

## تقویت جذب پهن باند نور در تک لایه‌های دی‌سلناید تنگستن به کمک ساختارهای پلاسمون سطحی

زهرا صادق تبریزی و مهدی خزاعی نژاد قره‌تکان

گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه فردوسی مشهد، مشهد

پست الکترونیکی: khazaeinezhad@um.ac.ir

(دریافت مقاله: ۱۴۰۲/۰۲/۰۷؛ دریافت نسخه نهایی: ۱۴۰۲/۰۵/۰۸)

### چکیده:

در طول دهه گذشته مواد دو بعدی مانند گرافن و دی‌کالکوژن‌های فلزات واسطه، به دلیل خواص الکتریکی و نوری قابل ملاحظه‌ای که دارند، توجه گسترده‌ای را در نانو فوتونیک و اپتوالکترونیک به خود جذب کرده‌اند. برخلاف گرافن با گاف انرژی صفر، دی‌کالکوژن‌های فلزات واسطه، مانند دی‌سلناید تنگستن که در حالت حجیم گاف انرژی خیلی بزرگ و غیرمستقیم دارند، با کاهش ضخامت آنها به تک لایه، گاف‌های نواری مستقیم در ناحیه مرئی و فروقرمز نزدیک دارند. با این حال به دلیل ضخامت اتمی ذاتی، این مواد با چالش شدیدی برای برهم‌کنش بین نور و ماده مواجه می‌شوند که منجر به جذب و گسیل نور ضعیف می‌شود. برای مثال تک لایه‌های دی‌سلناید تنگستن با ضخامت  $0.649$  نانومتر که گاف انرژی  $1.64$  الکترون ولت دارد، کمتر از  $10\%$  نور فرودی را جذب می‌کنند. بنابراین افزایش میزان جذب نور در تک لایه‌های دی‌سلناید تنگستن و سایر دی‌کالکوژن‌های فلزات واسطه به مسئله مهمی برای کاربردهای عملی در دستگاه‌های الکترونیک و فوتونیک تبدیل می‌شود. یک راه‌حل برای رفع این مشکل می‌تواند ترکیب این تک لایه‌ها با ساختارهای پلاسمون سطحی باشد. در این مقاله به دنبال این هستیم که با طراحی یک سلول واحد نسبتاً ساده، میزان جذب نور در ناحیه مرئی و فروقرمز نزدیک را به حالت پهن‌باند ارتقا دهیم. میانگین جذب جاذب پیشنهادی در بازه طول موجی  $600$  تا  $850$  نانومتر تقریباً برابر  $93\%$  درصد به دست می‌آید. لازم به ذکر است که شبیه‌سازی‌های موجود در این مقاله، به وسیله نرم‌افزار لومریکال انجام شده است. این نرم‌افزار مبتنی بر گسسته‌سازی معادلات ماکسول در حوزه زمان و مکان به کمک روش تفاضل محدود در حوزه زمان است.

**واژه‌های کلیدی:** دی‌کالکوژن‌های فلزات واسطه، تک لایه‌های دی‌سلناید تنگستن، پلاسمون سطحی، جذب پهن‌باند، نرم‌افزار لومریکال

است [۱-۵]. این برهم‌کنش‌ها منجر به تقویت میدان نوری در

ناحیه پراش فرنل و در ابعاد زیر طول موجی می‌شود. بر اساس مدل پلاسمایی برای فلزات، با قرار گرفتن فلز در معرض میدان الکتریکی خارجی، الکترون‌های آزاد درون فلز در پاسخ به میدان خارجی شروع به نوسانات دسته‌جمعی می‌کنند. این حرکت نوسانی، نوسانات پلاسمای نامیده می‌شود. به هر کوانتوم از این نوسانات، پلاسمون گویند. اگر نوسانات درون فلز ایجاد شود، به پلاسمون ایجاد شده پلاسمون حجمی و اگر در سطح

