشترین جذب برای ساختارهای نامتقارن I و II و ساختار متقارن IV در ضخامت

$$d_D = \frac{\lambda_{des}}{2n_D} \text{ و برای ساختار متقارن III در ضخامت } d_D = \frac{\lambda_{des}}{4n_D}$$

هر چهار ساختار در ۳ طول موج طراحی در جدول ۱ آورده شده است. باتوجه به جدول ۱، در طول موج‌های طراحی مختلف، بهینه مقدار m و n برای هر چهار ساختار متغیر است.

به منظور بررسی اثر تغییر ضخامت لایه‌ی D بر تعداد و اندازه جذب مد نقص در ساختارها، در بهینه مقدار n و m برای طول موج طراحی ۴۷۵ نانومتر، طیف جذب با تغییر ضخامت لایه‌ی D در بازه ۰ تا ۶۰۰ نانومتر در شکل‌های ۶ رسم شده است. طول موج مدهای نقص با افزایش ضخامت لایه‌ی D انتقال به سرخ دارد که باعث تنظیم پذیری طول موج مدهای نقص در ناحیه گاف نواری می‌شود.

تعداد مدهای جذب برای ساختارهای نامتقارن دو برابر ساختارهای متقارن است. در طول موج طراحی ۴۷۵ نانومتر در ساختارهای نامتقارن، شکل (۶-الف) و (۶-ب)، بیشینه مقدار جذب در لبه‌های گاف نواری در ضخامت لایه D برای مضارب زوج و فرد $\frac{\lambda_{des}}{4nD}$ دیده می‌شود اما در ساختار متقارن III، شکل (۶-ج)، بیشینه مقدار جذب فقط در ضخامت‌هایی که مضرب فردی از $\frac{\lambda_{des}}{4nD}$ و در ساختار متقارن IV، شکل (۶-د)، در ضخامت‌هایی که مضارب زوجی از $\frac{\lambda_{des}}{4nD}$ مشاهده می‌شود. رفتار مد نقص با تغییر ضخامت لایه‌ی D برای طول موج‌های طراحی ۷۱۰ و ۸۰۰ نانومتر مشابه با طول موج ۴۷۵ نانومتر است و تنها تفاوت اختلاف در بازه گاف نواری است.

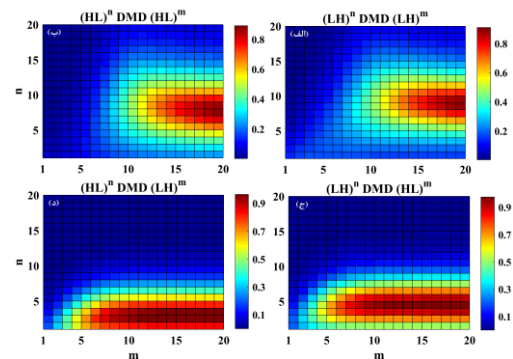


شکل ۶: طیف جذب برحسب تغییر ضخامت لایه‌ی D در طول موج طراحی ۴۷۵ نانومتر برای ساختارها (الف) I (ب) II (ج) III (د) IV.

به منظور بررسی بیشتر، طیف جذب هر چهار ساختار در هر سه طول موج طراحی برای $d_D = \frac{p\lambda_{des}}{4nD}$ (مضارب $p = 1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20$) (صحيح) در شکل‌های ۷ تا ۹ رسم شده است. با توجه به شکل

