

## افزایش جذب نوری تک‌لایه $WS_2$ با استفاده از لایه میانی و لایه پلاسمونیک نقره

نرگس انصاری، انسیه محبی، فاطمه غلامی و مریم عنافچه

دانشکده فیزیک- شیمی، دانشگاه الزهراء، تهران

پست الکترونیکی: n.ansari@alzahra.ac.ir

(دریافت مقاله: ۱۳۹۸/۱۰/۱۴؛ دریافت نسخه نهایی: ۱۳۹۹/۳/۲۱)

### چکیده

از میان نانومواد دو بعدی، تک‌لایه  $WS_2$  با گاف نواری مستقیم و جذب تیز در طول موج ۶۱۹ نانومتر، افق جدیدی برای کاربری در فوتونیک و الکترواپتیک ایجاد کرده است. در این مقاله در راستای افزایش جذب، به بررسی اثر لایه نازک نقره به عنوان لایه پلاسمونیک روی زیرلایه و اثر لایه میانی و لایه پوشاننده به صورت نظری پرداخته شده است. ویژگی اپتیکی ساختارها با روش ماتریس انتقال، TMM، در ناحیه طول موج مرئی مورد بررسی قرار گرفته است. در طراحی این ساختارها با قرارگیری لایه میانی و لایه نقره در ساختار شامل تک‌لایه  $WS_2$ ، میزان جذب نسبت به حالت معلق از ۱۷٪ به ۵۷٪ افزایش یافته است. با تغییر زاویه فرود در طیف وسیعی از زاویه جذب بالای ۴۰٪ دیده می‌شود که چشم‌انداز خوبی برای تحقق کاربری‌های مبتنی بر تک‌لایه  $WS_2$  است.

**واژه‌های کلیدی:** تک‌لایه  $WS_2$ ، پلاسمونیک، طیف جذب، لایه میانی، لایه پوشاننده

### ۱. مقدمه

عملکرد بهتر دستگاه‌های اپتوالکترونیکی شامل تک‌لایه  $WS_2$

لازم است میزان جذب در قله‌ها افزایش یابد.

تاکنون چندین روش به منظور بهبود جذب نور در تک لایه‌های TMDC، به ویژه در  $MoS_2$ ، پیشنهاد شده است که جذب در یک تک طول موج [۷] یا پهنای طول موجی را افزایش [۸] می‌دهند. از جمله روش‌های افزایش جذب در تک طول موج استفاده از بلور فوتونی شامل نقص است [۹ و ۱۰]. استفاده از نانو ساختارهای فلزی پلاسمونیک به عنوان یکی دیگر از روش‌های بهبود جذب تک لایه TMDC مطرح شده است که به صورت زیرلایه [۱۱ و ۱۲]، لایه نازک [۱۳ و ۱۴] و یا نقره یا طلا می‌تواند به عنوان محیطی برای ایجاد پلاسمون جایگزیده

امروزه نانومواد دو بعدی تک‌لایه‌های کلکوژناید‌های فلزات واسطه<sup>۱</sup> (TMDC)، به علت گاف نواری مستقیم و جذب بالا در ناحیه طول موج مرئی برای کاربردهای اپتوالکترونیکی بسیار مورد توجه قرار گرفته‌اند [۱-۵]. یکی از مهم‌ترین TMDCها، تک‌لایه  $WS_2$  با ضخامت ۰/۶۱۸ نانومتر است که سه گاف نواری مستقیم در طول موج های ۴۳۴، ۵۱۷ و ۶۱۹ نانومتر دارد. قله های جذب در این طول موج‌ها به ترتیب ۱۹٪، ۸٪ و ۱۷٪ هستند [۶]. جذب تک‌لایه  $WS_2$  به دلیل ضخامت نانومتری، برای استفاده در دستگاه‌های اپتوالکترونیکی کم است. برای

۱. Transition Metal Dichalcogenides (TMDC)

شبکه‌ای<sup>۱</sup> [۱۱] استفاده می‌شوند. لایه رسانای نازک از جنس استفاده شود که باعث افزایش برهم‌کنش نور و مواد دوبعدی می‌شود. پلاسمون‌ها، به خاطر نوسانات دسته جمعی الکترون‌های رسانش، در لایه فلزی ایجاد می‌شوند که به دلیل این نوسانات، نور در سطح رسانا به دام می‌افتد و میدان الکتریکی جایگزیده ایجاد می‌شود که این جایگزیدگی باعث افزایش جذب در لایه  $WS_2$  می‌شود. امواج پلاسمونی، روشی مفید برای افزایش جذب در لایه  $WS_2$  است. یکی دیگر از این روش‌های مرسوم به منظور افزایش جذب، استفاده از لایه میانی<sup>۲</sup>، لایه پوشاننده<sup>۳</sup> و یا استفاده همزمان لایه میانی و لایه پوشاننده با یا بدون لایه فلزی است [۱۰-۱۵ و ۱۶].