### ۱. مقدمه

پلاسمونیک بخش بزرگی از علم نانو فوتونیک را شامل می‌شود که در آن به دنبال راه‌کارهایی جهت محصورسازی امواج الکترومغناطیسی در ابعادی برابر و یا کوچک‌تر از طول موج این امواج، هستند. موضوع علم پلاسمونیک بررسی برهم‌کنش بین تابش الکترومغناطیسی و الکترون‌های رسانش در سطوح مشترک فلز-دی‌الکتریک یا در نانو ساختارهای فلزی کوچک

تنگستن ( $WSe_2$ ) یکی از مواد دو بعدی مهم در خانواده دی-کالکوژن‌های فلزات واسطه است. بلور  $WSe_2$  یک ساختار بلوری شش گوشه است که در آن دو ثابت شبکه  $a$  و  $b$  با هم برابرند. در این ساختار ثابت شبکه بهینه شده برای تک لایه‌های  $WSe_2$ ،  $3/29$  آنگستروم و فاصله میان دو اتم تنگستن و سلنیوم در یک تک لایه که به وسیله پیوند کووالانسی به یکدیگر اتصال دارند  $2/54$  آنگستروم است [۱۰ و ۱۱]. ضخامت تک لایه‌های  $WSe_2$   $0/649$  نانومتر است و قله‌های جذب قابل توجهی در ناحیه طول‌موج‌های مرئی دارد. تک لایه‌های  $WSe_2$  چهار گاف نواری مستقیم در طول موج‌های  $428$ ،  $508$ ،  $573$  و  $597$  نانومتر دارد که جذب در آن طول موج‌ها به ترتیب  $17$ ،  $11$ ،  $7$  و  $0/7$  درصد است [۱۰ و ۱۱]. این گاف‌ها به گذارهای بین باند ظرفیت و رسانش آن و مدهای اکسیتونی ایجاد شده در نزدیکی این باندها مرتبط است [۱۲].

دی‌کالکوژن‌های فلزات واسطه به عنوان مواد نازک اتمی در ساخت ترانزیستورهای اثر میدانی و آشکارسازهای نوری کاربرد دارند [۱۳-۱۵]. با این وجود به دلیل ضخامت ناچیز جذب نور کم در مواد دو بعدی، کاربردهای عملی آنها را به شدت محدود می‌کند. به منظور بهبود جذب نور در دی‌کالکوژن‌های فلزات واسطه، می‌توانیم از یک روش فیزیکی برای افزایش برهم‌کنش بین تک لایه TMDs و نور ورودی استفاده کنیم. روش‌های متعددی برای این کار از قبیل: قرار دادن این تک لایه‌ها در داخل ساختارهای بازخورد مثل آینه‌های براگ و بلورهای فوتونی یک بعدی، وجود دارد. همچنین در سال‌های اخیر اثبات شده است که ترکیب و ادغام این تک لایه‌ها با ساختارهای پلاسمون سطحی، یک مسیر مؤثر برای تقویت خواص نوری آنها است [۱۶-۲۵]. ساختارهای پلاسمونی و فراماده‌ای با گیر انداختن میدان ورودی در نزدیکی فصل مشترک فلز-دی‌الکتريکی می‌توانند به این منظور مورد استفاده قرار گیرند. با قرار دادن تک لایه‌های از جنس دی-کالکوژن‌های فلزات واسطه در نزدیکی فصل مشترک فلز-دی‌الکتريکی، مدت زمانی که میدان ورودی در مجاورت این تک لایه‌ها قرار می‌گیرد افزایش می‌یابد. با افزایش زمان برهم‌کنش، میزان جذب نور در این تک لایه‌ها تقویت می‌شود. در ناحیه طیفی  $400$  تا  $850$  نانومتر تک لایه‌های دی‌سلناید تنگستن چهار قله در