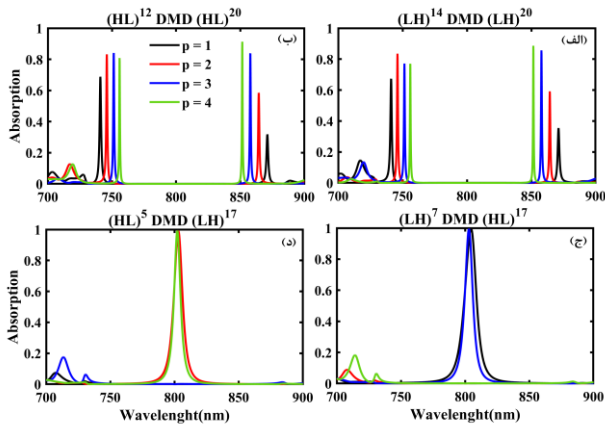
نقص دار متقارن در طول موج طراحی ۴۷۵ نانومتر، مد نقص پهن شدگی بیشتری نسبت به بقیه طول موج‌های طراحی دارد. بیشینه مقدار جذب، پهنای گاف و طول موج‌های مد نقص برای بلور فوتونی نقص دار متقارن و نامتقارن در طول موج‌های طراحی تک لایه MoSe_2 در جدول ۱ آمده است. بیشترین جذب برای ساختارهای نامتقارن I و II و ساختار متقارن IV در ضخامت $d_D = \frac{\lambda_{des}}{2nD}$ و برای ساختار متقارن III در ضخامت $d_D = \frac{\lambda_{des}}{4nD}$ است که بدین صورت ضخامت بهینه d_D برای هر ساختار تعیین می‌شود.

به منظور بررسی اثر تغییر دوره تناوب n و m و مکان نقص بر مقدار جذب مدهای نقص و به دست آوردن مقدار بهینه‌ی آن‌ها، طیف جذب هر چهار ساختار برای طول موج طراحی ۴۷۵ نانومتر برای d_D بهینه در شکل ۵ رسم شده است. در ساختارهای نامتقارن رفتار بهینه سازی m و n برای هر دو مد نقص مشابه است به همین علت در شکل (۵-الف) و (۵-ب) برای ساختار I و II، طول موج ۵۱۵ نانومتر و برای ساختار متقارن III و IV در شکل (۵-ج) و (۵-د) طول موج مد نقص ۴۷۸ و ۴۷۶ نانومتر انتخاب شده است.



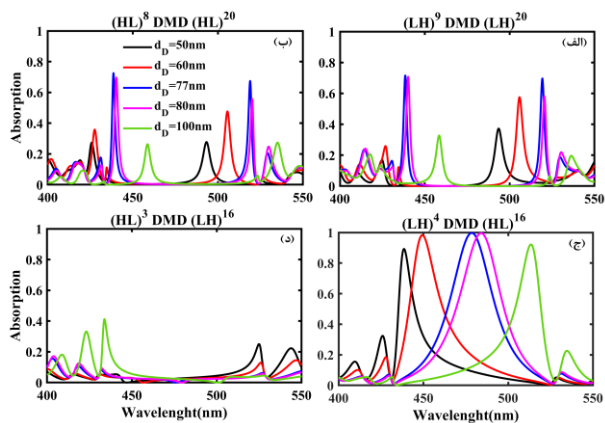
شکل ۵: جذب بر حسب تناوب n و m در طول موج مد نقص برای طول موج طراحی ۴۷۵ نانومتر با ضخامت $d_D = \frac{\lambda_{des}}{2nD}$ برای ساختارهای (الف) I (ب) II (ج) III و IV و با ضخامت $d_D = \frac{\lambda_{des}}{4nD}$ برای ساختار (د) III.

در هر چهار ساختار با افزایش n میزان جذب تا مقدار معینی افزایش یافته و پس از آن کاهش می‌یابد اما برای تمامی ساختارها در n ثابت با افزایش m جذب افزایش می‌یابد و از m بیشتر از ۲۰، میزان افزایش جذب ناچیز است. بر این اساس مقادیر بهینه n و m برای هر ساختار انتخاب می‌شوند. برای هر دو طول موج طراحی دیگر رفتار n و m همانند طول موج طراحی ۴۷۵ نانومتر است که مقادیر بهینه‌ی n و m با بیشینه مقدار جذب برای



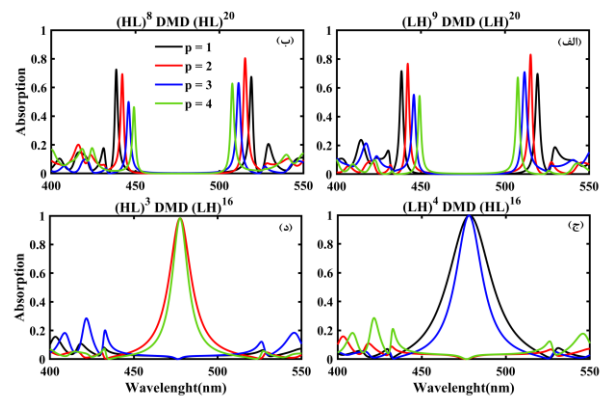
شکل ۹: طیف جذب طول موج طراحی ۸۰۰ نانومتر رای ضخامت های $d_D = \frac{p\lambda_{des}}{4n_D}$ در p مختلف برای ساختارهای (الف) I (ب) II (ج) III (د) IV.