اغلب در کارهای انجام شده ساختار به صورت دو بعدی [۱۷] یا ساختار یک بعدی همراه با حفره استوانه‌ای [۱۸] و یا لایه فلزی به صورت شبکه‌ای [۱۹] بررسی شده است. اما به علت طراحی و ساخت آسان و هزینه کمتر ساختارهای یک بعدی، رسیدن به جذب بالا با استفاده از آنها مطلوب‌تر است. در این مقاله به منظور رسیدن به جذب بالا در ساختار یک بعدی شامل تک‌لایه  $WS_2$ ، به بررسی تأثیر لایه پلاسمونیک نقره بر روی زیر لایه، لایه میانی و لایه پوشاننده بر جذب پرداخته شده است که استفاده از نقره به عنوان لایه پلاسمونیک در مقایسه با طلا ارزان‌تر و مقرون به صرفه‌تر بودن آن است.

## ۲. تئوری

در شکل ۱ طرح کلی ساختار پیشنهادی به منظور افزایش جذب نشان داده شده است که در آن  $WS_2$  بین لایه پوشاننده و لایه میانی و لایه نازک  $Ag$  روی زیر لایه به عنوان لایه پلاسمونیک قرار گرفته است. طرح‌های مختلفی بر اساس وجود یا عدم وجود یک یا چند لایه در ساختار، در جدول ۱ نشان داده شده است. زیر لایه، لایه میانی و لایه پوشاننده به ترتیب  $SiO_2$ ،  $SiO_2$  و  $PMMA$  انتخاب شده است. نور از هوا با زاویه فرودی  $\theta_{in}$  به ساختار تابیده می‌شود و زاویه انتشار در هر لایه با

۱. Grating

۲. Spacer

۳. Cover

استفاده از قانون اسنل به دست می‌آید.

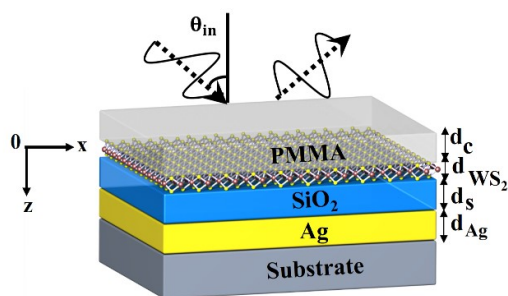
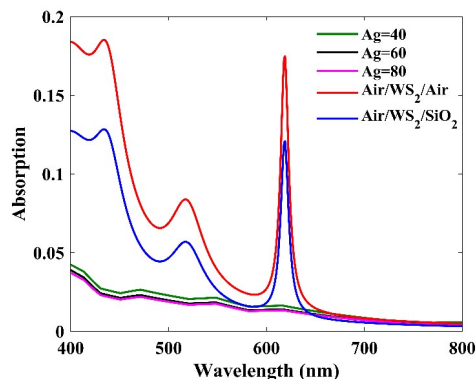
طیف جذب ساختار با استفاده از روش ماتریس انتقال، TMM، محاسبه می‌شود [۲۰]. در روش TMM ضریب شکست مختلط و ضخامت مواد مورد نیاز است. ضخامت تک‌لایه  $WS_2$ ،  $0.618 \mu m$  نانومتر است و ضخامت لایه میانی، لایه پوشاننده و  $Ag$  به ترتیب به صورت  $d_s$ ،  $d_c$  و  $d_{Ag}$  نمایش داده می‌شود. ضریب شکست مختلط  $SiO_2$ ،  $PMMA$ ،  $Ag$  و  $WS_2$  در بازه طول موج مرئی از مراجع [۶، ۲۱-۲۳] گرفته شده است.

