



# تاثیر سیلیکا به عنوان لایه میانی بر جذب ساختار شامل $WSe_2$ در حضور اثر پلاسمونیک

نرگس انصاری\* | انسیه محبی | فاطمه غلامی

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

**چکیده:** بلورهای دوبعدی از جمله تک‌لایه‌های کلکوژناید های فلزات واسطه (TMDC) با باندهای نواری مستقیم، افق جدیدی در کاربری این مواد در نور و الکترونوری ایجاد کرده‌اند. یکی از این نانو ساختارهای دوبعدی تک‌لایه‌ی  $WSe_2$  است که جذب آن در کنار طلا به‌عنوان لایه‌ی پلاسمونیک و  $SiO_2$  به عنوان لایه میانی با تغییر جایگاه لایه میانی، مورد بررسی قرار گرفته است. ویژگی نوری ساختارها با روش ماتریس انتقال، TMM، در ناحیه طول موج مرئی به صورت نظری مورد بررسی قرار گرفته است. با توجه به نتایج محل قرارگیری لایه میانی دریافته‌ایم که حضور لایه میانی بین لایه  $WSe_2$  و طلا در افزایش جذب تاثیر بیشتری دارد در طراحی بهینه، با طول موج ۳۲۴ نانومتر و ضخامت لایه میانی ۳۸ نانومتر به جذب ۹۷٪ دست یافته‌ایم. این یافته‌ها در طراحی جذب های نوری برای استفاده در ادوات نوری پر بازده مطلوب است.

**واژگان کلیدی:** تک لایه TMDC،  $WSe_2$ ، اثر پلاسمونیک، لایه میانی، جذب، روش ماتریس انتقال.

[n.ansari@alzahra.ac.ir](mailto:n.ansari@alzahra.ac.ir)

موج مرئی دارد. تک‌لایه‌ی  $WSe_2$  دارای چهار گاف نواری مستقیم در طول موج های ۴۲۸، ۵۰۸، ۵۹۷ و ۵۷۳ نانومتر است که در آن طول موج ها به ترتیب دارای جذب ۱۷٪، ۱۱٪، ۷٪ و ۷٪ است [۹]. برای عملکرد بهتر دستگاه‌های نورالکترونیکی شامل تک‌لایه‌ی  $WSe_2$  لازم است مقدار جذب در پیک‌ها افزایش یابد.

در سال‌های اخیر، چندین روش برای بهبود جذب در تک‌لایه‌های TMDC پیشنهاد شده است که جذب در تک طول موج یا پهنای طول موجی را افزایش می‌دهند. این روش‌ها اغلب برای تک‌لایه‌ی  $MoS_2$  بررسی شده و دیگر TMDCها کمتر مورد مطالعه قرار گرفته‌اند. از جمله روش‌های افزایش جذب در تک طول موج استفاده از بلور فوتونی شامل نقص [۱۰ و ۱۱]،

## ۱- مقدمه

امروزه بلورهای دوبعدی (2D) به علت ویژگی‌های منحصر به فردشان بسیار مورد توجه محققان قرار گرفته‌اند [۱-۳]. از بین این بلورها، تک‌لایه‌های کلکوژناید های فلزات واسطه<sup>۱</sup> (TMDC) به دلیل گاف نواری مستقیم و جذب بالا در ترانزیستورها، آشکارگرها، سلول‌های خورشیدی، حسگرهای نانوزیست، نانوموجبر، پراکندگی رامان و ... کاربری بسیاری دارند [۴-۸]. یکی از مهمترین TMDCها، تک‌لایه  $WSe_2$  با ضخامت ۰/۶۴۹ نانومتر است که مقدار جذب قابل توجهی در ناحیه‌ی طول

<sup>۱</sup>Transition Metal Dichalcogenides (TMDC)

است که  $\lambda$ ،  $n_j$  و  $d_j$  به ترتیب نشان دهنده‌ی طول موج، ضریب شکست و ضخامت مرتبط لایه زام هستند. ماتریس انتقال کل ساختار،  $M$ ، از ضرب ماتریس‌های تک تک لایه‌ها بدست می‌آید.  $E$  و  $H$  برای محیط پیرامون اول و آخر طبق رابطه‌ی ماتریسی به صورت

$$\begin{pmatrix} E_{st}(r) \\ H_{st}(r) \end{pmatrix} = (M) \begin{pmatrix} E_{ot}(r) \\ H_{ot}(r) \end{pmatrix} \quad (2)$$