مطابق شکل‌های ۷ تا ۹ ضخامت‌های بهینه برای ساختارهای نامتقارن I و II و ساختار متقارن IV، ضرایب زوج $\frac{\lambda_{des}}{4n_D}$ و برای ساختار متقارن III ضرایب فرد $\frac{\lambda_{des}}{4n_D}$ می باشد. از آنجاییکه در کارهای تجربی در حین لایه نشانی برای رسیدن به ضخامت‌ها خطا وجود دارد، برای مطالعه‌ی اثر این خطاهای ضخامت، طیف جذب هر چهار ساختار برای ضخامت‌های نزدیک $\frac{\lambda_{des}}{4n_D}$ برای هر سه طول موج طراحی در شکل‌های ۱۰ تا ۱۲ رسم شده است. برای طول موج طراحی ۴۷۵، ۷۱۰ و ۸۰۰ نانومتر، به ترتیب برابر با ۷۷، ۱۱۵ و ۱۳۰ نانومتر است.

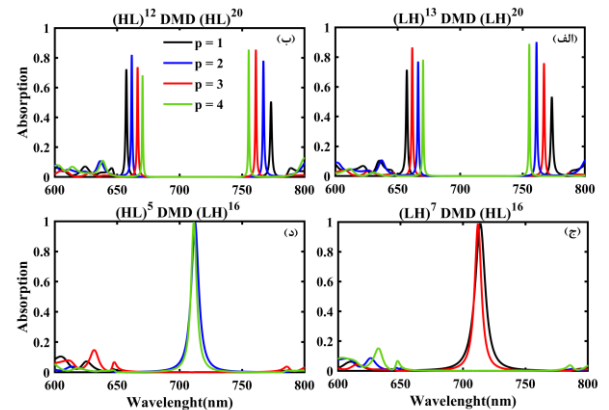


شکل ۱۰: طیف جذب در ضخامت‌های لایه D ۵۰، ۶۰، ۷۷، ۸۰ و ۱۰۰ نانومتر با طول موج طراحی ۴۷۵ نانومتر برای ساختارهای (الف) I (ب) II (ج) III (د) IV.

(۷-الف) و (۷-ب) برای ساختارهای نامتقارن در طول موج طراحی ۴۷۵ نانومتر، با افزایش p ، مدهای نقص به سمت داخل گاف جابه‌جا می‌شوند. بیشترین مقدار جذب برای $p=2$ در طول موج مد نقص ۵۱۵ نانومتر است. برای ساختار متقارن III در شکل (۷-ج) برای $p=1$ و $p=3$ برای ساختار متقارن IV در شکل (۷-د) برای $p=2$ و $p=4$ ، مد نقصی با جذب نزدیک ۱۰۰٪ در طول موج مد نقص ۴۷۷ نانومتر و در وسط گاف نواری مشاهده می‌شود و با تغییر ضرایب $\frac{\lambda_{des}}{4n_D}$ ، طول موج مد نقص تغییر نمی‌کند.



شکل ۱۱: طیف جذب در طول موج طراحی ۴۷۵ نانومتر برای ضخامت‌های $d_D = \frac{p\lambda_{des}}{4n_D}$ در p مختلف برای ساختارهای (الف) I (ب) II (ج) III (د) IV.



شکل ۱۲: طیف جذب در طول موج طراحی ۷۱۰ نانومتر برای ضخامت‌های $d_D = \frac{p\lambda_{des}}{4n_D}$ در p مختلف برای ساختارهای (الف) I (ب) II (ج) III (د) IV.