## ۳. نتایج و بحث

به منظور شناسایی ساختار با جذب بالا، طیف جذب ضخامت‌های ۴۰، ۶۰ و ۸۰ نانومتری نقره،  $WS_2$  معلق و  $WS_2$  روی زیرلایه  $SiO_2$  برای تابش عمود در شکل ۲ رسم شده است. با توجه به قوانین اسنل و بزرگ بودن ضریب شکست زیرلایه  $SiO_2$  نسبت به هوا، وجود زیرلایه باعث کاهش جذب نسبت به حالت معلق  $WS_2$  می‌شود. میزان جذب نقره در تمام بازه طول موجی کمتر از  $WS_2$  معلق است. تک‌لایه  $WS_2$  معلق در سه طول موج ۴۳۴، ۵۱۷ و ۶۱۹ نانومتر به ترتیب قله‌های جذب ۱۹٪، ۸٪ و ۱۷٪ را دارند. از آنجایی که تک‌لایه  $WS_2$  در ۶۱۹ نانومتر قله تیزتری دارد، این طول موج به عنوان طول موج طراحی انتخاب شده است.

به منظور بررسی تأثیر پلاسمونیک، طیف جذب برای ضخامت‌های مختلف لایه نقره با قرارگیری لایه نقره بین تک‌لایه  $WS_2$  و زیرلایه (ساختار III) در شکل ۳. الف برای تابش عمود رسم شده است. این ساختار، جذب در ۶۱۹ نانومتر را به میزان کمی در مقایسه با ساختار بدون لایه طلا افزایش می‌دهد؛ به طوری که جذب در طول موج ۶۱۹ نانومتر برای ضخامت صفر نقره ۱۲٪ است و برای ضخامت نقره ۴ نانومتر به ۱۳٪ افزایش یافته است. علاوه بر این، با افزایش ضخامت نقره، جذب کمی کاهش می‌یابد.

به منظور افزایش جذب، لایه میانی بین نقره و  $WS_2$  (ساختار IV)، قرار داده شده است. طیف جذب برای ضخامت‌های مختلف لایه میانی بر حسب طول موج در شکل



شکل ۱. طرح کلی ساختار پیشنهادی که در آن  $WS_2$  بین لایه پوشاننده و لایه میانی و لایه پلاسمونیک Ag روی زیرلایه قرار گرفته است. ضخامت تک لایه  $WS_2$ ، لایه میانی، لایه پوشاننده و Ag به ترتیب به صورت  $d_{WS_2}$ ،  $d_s$ ،  $d_c$  و  $d_{Ag}$  نمایش داده شده است.

جدول ۱. حالت‌های خاص ساختارهای مورد مطالعه مبتنی بر وجود یا عدم وجود یک یا برخی از لایه‌ها.

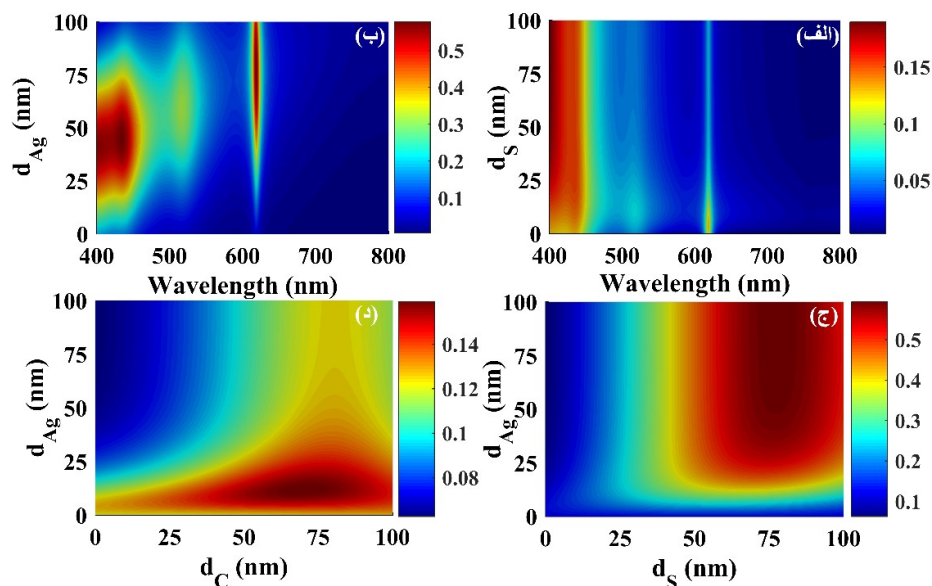
نام	ساختار	ضخامت
I	air/ $WS_2$ /sub	$d_{Au}=d_s=d_c=0$
II	air/cover/ $WS_2$ /sub	$d_{Au}=d_s=0$
III	air/ $WS_2$ /Ag/sub	$d_s=d_c=0$
IV	air/ $WS_2$ /spacer/Ag/sub	$d_s=0$
V	air/cover/ $WS_2$ /Ag/sub	$d_c=0$
VI	air/cover/ $WS_2$ /spacer/Ag/sub	$d_{Au}=d_s=d_c \neq 0$
VII	cover/ $WS_2$ /spacer/sub air/	$d_{Au}=0$