ذرات یا سطح فصل مشترک فلز-دی‌الکتريکی رخ دهد به آن پلاسمون سطحی می‌گویند. به عبارتی منظور از پلاسمون سطحی، نوسان دسته‌جمعی الکترون‌های رسانش فلزی در فصل مشترک بین فلز و دی‌الکتريکی است [۱-۵]. پلاسمون‌های سطحی را به دو دسته پلاریتون پلاسمون‌های سطحی (SPP) و پلاسمون‌های سطحی جایگزیده (LSP) دسته‌بندی می‌کنند. در پلاریتون پلاسمون‌های سطحی نوسانات تجمعی الکترون‌های رسانش فلزی به تقلید از میدان ورودی در فصل مشترک فلز-دی‌الکتريکی منتشر می‌شوند، در حالی که در پلاسمون‌های سطحی جایگزیده نوسانات تجمعی الکترون‌های رسانش امکان انتشار ندارند و اغلب در محل گوشه‌ها در فصل مشترک محدود شده‌اند [۴]. اگر بسامد نور فرودی با بسامد تشدید پلاسمون‌های سطحی برابر باشد، تشدید پلاسمون سطحی رخ می‌دهد. بسامد تشدید پلاسمون‌های سطحی به جنس فلز و دی‌الکتريکی و پارامترهای هندسی ساختار مثل شکل، اندازه و دوره تناوب ساختار بستگی دارد. امروزه از پدیده تشدید پلاسمون‌های سطحی در زمینه‌هایی مانند ساخت سلول‌های خورشیدی، حسگرهای شیمیایی و پزشکی و لیتوگرافی با دقت بالا استفاده می‌شود [۱-۵].

از زمان کشف گرافن در سال ۲۰۰۴ تا به امروز تحقیقات فراوانی بر روی ساخت و سنتز، دسته‌بندی و کاربرد مواد دو بعدی دیگر صورت گرفته است [۶ و ۷]. یک دسته مهم از این مواد، دی‌کالکوژن‌های فلزات واسطه (TMDs) هستند. این مواد با فرمول کلی  $MX_2$  نشان داده می‌شوند که نماد  $M$  یکی از فلزات واسطه مانند مولیبدن (Mo) و تنگستن (W) و نماد  $X$  یک اتم مربوط به گروه کالکوژن جدول تناوبی مانند گوگرد (S) و سلنیوم (Se) است. در این مواد یک لایه از اتم‌های فلزات واسطه توسط پیوند کووالانسی بین دو لایه از اتم‌های کالکوژن ساندویچ شده است. لایه‌های ساندویچ شده با نیروی واندروالس ضعیفی با هم اندرکنش دارند. TMD ها در شکل حجیم و توده‌ای نیم‌رساناهایی با گاف انرژی خیلی بزرگ و غیرمستقیم هستند اما اگر ضخامت آنها را کاهش دهیم و به صورت تک لایه در آوریم، گاف‌های نواری مستقیم در ناحیه مرئی و فروسرخ نزدیک دارند [۸ و ۹]. تک لایه‌های دی‌سلناید