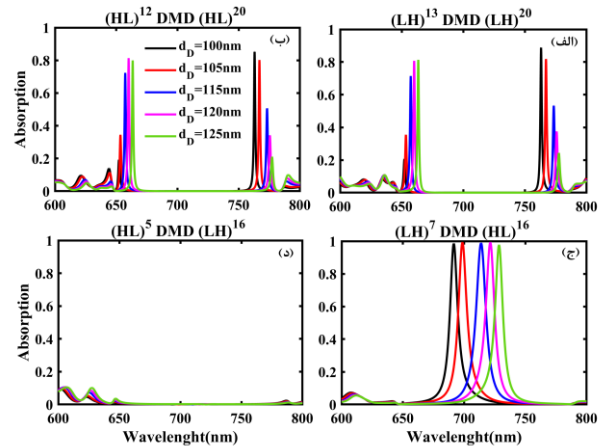
شکل ۸ و ۹، به ترتیب با طول موج طراحی ۷۱۰ و ۸۰۰ نانومتر، رفتاری مشابه با شکل ۷، $\lambda_{des} = 475nm$ ، نشان می‌دهد با این تفاوت که در $\lambda_{des} = 800nm$ بیشترین جذب برای ساختارهای نامتقارن در $p=4$ دیده می‌شود.

$d_D = 150 \text{ nm}$ مقدار جذب نزدیک ۱۰۰٪ به ۷۰٪ کاهش یافته است.

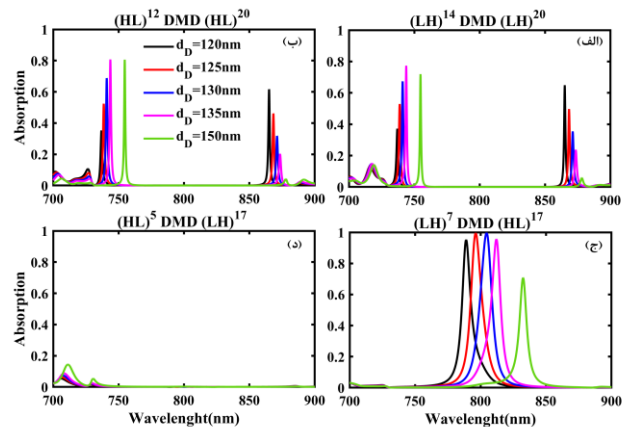
با توجه به مطالعات انجام شده در این مقاله، تنظیم پذیری طول موج مد نقص در تمام بازه طول موج مرئی با تغییر همزمان طول موج طراحی و ضخامت لایه D امکان پذیر است که پهنای گاف نواری برای هر سه طول موج طراحی در جدول ۱ بیان شده است. این امر اهمیت ویژه‌ای در طراحی ساختارهایی با ویژگی تنظیم‌پذیری مد نقص دارد.

۴- نتیجه‌گیری

در فیلترهای باند باریک به دنبال طراحی ساختارهایی هستند که دارای ویژگی‌های جایگزیدگی، تنظیم پذیری طول موج و تعداد مدها باشند. در این مقاله، برای طراحی ساختارهایی با این ویژگی‌ها قراردعی تک لایه‌ی MoSe_2 به عنوان نقص در بلورهای فوتونی پیشنهاد داده شد. تأثیر ضخامت لایه‌ی نقص، طول موج طراحی، تعداد تناوب، مکان نقص، متقارن یا نامتقارن بودن ساختار نسبت به لایه نقص بر مدهای نقص در بلور فوتونی بررسی شده است. با توجه به نتایج متقارن یا نامتقارن بودن بلورهای فوتونی نقص دار بر تعداد و طول موج مدها تاثیرگذار است. برای ساختارهای نامتقارن دو مد نقص در طرفین گاف نواری و برای ساختارهای متقارن یک مد نقص در وسط گاف نواری مشاهده می‌شود. بیشینه جذب برای ساختارهای نامتقارن I و II و ساختار متقارن IV در ضخامت $d_D = \frac{\lambda_{des}}{2n_D}$ و برای ساختار متقارن III در ضخامت $d_D = \frac{\lambda_{des}}{4n_D}$ است. مقدار m و n و مکان لایه نقص در ساختار، بر مقدار جذب مدهای نقص تاثیرگذار هستند اما بر طول موج مد نقص تاثیرگذار نیست. با افزایش ضخامت لایه‌ی D برای هر دو ساختار متقارن و نامتقارن، انتقال به سرخ برای خطوط جذب مد نقص مشاهده شد که با تناوبی از ضرایب $\frac{\lambda_{des}}{4n_D}$ تکرار شده‌اند. با بررسی ضخامت‌هایی با ضرایب فرد و زوج از $\frac{\lambda_{des}}{4n_D}$ برای لایه‌ی D نتیجه‌گیری شد برای ساختارهای نامتقارن، با افزایش ضخامت لایه‌ی D مدهای نقص به سمت داخل گاف جابه‌جا می‌شوند و در ساختارهای متقارن، مد نقص با جذب کامل وسط گاف نواری قرار می‌گیرند و با تغییر ضرایب $\frac{\lambda_{des}}{4n_D}$ طول موج مد نقص تغییر نمی‌کند. همچنین، تنظیم پذیری طول موج مد نقص در تمام بازه