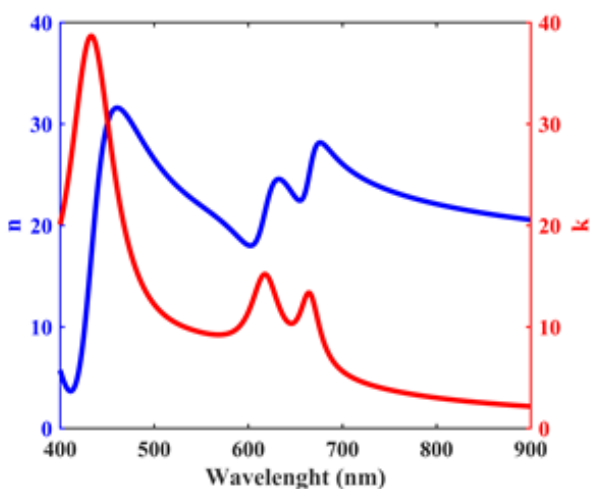
بیان می‌شود که این میدان‌ها را می‌توان برحسب دامنه‌ی میدان عبوری ( $c_0^+$ ) و بازتابیده ( $c_0^-$ ) لایه‌ی اول و دامنه‌ی عبوری لایه‌ی آخر ( $c_s^+$ ) نوشت.

$$\begin{pmatrix} E_{ot}(r) \\ H_{ot}(r) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{ik_0 \cos \theta_0} & e^{-ik_0 \cos \theta_0} \\ n_0 e^{ik_0 \cos \theta_0} & -n_0 e^{-ik_0 \cos \theta_0} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_0^+ \\ c_0^- \end{pmatrix} \quad (3)$$

$$\begin{pmatrix} E_{st}(r) \\ H_{st}(r) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{ik_s \cos \theta_s} & e^{-ik_s \cos \theta_s} \\ n_s e^{ik_s \cos \theta_s} & -n_s e^{-ik_s \cos \theta_s} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_s^+ \\ c_s^- \end{pmatrix} \quad (4)$$

ضرایب عبور، بازتاب و جذب کل ساختار از رابطه‌های  $T = \frac{c_s^+}{c_0^+}$ ،  $R = \frac{c_0^-}{c_0^+}$ ،  $A = 1 - T - R$  محاسبه می‌شوند.

در روش TMM ضریب شکست و ضخامت مواد مورد نیاز است. ضخامت تک‌لایه‌های  $WSe_2$  و  $Au$  به ترتیب  $0.649 \mu m$  و  $60 nm$  نانومتر است و ضخامت لایه میانی به صورت  $d_s$  نمایش داده شده است. در گستره‌ی طول موج مرئی وابستگی ضریب شکست مختلط  $WSe_2$ ،  $Au$ ،  $Si$ ،  $SiO_2$  به طول موج از مراجع [۹، ۲۱-۱۹] گرفته شده است که قسمت حقیقی و موهومی ضریب شکست  $WSe_2$  در شکل ۲ رسم شده است.



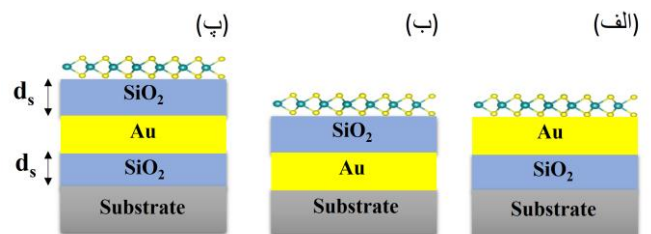
شکل ۲: قسمت حقیقی و موهومی ضریب شکست  $WSe_2$ .

جفت شدگی پلاسمونیک به صورت زیرلایه [۱۳ و ۱۲] یا لایه‌ی نازک رسانا [۱۵ و ۱۴] و یا شبکه‌ای [۱۲] و استفاده از لایه میانی<sup>۳</sup>، لایه بالای<sup>۴</sup> و یا استفاده همزمان لایه میانی و بالایی با یا بدون لایه فلزی است [۱۶-۱۸].

در این مقاله، به منظور رسیدن به جذب بالا در ساختار یک بعدی شامل تک‌لایه‌ی  $WSe_2$  و لایه نازک طلا، تاثیر محل قرارگیری لایه میانی بررسی شده است. با توجه به نتایج دریافت‌شده حضور لایه میانی بین لایه  $WSe_2$  و پلاسمونیک (طلا) در افزایش جذب تاثیر بیشتری دارد.