## ۲. ساختار جاذب پیشنهادی

در شکل ۱ نمایی از طرح کلی سلول واحد جاذب پیشنهادی نشان داده شده است. سلول واحد شامل تک لایه ای از دی سلناید تنگستن است که بر روی یک فیلم نازک سلیکونی قرار گرفته است. بر روی تک لایه  $WSe_2$  یک فیلم نازک طلا دارای شکاف های ترکیبی مربعی و یک حلقه دایروی قرار دارد و کل ساختار توسط یک بستر طلای مسطح پشتیبانی می شود. در سلول واحد نشان داده شده در شکل ۱،  $P$  دوره تناوب در راستاهای  $x$  و  $y$  است. هر سلول واحد شامل شکاف هایی به صورت حلقه دایره ای و مربعی است که در لایه طلای بالایی با ضخامت  $D_1$  ایجاد شده اند. طول ضلع شکاف مربعی  $L$  است. همچنین شعاع بیرونی و شعاع درونی شکاف دایره ای به ترتیب  $R_1$  و  $R_2$  است. شکاف مربعی درست در مرکز حلقه دایره ای قرار دارد. در این شکل ضخامت های تک لایه  $WSe_2$ ، لایه سلیکون و زیر لایه طلا به ترتیب با  $D_2$ ،  $D_3$  و  $D_4$  نشان داده شده اند. در تمامی شبیه سازی ها دوره تناوب ساختار  $P = 550 \text{ nm}$ ، ضخامت لایه دی سلناید تنگستن  $D_1 = 649 \text{ nm}$  و ضخامت لایه طلای پایینی  $D_4 = 1000 \text{ nm}$  فرض شده اند. بقیه پارامترهای هندسی به منظور دستیابی به نتایج بهتر تغییر می کنند. منبع نوری استفاده شده در این شبیه سازی موج تخت صفحه ای است. در شبیه سازی های اولیه راستای قطبش نور ورودی را در راستای محور  $y$  در نظر می گیریم. همچنین در شبیه سازی های انجام شده شرایط مرزی در راستای  $x$  و  $y$  به صورت تناوبی و در راستای  $z$  به صورت جاذب کاملاً همسان (PML) در نظر گرفته شده است. از مش بندی غیریکنواخت با حداقل اندازه مش بندی  $0.16225$  نانومتر در تک لایه  $WSe_2$  استفاده شده است. در خارج از تک لایه  $WSe_2$  و به منظور بهینه سازی فضای ذخیره سازی و زمان محاسبه، اندازه مش بندی افزایش می یابد. با توجه به این که ضخامت زیر لایه طلا خیلی بیشتر از عمق نفوذ امواج الکترومغناطیسی است، امکان عبور امواج از این ساختار نزدیک به صفر است ( $T = 0$ ). بنابراین میزان جذب در این ساختار را می توان از رابطه  $A = 1 - R$  به دست آورد که در این رابطه،  $R$  ضریب بازتاب از سطح جاذب پیشنهادی است.

طیف جذب دارد. با استفاده از ساختارهای هندسی مناسب می توان هر کدام از این قله ها را به تنهایی (به منظور رسیدن به جذب تک باند قوی) و یا با هم (به منظور رسیدن به جذب پهن باند نور) تقویت کرد [۱۶-۲۵].

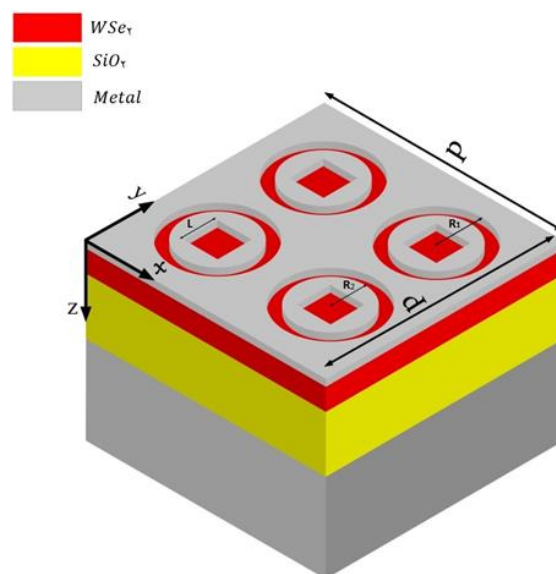
در این مقاله، با تعمیم کار انجام شده در مراجع [۱۶-۲۵] برای تک لایه دو بعدی  $WSe_2$ ، به یک ساختار نسبتاً ساده برای تقویت جذب پهن باند نور ورودی در این ماده دست یافتیم. سلول واحد جاذب پیشنهادی شامل تک لایه ای از دی سلناید تنگستن است که بر روی یک فیلم نازک سلیکونی قرار گرفته است. بر روی تک لایه  $WSe_2$  یک فیلم نازک طلا با شکاف های ترکیبی مربعی و دایروی قرار دارد و کل ساختار توسط یک بستر طلای مسطح پشتیبانی می شود. با بهینه سازی پارامترهای هندسی دخیل، به میانگین جذب برابر با  $93/4$  درصد در ناحیه طول موجی  $600$  تا  $850$  نانومتر دست یافتیم. از مزایای دیگر جاذب پهن باند پیشنهادی تقارن آن است که منجر به عدم حساسیت به نوع قطبش نور ورودی می شود. با توجه به جذب بالا و پهن باند نور و عدم حساسیت به نوع قطبش نور ورودی این جاذب پیشنهادی را می توان در طراحی سلول های خورشیدی استفاده کرد.