شکل ۱۱: طیف جذب بر حسب طول موج در ضخامت‌های لایه D ۱۰۰، ۱۰۵، ۱۱۵، ۱۲۰ و ۱۲۵ نانومتر با طول موج طراحی ۷۱۰ نانومتر برای ساختارهای (الف) I (ب) II (ج) III (د) IV.



شکل ۱۲: طیف جذب بر حسب طول موج در ضخامت‌های لایه D ۱۲۵، ۱۳۰، ۱۳۵ و ۱۵۰ نانومتر با طول موج طراحی ۸۰۰ نانومتر برای ساختارهای (الف) I (ب) II (ج) III (د) IV.

در شکل ۱۱ با تغییر ضخامت لایه‌ی D از ۱۰۰ به ۱۲۵ نانومتر، رفتاری مشابه شکل ۱۰ مشاهده می‌شود. بیشترین مقدار جذب مد نقص برای ساختارهای نامتقارن در d_D برابر با ۱۰۰ نانومتر در سمت راست گاف نواری حدود ۸۰٪ است.

در شکل ۱۲ نیز با تغییر ضخامت لایه‌ی D از ۱۲۵ تا ۱۵۰ نانومتر، رفتار مشابه شکل ۱۰ مشاهده می‌شود. بیشترین مقدار جذب مد نقص برای ساختارهای نامتقارن در $d_D = 135 \text{ nm}$ در سمت چپ گاف نواری در طول موج مد نقص ۷۴۶ نانومتر حدود ۸۰٪ است. در شکل (۱۲-ج) با تغییر ضخامت، طول موج مد نقص به سمت طول موج بیشتر، جابه‌جا می‌شود و فقط در حالت

[9] N. Ansari, E. Mohebbi, F. Gholami, "Nearly perfect and broadband optical absorption by TMDCs in cover/TMDC/spacer/Au/substrate multilayers," *Applied Physics B*, 126, 1-6, (2020).

[10] N. Ansari, B. Goudarzi, E. Mohebbi, "Design of narrowband or broadband absorber by heterostructures including TMDCs and spacers," *Optics & Laser Technology*, 138, 106771-106777, 2021.

[11] Y. Feng, Q.Y. S. Wu, B. Wang, Y. Fan, Y. Liu, J. Teng, "Design of narrowband perfect absorber for enhancing photoluminescence in atomically thin WSe₂," *optics Communications*, 454, 124-443, 2020.

[12] Y. Huang, Q. Gong, X. Song, K. Feng, K. Nie, F. Zhao, Y. Li, "Mo₂C nanoparticles dispersed on hierarchical carbon microflowers for efficient electrocatalytic hydrogen evolution," *American Chemical Society nano*, 10, 11337-11343, 2016.

[13] Y.M. Qing, H.F. Ma, S. Yu, T.J. Cui, "Ultra-narrowband absorption enhancement in monolayer transition-metal dichalcogenides with simple guided-mode resonance filters," *Journal of Applied Physics*, 125, 213108, 2019.

[14] N. Ansari, S. Mohammadi, E. Mohebbi, "Approaching the nearly perfect and wavelength-adjustable absorption of MoS₂ monolayer using defective quasi photonic crystals," *Journal of Applied Physics*, 127, 043101-043108, 2020.