## ۲- بخش تجربی

به منظور بررسی تاثیر محل قرارگیری لایه میانی بر روی جذب، ساختارهای I، II و III به ترتیب به صورت  $Air/WSe_2/Au/Spacer/Substrate$ ،  $Air/WSe_2/Spacer/Au/Substrate$  و  $Air/WSe_2/Spacer/Au/Spacer/Substrate$  پیشنهاد می‌شوند که در شکل ۱ نشان داده شده است.



شکل ۱: ساختار (الف) I، (ب) II و (ج) III.

نور فرودی از هوا عمودی به ساختارها تابیده می‌شود و زیرلایه و لایه میانی از جنس  $Si$  و  $SiO_2$  هستند. طیف جذب ساختار با استفاده از روش ماتریس انتقال<sup>۵</sup>، TMM، محاسبه می‌شود [۲۲]. ماتریس انتقال هر لایه برابر با:

$$M_j = \begin{pmatrix} \cos((2\pi/\lambda)n_j d_j) & -i \frac{1}{n_j} \sin((2\pi/\lambda)n_j d_j) \\ -i \frac{1}{n_j} \sin((2\pi/\lambda)n_j d_j) & \cos((2\pi/\lambda)n_j d_j) \end{pmatrix} \quad (1)$$

<sup>۲</sup>grating

<sup>۳</sup>spacer

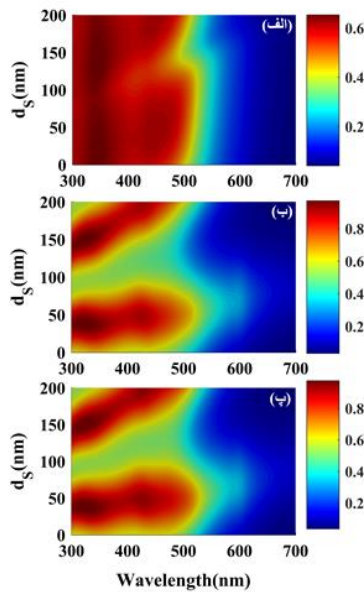
<sup>۴</sup>cover

<sup>۵</sup> Transfer Matrix Method (TMM)

با توجه به شکل ۲ ضریب شکست  $WSe_2$  قسمت موهومی قابل توجهی دارد که از اهمیت ویژه‌ای برخوردار است.

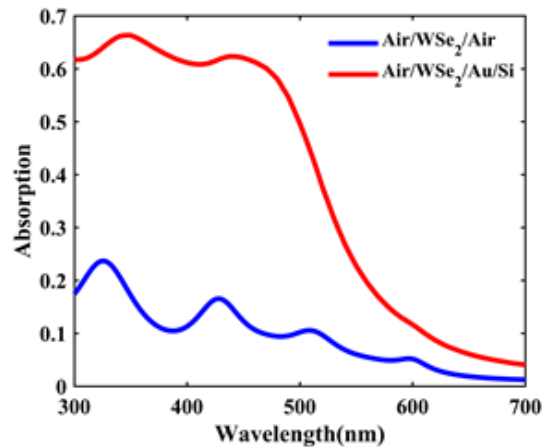
### ۳- نتایج و بحث

طیف جذب  $WSe_2$  معلق (زیرلایه هوا) و  $WSe_2$  بر روی طلا در شکل ۳ رسم شده است. تک‌لایه‌ی  $WSe_2$  دارای چهار گاف نوری مستقیم در طول موج‌های ۴۲۸، ۵۰۸، ۵۹۷ و ۵۷۳ نانومتر است که در آن طول موج‌ها به ترتیب دارای جذب ۱۷٪، ۱۱٪، ۷٪ و ۰/۷٪ است. با قرارگیری  $WSe_2$  بر لایه طلا مقدار جذب افزایش پیدا می‌کند.



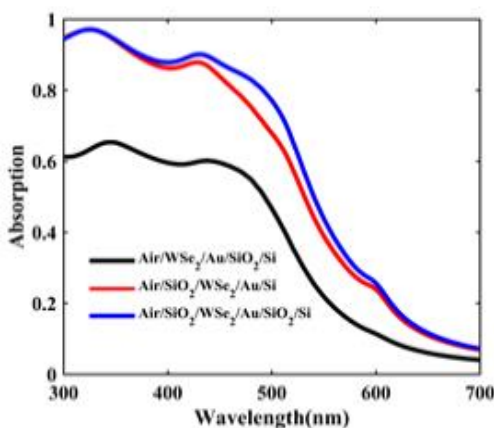
شکل ۴: ضخامت‌های مختلف لایه  $SiO_2$  بر حسب طول موج برای سه ساختار (الف) I، (ب) II و (ج) III.