به صورت تجربی تک لایه های از جنس دی کالکوژن های فلزات واسطه اغلب با استفاده از روش لایه نشانی تبخیر شیمیایی بر روی بسترهای مختلف ساخته می شوند و به کمک تکنیک انتقال اپتیکی می توان آنها را بر روی لایه سلیکون منتقل کرد. یک روش دیگر برای تهیه تک لایه های دی کالکوژن های فلزات واسطه روش لایه برداری مکانیکی است. لایه طلای حفره دار را نیز می توان با روش های معمول لیتوگرافی مثل لیتوگرافی باریکه الکترونی تهیه و به ساختار مورد نظر اضافه کرد [۱۲ و ۲۲]. لازم به ذکر است که شبیه سازی های انجام شده در این مقاله توسط نرم افزار لومریکال که بر اساس گسسته سازی معادلات ماکسول در حوزه زمان و مکان مبتنی بر روش تفاضل های محدود در حوزه زمان (FDTD) کار می کند، انجام شده است [۲۶].

ساختار بسیار کم و میانگین جذب تقریباً برابر با ۱۹٪ است. در ادامه، با قرار دادن لایه طلائی شکاف دار در بالای ساختار، تأثیر آن را در طیف جذب ساختار بررسی می‌کنیم. نتایج شبیه‌سازی در ساختاری با ضخامت لایه طلائی بالایی  $D_1 = 20 \text{ nm}$ ، ضخامت لایه سیلیکون  $D_2 = 120 \text{ nm}$ ، طول ضلع شکاف مربعی  $L = 90 \text{ nm}$ ، شعاع بیرونی و درونی حلقه دایروی برابر با  $R_1 = 95 \text{ nm}$  و  $R_2 = 70 \text{ nm}$ ، در شکل ۳ رسم شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود با قرار دادن لایه طلائی شکاف دار در بالای ساختار، میزان جذب جاذب پیشنهادی به میزان چشم‌گیری افزایش یافته است به گونه‌ای که در بازه طول موج ۶۰۰ تا ۸۵۰ نانومتر میانگین جذب این جاذب، به بیش از ۹۰٪ افزایش یافته است.

با توجه به میانگین جذب بالاتر این ساختار و به منظور دستیابی به ساختار بهینه، تأثیر عوامل مختلف بر جذب را برای این ساختار بررسی می‌کنیم. در انتها درباره سازوکارهای جذب در این ساختار بحث خواهیم کرد.