[15] N. Ansari, F. Ghorbani, "Light absorption optimization in two-dimensional transition metal dichalcogenide van der Waals heterostructures," *Journal of the Optical Society of America B*, 35, 1179-1185, 2018.

[16] J.T. Liu, N. H. Liu, J. Li, X. J. Li, J. H. Huang, "Enhanced absorption of graphene with one-dimensional photonic crystal," *Applied Physics Letters*, 101, 052104, 2012.

[17] G. Ghosh, "Dispersion-equation coefficients for the refractive index and birefringence of calcite and quartz crystals," *Optics communications*, 163, 95-102, 1999.

طول موج مرئی با تغییر همزمان طول موج طراحی و ضخامت لایه D امکان پذیر شد که برای کاربری فتوولتاییک مناسب هستند.

مراجع

[1] E. Buhara, A. Ghobadi, E. Ozbay, "An All-Dielectric Metasurface Coupled with Two-Dimensional Semiconductors for Thermally Tunable Ultra-Narrowband Light Absorption," *Plasmonics*, 1-8, 2020.

[2] Q. H. Wang, K. Kalantar-Zadeh, A. Kis, J.N. Coleman, M. S.Strano, "Electronics and optoelectronics of two-dimensional transition metal dichalcogenides," *Nature nanotechnology*, 7, 699-712, 2012.

[3] Z. Li, S. L. Wong, "Functionalization of 2D transition metal dichalcogenides for biomedical applications," *Materials Science and Engineering: C*, 70, 1095-1106, 2017.

[4] S.J. McDonnell, R.M. Wallace, "Atomically-thin layered films for device applications based upon 2D TMDC materials," *Thin Solid Films*, 616, 482-501, 2016.

[5] A. Eftekhari, "Molybdenum diselenide (MoSe₂) for energy storage, catalysis, and optoelectronics," *Applied Materials Today*, 8, 1-17, 2017.

[6] R. Dong, I. Kuljanishvili, "Progress in fabrication of transition metal dichalcogenides heterostructure systems," *Journal of Vacuum Science & Technology B, Nanotechnology and Microelectronics: Materials, Processing Measurement and Phenomena*, 35, 030803, 2017.

[7] H. Li, M. Qin, L. Wang, X. Zhai, R. Ren, J. Hu, "Total absorption of light in monolayer transition-metal dichalcogenides by critical coupling," *Optics express*, 25, 31612-31621, 2017.

[8] N. Ansari, E. Mohebbi, K. Fallah, "Ultra-broadband and broad-angle absorbers with transition metal dichalcogenide monolayer using Thue-Morse quasi-photonic crystals," *Optical Materials*, 107, 110039-110047, 2020.

[18] T. Bååk, "Silicon oxynitride; a material for GRIN optics," Applied Optics, 21, 1069-1072, 1982.



Adjustable defect modes in symmetric and asymmetric two-dimensional defective photonic crystal based on MoSe₂

Narges Ansari*, Ensiyeh Mohebi, Effat mohebi

Department of Physics, Faculty of Physics and Chemistry, Alzahra University, Tehran, Iran.

Abstract: MoSe₂ two-dimensional nanostructure is a suitable candidate for optoelectronic applications due to its unique properties such as high absorption and direct band gap. One way to increase the absorption in such a monolayer is to place it as a defect in one-dimensional photonic crystal (PC). The location of defect in the PC can form either symmetrical or asymmetric PC, which affects the number and frequency of defect modes. In this paper, in order to achieve high absorption and adjustability of the defect mode wavelength, the effect of defect layer thickness, PC layers thickness, and periodicity are investigated in both symmetric and asymmetric PCs. In the optimal design, we have achieved a perfect absorption in the asymmetric structures with one defect mode in the middle photonic band gap and in asymmetric PCs with two defect modes the absorption was found to be 70%~80% On both sides photonic band gap. By changing the thickness of the defect layer and the wavelength of the design, the wavelength of the defect mode can be adjusted, which is useful for application in detectors and absorbent filters.

Keywords: Absorbent filters, Defective photonic crystals, Defect mode, MoSe₂ monolayer, wavelength adjustment, absorption, symmetric and asymmetric structure.