در شکل ۴ ضخامت‌های متفاوت لایه میانی  $SiO_2$  بر حسب طول موج برای ساختارهای I، II و III مورد بررسی قرار گرفته‌اند. با توجه به شکل بیشینه جذب ساختارهای I، II و III به ترتیب در طول موج ۳۴۴، ۳۲۴ و ۳۲۵ نانومتر برای  $d_s = 14$  nm، ۳۸ nm،  $d_s = 39$  nm و  $d_s = 39$  nm به ۶۳٪، ۹۷٪ و ۹۷٪ می‌رسد. برای ضخامت‌های بهینه انتخاب شده شکل ۴، طیف جذب در کل بازه طول موج مرئی در شکل ۵ رسم شده است.



شکل ۳: طیف جذب  $WSe_2$  معلق و  $WSe_2$  بر روی طلا.

به منظور یافتن ساختاری با مقدار جذب بیشتر، تاثیر مکان قرارگیری لایه میانی  $SiO_2$  بر جذب مطالعه شده است.



شکل ۵: طیف جذب حالت‌های بهینه شکل ۴ بر حسب طول موج.

با توجه به شکل ۵، طیف جذب ساختار ۱ نسبت به دو ساختار دیگر کمتر است. همچنین، طیف جذب ساختارهای ۲ و ۳ تقریباً مشابه هم هستند و ساختار ۲ به دلیل لایه کمتر بهترین ساختار ۷۵

spectroscopy with surface-enhanced Raman scattering (SERS).” *Analytical chemistry*, 83, 2337, 2011.

[7] O. Lopez-Sanchez, D. Lembke, M. Kayci, A. Radenovic, A. Kis, “Ultrasensitive photodetectors based on monolayer  $\text{MoS}_2$ .” *Nature nanotechnology*, 8, 497, 2013.

[8] Z. Yin, H. Li, H. Li, L. Jiang, Y. Shi, Y. Sun, G. Lu, Q. Zhang, X. Chen, H. Zhang, “Single-layer  $\text{MoS}_2$  phototransistors.” *ACS nano*, 6, 74, 2011.

[9] N. Ansari, and F. Ghorbani. “Light absorption optimization in two-dimensional transition metal dichalcogenide van der Waals heterostructures.” *JOSA B*, 35, 1179-1185, 2018.

[10] W. Xiaoyu, J. Wang, Z. Hu, T. Sang, Y. Feng, “Perfect absorption of modified-molybdenum-disulfide-based Tamm plasmonic structures.” *Applied Physics Express*, 11, 062601, 2018.

[11] L. Hua, X. Gan, D. Mao, Y. Fan, D. Yang, J. Zhao, “Nearly perfect absorption of light in monolayer molybdenum disulfide supported by multilayer structures.” *Optics express*, 25, 21630-21636, 2017.

[12] Y. Long, H. Deng, H. Xu, L. Shen, W. Guo, C. Liu, W. Huang, W. Peng, L. Li, H. Lin, C. Guo, “Magnetic coupling metasurface for achieving broad-band and broad-angular absorption in the  $\text{MoS}_2$  monolayer.” *Optical Materials Express*, 7, 100-110, 2017.

[13] L. Long, Y. Yang, H. Ye, L. Wang, J. “Optical absorption enhancement in monolayer  $\text{MoS}_2$  using multi-order magnetic polaritons.” *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 200, 198-205, 2017.

انتخاب می‌شود که در آن لایه میانی بین لایه  $\text{WSe}_2$  و طلا قرار گرفته است.

## ۴- نتیجه‌گیری

با هدف دست یابی به جذب بالا ساختار شامل تک‌لایه  $\text{WSe}_2$ ، طلا به‌عنوان لایه‌ی پلاسمونیک و  $\text{SiO}_2$  به عنوان لایه میانی مورد مطالعه قرار گرفته است که ویژگی اپتیکی ساختار با توجه به محل قرارگیری لایه میانی بررسی شده است. با توجه به نتایج دریافت‌شده حضور لایه میانی بین لایه  $\text{WSe}_2$  و طلا در افزایش جذب تاثیر بیشتری دارد که در طول موج ۳۲۴ نانومتر و ضخامت  $d_s = 38\text{nm}$  به جذب ۹۷٪ دست یافته‌ایم.