یکی از پارامترهای هندسی مؤثر بر میزان جذب جاذب پیشنهادی، ابعاد و اندازه شکاف‌های مربعی موجود بر سطح لایه طلائی بالایی سلول است. به منظور بررسی تأثیر این عامل بر میزان جذب ساختار، ضمن ثابت نگه داشتن سایر پارامترهای مورد استفاده در شکل ۳، طیف جذب ساختارهای با طول ضلع شکاف‌های مربعی برابر با سه مقدار ۸۵، ۹۰ و ۹۵ نانومتر در شکل ۴ رسم شده است. همان‌طور که در شکل ۴ مشاهده می‌شود، با تغییر ضلع شکاف‌های مربعی، در بازه طول موج ۵۰۰ تا ۶۰۰ نانومتر نمودارهای جذب تقریباً برهم منطبق‌اند. در خارج از این بازه برای طول ضلع ۸۵ نانومتر، پهنای جذب نسبت به سایر طول ضلع‌ها کاهش یافته است. همچنین برای طول ضلع ۹۵ نانومتر پهنای باند جذب نسبتاً افزایش داشته است. میانگین جذب در بازه طول موجی ۶۰۰ تا ۸۵۰ نانومتر برای طول ضلع ۸۵ نانومتر برابر ۹۰٪، طول ضلع ۹۰ نانومتر برابر ۹۳٪ و طول ضلع ۹۵ نانومتر برابر ۹۲٪ به دست آمده است. بنابراین اندازه بهینه طول ضلع در ساختار سلول پیشنهادی برابر با ۹۰ نانومتر است.



شکل ۱. طرحواره سلول واحد جاذب پیشنهادی با دوره تناوب P شامل یک فیلم نازک طلا دارای شکاف‌های ترکیبی مربعی با طول ضلع L و یک حلقه دایروی با شعاع بیرونی  $R_1$  و شعاع درونی  $R_2$  و تک لایه دی‌سلناید تنگستن که بر روی یک فیلم نازک سیلیکونی قرار گرفته است. کل ساختار توسط یک بستر طلائی مسطح پشتیبانی می‌شود.

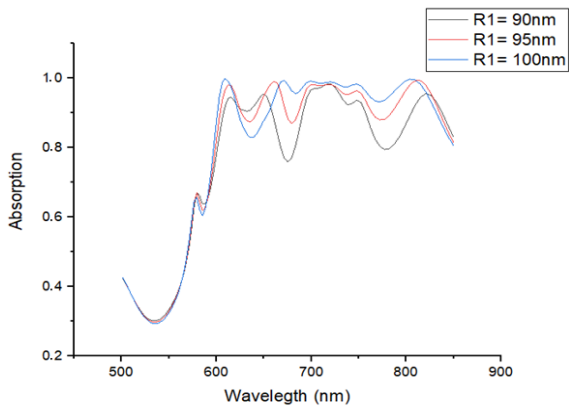
به منظور انجام شبیه‌سازی مشخصات اپتیکی تک لایه‌های دی‌سلناید تنگستن از رابطه پاشندگی زیر استخراج و به عنوان ماده جدید در نرم افزار لومریکال وارد شده است [۲۷]:

$$\epsilon_r(\omega) = 1 + \sum_{k=1}^N \frac{f_k}{\omega_k^2 - \omega^2 - i\gamma_k \omega} \quad (1)$$

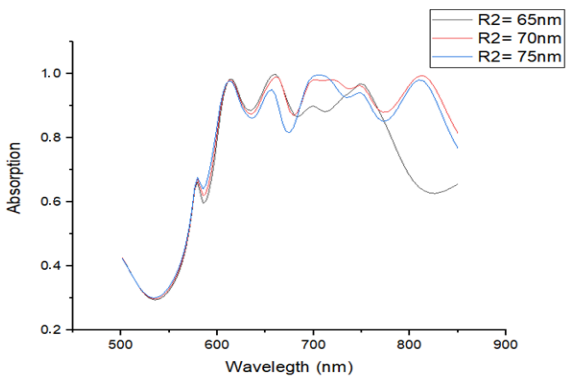
در این رابطه  $\omega_k$ ،  $f_k$  و  $\gamma_k$  به ترتیب نشان‌دهنده بسامد نوسان، قدرت نوسان و پهنای قله تشدید  $k$ -ام است. مقدار این پارامترها در مرجع [۲۷] برای تک لایه‌های دی‌سلناید تنگستن ذکر شده است. مقدار این پارامترها از برازش داده‌های تجربی موجود در مرجع [۱۲] با توابع لورنتز موجود در رابطه فوق به دست آمده‌اند. خواص اپتیکی لایه‌های از جنس طلا و دی‌اکسید سیلیسیم در ناحیه طول موجی مورد استفاده به صورت پیش فرض در نرم افزار لومریکال از قبل تعریف شده است.