میانی و نقره بر جذب برای تابش عمود در شکل ۳. ج نشان داده شده است که بیشترین جذب در  $d_s=77$  نانومتر مشاهده می‌شود. در ضخامت  $d_{Ag}=57$  nm میزان جذب ۵۹٪ و در  $d_{Ag}=40$  nm میزان جذب ۵۷٪ است. با توجه به اختلاف کم جذب در ضخامت‌های ۵۷ و ۴۰ نانومتر نقره، ضخامت بهینه برای نقره ۴۰ نانومتر انتخاب می‌شود.

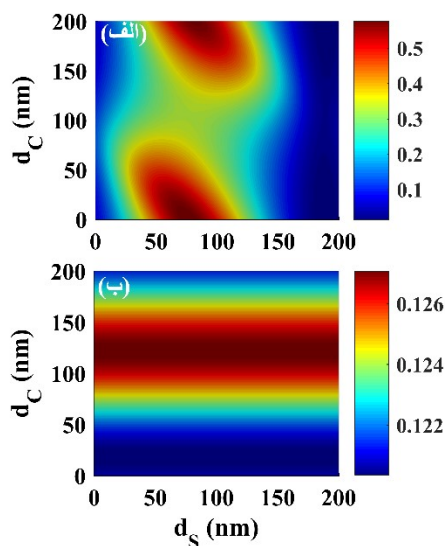
طراحی دیگر به منظور افزایش جذب ساختار V است که در آن لایه پوشاننده روی تک لایه  $WS_2$  قرار گرفته است. اثر ضخامت‌های لایه پوشاننده و نقره بر جذب در ۶۱۹ نانومتر، در شکل ۳. د برای تابش عمود بررسی شده است که بیشترین جذب برابر با ۱۵ درصد در بازه ضخامت‌های نقره بین ۱۲ تا

۳. ب برای تابش عمود برای ضخامت ۴۰ نانومتری نقره رسم شده است. هنگامی که لایه میانی با ضخامت ۷۷ نانومتر بین نقره و  $WS_2$  قرار می‌گیرد، میزان جذب در طول موج ۶۱۹ نانومتر تا ۵۷٪ افزایش می‌یابد. لایه میانی و لایه پوشاننده ممکن است باعث جابه‌جایی طول موج قله تشدید شوند [۸] که با توجه به شکل ۳. الف و ۳. ب مشاهده می‌شود در این ساختار طول موج قله جذب با تغییر ضخامت نقره و لایه میانی تغییر نمی‌کند و برای ضخامت‌های مختلف نقره و لایه میانی طول موج قله جذب در ۶۱۹ نانومتر ثابت است.

برای یافتن بهترین ضخامت‌ها برای جذب بالا، با ثابت در نظر گرفتن طول موج در ۶۱۹ نانومتر، اثر ضخامت‌های لایه



شکل ۳. (الف) طیف جذب برای تابش عمود بر حسب ضخامت لایه نقره در ساختار III، (ب) بر حسب ضخامت لایه میانی در ساختار IV برای  $d_{Ag} = 40$  نانومتر، (ج) تاثیر ضخامت لایه میانی و نقره بر جذب ساختار IV و (د) اثر ضخامت لایه پوشاننده و نقره بر جذب در ساختار V.