## مراجع

[1] S. Pillai, K. R. Catchpole, T. Trupke, and M. A. Green, “Surface plasmon enhanced silicon solar cells,” *Applied physics*, 101, 093105, 2007.

[2] N. Huo, J. Kang, Z. Wei, S. Li, J. Li, S. Wei, “Novel and enhanced optoelectronic performances of multilayer  $\text{MoS}_2$ - $\text{WS}_2$  heterostructure transistors,” *Advanced Functional Materials*, 24, 7025-7031, 2014.

[3] N. P. Sergeant, O. Pincon, M. Agrawal, P. Peumans, “Design of wide-angle solar-selective absorbers using aperiodic metal-dielectric stacks,” *Optics express*, 17, 22800-22812, 2009.

[4] D. Regatos, B. Sepulveda, D. Farina, L. G. Carrascosa, L. M. Lechuga, “Suitable combination of noble/ferromagnetic metal multilayers for enhanced magneto-plasmonic biosensing.” *Optics express*, 19, 8336, 2011.

[5] A. Akbari, R.N. Tait, and P. Berini, “Surface plasmon waveguide Schottky detector.” *Optics express*, 18, 8505, 2010.

[6] S.A. Meyer, E.C.L. Ru, and P.G. Etchegoin, “Combining surface plasmon resonance (SPR)

one-dimensional photonic crystal.” Applied Physics Letter, 101, 052104, 2012.

[14] J.T. Liu, T.B. Wang, X.J. Li, N.H. Liu, “Ultrathin gold film modified optical properties of excitons in monolayer MoS<sub>2</sub>.” Physical Chemistry Chemical Physics, 115, 193511, 2014.

[15] G. Yi Jia, Q. Zhang, Z. X. Huang, S. Bin Huang, J. Xu, “Ultrathin gold film modified optical properties of excitons in monolayer MoS<sub>2</sub>.” Physical Chemistry Chemical Physics, 7, 23109-23113, 2017.

[16] H. Lu, X. Gan, D Mao, Y. Fan, D. Yang, J Zhao, “Nearly perfect absorption of light in monolayer molybdenum disulfide supported by multilayer structures.” Optics express, 25, 21634, 2017.

[17] S. Jinlin, L. Lu, C. Qiang, L. Zixue, “Surface plasmon-enhanced optical absorption in monolayer MoS<sub>2</sub> with one-dimensional Au grating.” Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiation, 211, 138-143, 2018.

[18] L. Jiang-Tao, T. Wang, X. Li, N. Liu, “Enhanced absorption of monolayer MoS<sub>2</sub> with resonant back reflector.” Journal of Applied Physics, 115, 193511, 2014.

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

[20] M.N. Polyanskiy, Available At <http://refractiveindex.info>.

[21] P.B. Johnson, R.W. Christy, “Optical Constants of the Noble Metals.” Physics Review B, 6, 4370, 1972.

[22] J.T. Liu, N. H. Liu, J. Li, X.J. Li and J. H. Huang, “Enhanced absorption of graphene with



# The impact of the silica as the spacer layer on the absorption of the structure composed of WSe<sub>2</sub> in the presence of plasmonic effect

N. Ansari \*, E. Mohebbi, F. Gholami

Department of Physics, Alzahra University, Tehran, Iran.

**Abstract:** Two-dimensional materials such as transition metal dichalcogenides (TMDCs) with direct band gaps have opened a new horizon for application in photonics and optoelectronic elements. Of various TMDCs, the WSe<sub>2</sub> monolayer is chosen to study its absorption in the presence of the gold as a plasmonic layer and SiO<sub>2</sub> as the spacer layer with alternative layer's positions. Optical properties of these structures are calculated based on the transfer matrix method, TMM, in the visible wavelength region. We found that the presence of the spacer layer between the WSe<sub>2</sub> and gold layer enhances the absorption significantly. In an optimal design and in the wavelength of 324 nm, while thickness of the spacer layer is 38 nm, the absorption is reached to 97%. Our findings can be applied for designing any desirable optical absorbers for high performance photovoltaic devices.

**Keywords:** transition metals dichalcogenides (TMDC), WSe<sub>2</sub>, plasmonic effect, spacer layer, absorption, transfer matrix method.