## ۳. نتایج

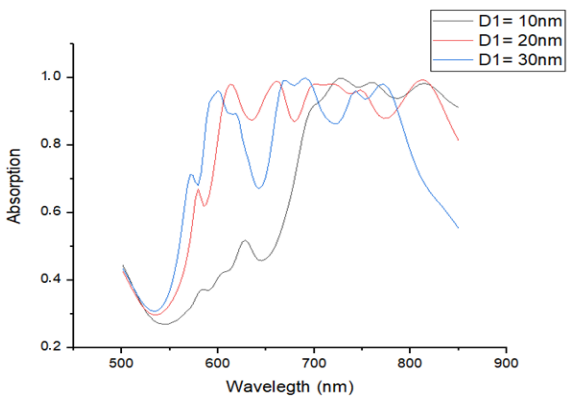
شکل ۲ نمودار طیف جذب این جاذب پیشنهادی در غیاب لایه طلائی شکاف دار بالایی را نشان می‌دهد. همان‌طور که مشاهده می‌شود در بازه طول موج ۶۰۰ تا ۸۵۰ نانومتر میزان جذب این



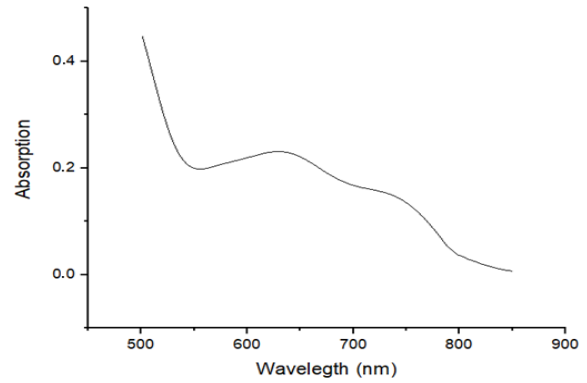
شکل ۵. طیف جذب با شعاع‌های خارجی مختلف  $R_1$  حلقه‌های دایروی. ضخامت لایه طلای شکاف دار، دی سلناید تنگستن، سیلیکون و لایه طلای پایینی به ترتیب برابر با ۲۰، ۶۹۴/۰، ۱۲۰ و ۱۰۰۰ نانومتر، طول ضلع شکاف مربعی  $L = 90\text{nm}$ ، شعاع درونی حلقه دایروی برابر با  $R_1 = 70\text{nm}$  است.



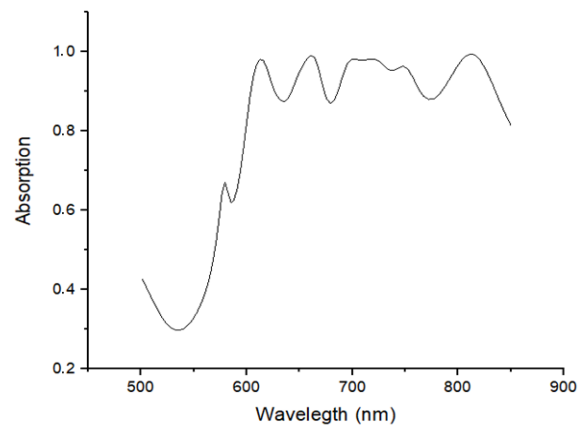
شکل ۶. طیف جذب با شعاع‌های داخلی مختلف  $R_2$  حلقه‌های دایروی. ضخامت لایه طلای شکاف دار، دی سلناید تنگستن، سیلیکون و لایه طلای پایینی به ترتیب برابر با ۲۰، ۶۹۴/۰، ۱۲۰ و ۱۰۰۰ نانومتر، طول ضلع شکاف مربعی  $L = 90\text{nm}$ ، شعاع بیرونی حلقه دایروی برابر با  $R_2 = 100\text{nm}$  است.