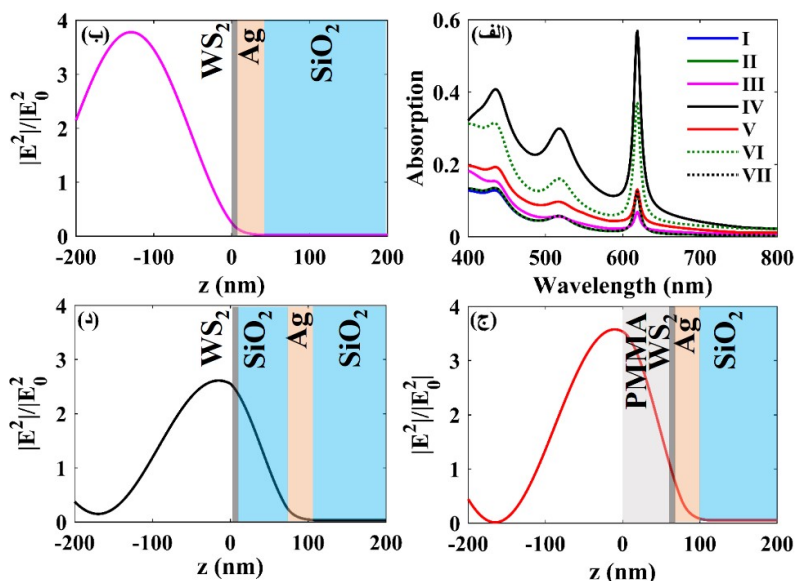


شکل ۴. جذب ساختار همراه با لایه میانی و لایه پوشاننده برای تابش عمود در (الف) حضور و (ب) عدم حضور لایه نقره.

۴۰ نانومتر برای  $d_c = 75$  nm است. به منظور نشان دادن اهمیت اثر پلاسمونیک، برای طول موج ۶۱۹ نانومتر، جذب ساختارهای تک لایه  $WS_2$  همراه با لایه میانی و لایه پوشاننده در حضور و عدم حضور لایه نقره با ضخامت ۴۰ نانومتر به ترتیب برای ساختارهای VI و VII در شکل ۴. الف و ب. برای تابش عمود رسم شده است. همان طور که در شکل دیده می شود وجود نقره باعث افزایش جذب از ۱۲٪ به ۵۷٪ می شود که بیشینه جذب در ضخامت  $d_s = 77$  و  $d_c = 0$  نانومتر است. با توجه به نتایج ساختار VI در مقایسه ساختار IV، طراحی مناسبی به منظور افزایش جذب نیست یعنی حضور لایه پوشاننده و میانی بدون حضور لایه پلاسمونیک و همچنین لایه پلاسمونیک بدون لایه پوشاننده و میانی تأثیری بر افزایش جذب ندارد، اما ترکیبشان جذب را بیش از ۴ برابر افزایش می دهد.

پوشاننده در ساختار، ساختار II، جذب را تغییر نمی دهد. هنگامی که لایه نقره با ضخامت ۴ نانومتر بین زیر لایه و تک لایه  $WS_2$  قرار بگیرد (ساختار III) جذب تا ۱۳٪ افزایش می یابد. همچنین زمانی که لایه پوشاننده با ضخامت ۷۵ نانومتر در کنار

برای تعیین ساختار بهینه، طیف جذب ساختارهای I، II، III، IV، V، VI و VII در بهترین ضخامت هایشان در شکل ۵. الف رسم شده است. با توجه به شکل قراردادن تنها لایه



شکل ۵. (الف) طیف جذب ساختارهای I, II, III, IV, V, VI و VII برای تابش عمود. شدت میدان ساختارهای (ب) III, (ج) IV و (د) V برای تابش عمود.

است. در شکل ۶. ج طیف جذب بر حسب زاویه رسم شده است که روند کاهش جذب را در هر دو قطبش به خوبی نشان می‌دهد. میزان جذب بالای ۴۰٪ در هر دو قطبش در پهنای زیادی از زاویه دیده می‌شود.

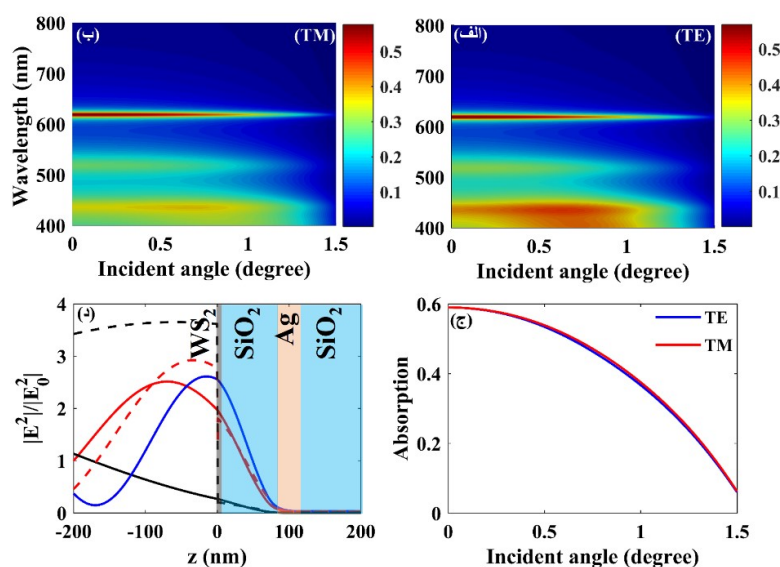
شدت نور بر حسب مکان در طول موج ۶۱۹ نانومتر برای هر دو قطبش برای زاویه فرود صفر درجه، ۴۵ درجه و ۸۰ درجه در شکل ۶. د نشان داده شده است. با افزایش زاویه، بیشترین شدت در تک لایه WS<sub>2</sub> اتفاق نمی‌افتد و بیشترین جایگزیدگی در زاویه عمود است.

در نهایت نتایج این کار با ساختار مشابه با لایه پلاسمونیک طلا [۷] بررسی شده است و بیشینه جذب ساختار با لایه پلاسمونیک طلا و نقره در جدول ۲ آورده شده است. ضخامت بهینه طلا و نقره ۴۰ نانومتر و ضخامت لایه پوشاننده در هر دو حالت ۷۵ نانومتر است. همچنین ضخامت لایه میانی در ساختار شامل طلا ۷۰ نانومتر و در ساختار شامل نقره ۷۷ نانومتر است. با توجه به نتایج، جذب ساختار با لایه طلا بیشتر از نقره است اما از نظر هزینه در کارهای تجربی نقره مقرون به صرفه تر است.

لایه نقره با ضخامت ۴۰ نانومتر قرار بگیرد (ساختار V)، جذب به میزان ۱۵٪ افزایش می‌یابد. بیشترین میزان جذب برای ساختار IV به میزان ۵۷٪ است که به عنوان بهترین ساختار با جذب بیشینه انتخاب می‌شود.

افزایش جذب به دلیل جایگزیدگی نور و اثر پلاسمونیک و افزایش شدت نور در تک لایه WS<sub>2</sub> است. به منظور بررسی توزیع میدان، شدت ساختارهای III, IV و V به ترتیب در شکل ۵. ب تا ۵. د رسم شده است. اثر لایه پلاسمونیک باعث جایگزیدگی نور در تک لایه WS<sub>2</sub> می‌شود. شدت در تک لایه WS<sub>2</sub> برای ساختار IV بیشتر از دیگر ساختارها است، در نتیجه جذب در ساختار IV بیشترین مقدار را دارد.

زاویه فرود نیز از عوامل تأثیر گذار بر جذب است که باید اثر آن در هر دو قطبش در نظر گرفته شود. به همین منظور تأثیر زاویه فرودی برای قطبش الکتریکی عرضی (TE) و مغناطیسی عرضی (TM) برای ساختار IV به ترتیب در شکل ۶. الف و ۶. ب بررسی شده است. با توجه به شکل، برای هر دو قطبش TE و TM در طول موج ۶۱۹ نانومتر میزان جذب با افزایش زاویه کاهش می‌یابد و بیشینه جذب (۵۷٪) در زاویه عمود



شکل ۶. تأثیر زاویه فرودی برای دو قطبش (الف) TE و (ب) TM برای ساختار IV، (ج) طیف جذب بر حسب زاویه در هر دو قطبش و (د) شدت نور بر حسب مکان در طول موج ۶۱۹ نانومتر برای قطبش TE (خط) و TM (نقطه چین) برای زاویه فرود صفر درجه (آبی)، ۴۵ درجه (قرمز) و ۸۰ درجه (مشکی).

جدول ۲. بیشینه جذب ساختار با لایه پلاسمونیک طلا و نقره.

ساختار	بیشینه جذب ساختار با طلا	بیشینه جذب ساختار با نقره
III	٪۱۸	٪۱۳
IV	٪۶۱	٪۵۷
V	٪۲۸	٪۱۵
VI	٪۶۱	٪۵۷

ساختار، میزان جذب به ۶۱٪ افزایش می‌یابد که با توجه به ارزان بودن نقره، این ساختار از اهمیت ویژه‌ای در کاربردهای تجربی برخوردار است. با بررسی ویژگی‌های اپتیکی در ساختار دریافته‌ایم بیشینه جذب برای هر دو قطبش در زاویه عمود دیده می‌شود و تا زاویه ۵۲ درجه، پهنای زاویه با جذب بالای ۴۰٪ دیده می‌شود که افق جدیدی را برای کاربردهای اپتوالکترونیکی باز می‌کند.

#### ۴. نتیجه‌گیری

با هدف دستیابی به جذب بالا در تک طول موج ۶۱۹ نانومتر در ساختار شامل تک‌لایه  $WS_2$ ، تأثیر لایه نازک نقره بر روی زیر لایه به عنوان لایه پلاسمونیک، تأثیر لایه میانی و لایه پوشاننده بررسی شده است. قرارگیری لایه میانی و لایه نقره در ساختار باعث جایگزینی موج بیشتر در تک‌لایه  $WS_2$  و افزایش جذب تا ۵۷٪ می‌شود؛ درحالی که حالت معلق  $WS_2$  تنها ۱۷٪ جذب داشت. در مقایسه با لایه پلاسمونیک طلا به جای نقره در همین

#### مراجع

13. J T Liu, T B Wang, X J Li, and N H Liu, *Physical Chemistry Chemical Physics* **115** (2014) 193511.
14. G Yi Jia, Q Zhang, Z X Huang, S Bin Huang, and J Xu, *Physical Chemistry Chemical Physics* **7**, 23 (2017) 109.
15. S Jinlin, L Lu, C Qiang, and L Zixue, *Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiation*, **211** (2018) 138.
16. L Jiang-Tao, T Wang, X Li, and N Liu, *Journal of Applied Physics* **115** (2014) 193511.
17. L Hongju, M Qin, L Wang, X Zhai, R Ren, and J Hu, *Optic. Express* **25** (2017) 31612.
18. X Jiang, T Wang, S Xiao, X Yan, L Cheng, and Q Zhong, *Nanotechnology* **29** (2018) 335205.
19. C Jintao, J Wang, G Yang, Y Lu, R Sun, P Yan, and S Gao, *Superlattices and Microstructures* **110** (2017) 26.
20. J T Liu, N H Liu, J Li, X J Li, and J H Huang, *Applied Physics Letter* **101** (2012) 052104.
21. G Ghosh, *Optics communications* **163** (1999) 95.
22. N Sultanova, S Kasarova, and I Nikolov, *Acta Physica Polonica A* **116** (2009) 585.
23. P B Johnson and R W Christy, *Phys. Rev. B* **6** (1972) 4370.
2. Z Yin, H Li, H Li, L Jiang, Y Shi, Y Sun, G Lu, Q Zhang, X Chen, and H Zhang, *ACS nano* **6** (2011) 74.
3. D Regatos, B Sepulveda, D Farina, L G Carrascosa, and L M Lechuga, *Optics express* **19** (2011) 8336.
4. A Akbari, R N Tait, and P Berini, *Optics express* **18** (2010) 8505.
5. O Lopez-Sanchez, D Lembke, M Kayci, A Radenovic, and A Kis, *Nature nanotechnology* **8** (2013) 497.
6. N Ansari, and F Ghorbani. *JOSA B* **35** (2018) 1179.
7. N Ansari, E Mohebbi, and F Gholami, *Journal of Applied Physics* **127** (2020) 063101.
8. N Ansari, E Mohebbi, and F Gholami, *Applied Physics B* **126** (2020) 3.
9. W Xiaoyu, J Wang, Z Hu, T Sang, and Y Feng, *Applied Physics Express* **11** (2018) 062601.
10. L Hua, X Gan, D Mao, Y Fan, D Yang, and J Zhao, *Optics express* **25** (2017) 21630.
11. Y Long, H Deng, H Xu, L Shen, W Guo, C Liu, W Huang, W Peng, L Li, H Lin, and C Guo, *Optical Materials Express* **7** (2017) 100.
12. L Long, Y Yang, H Ye, and L Wang, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* **200** (2017) 198.