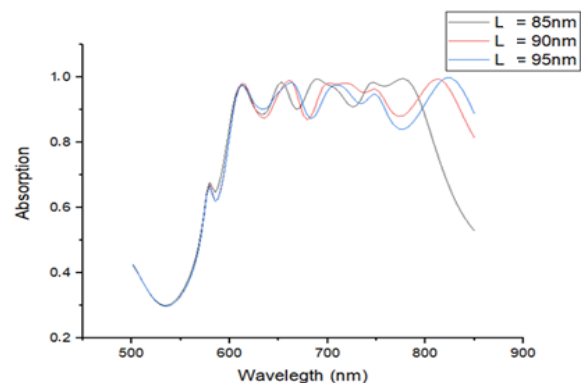
شکل ۷. نمودار طیف جذب با ضخامت‌های مختلف لایه طلای بالایی. ضخامت لایه دی سلناید تنگستن، سیلیکون و لایه طلای پایینی به ترتیب برابر با ۲۰، ۶۹۴/۰، ۱۲۰ و ۱۰۰۰ نانومتر، طول ضلع شکاف مربعی  $L = 90\text{nm}$ ، شعاع بیرونی و درونی حلقه دایروی برابر با  $R_1 = 100\text{nm}$  و  $R_2 = 70\text{nm}$  است.



شکل ۲. طیف جذب ساختار پیشنهادی در غیاب لایه طلای شکاف دار بالایی. ضخامت لایه دی سلناید تنگستن، سیلیکون و لایه طلای پایینی به ترتیب برابر با ۶۹۴/۰، ۱۲۰ و ۱۰۰۰ نانومتر است.



شکل ۳. طیف جذب ساختار پیشنهادی شکل در حضور لایه طلای شکاف دار بالایی: ضخامت لایه طلای شکاف دار، دی سلناید تنگستن، سیلیکون و لایه طلای پایینی به ترتیب برابر با ۲۰، ۶۹۴/۰، ۱۲۰ و ۱۰۰۰ نانومتر، طول ضلع شکاف مربعی  $L = 90\text{nm}$ ، شعاع بیرونی و درونی حلقه دایروی برابر با  $R_1 = 95\text{nm}$  و  $R_2 = 70\text{nm}$  است.



شکل ۴. طیف جذب با طول‌های مختلف شکاف مربعی  $L$  ضخامت لایه طلای شکاف دار، دی سلناید تنگستن، سیلیکون و لایه طلای پایینی به ترتیب برابر با ۲۰، ۶۹۴/۰، ۱۲۰ و ۱۰۰۰ نانومتر، شعاع بیرونی و درونی حلقه دایروی برابر با  $R_1 = 95\text{nm}$  و  $R_2 = 70\text{nm}$  است.

عامل هندسی بعدی که می‌تواند بر میزان جذب جاذب پیشنهادی مؤثر باشد، شعاع بیرونی شکاف‌های دایروی موجود در سطح لایه طلای بالایی در سلول پیشنهادی است. به منظور بررسی تأثیر این عامل بر میزان جذب سلول پیشنهادی، ضمن ثابت نگه داشتن سایر پارامترها مطابق شکل ۳، طیف جذب ساختارهای با شعاع بیرونی شکاف‌های حلقه‌ای برابر با مقادیر ۹۰، ۹۵ و ۱۰۰ نانومتر در شکل ۵ رسم شده است.

همان‌طور که در شکل ۵ مشاهده می‌شود، از طول موج ۵۰۰ نانومتر تا حدود طول موج ۶۰۰ نانومتر نمودارهای جذب تقریباً بر هم منطبق‌اند. در خارج از این بازه برای شعاع بیرونی ۹۰ نانومتر، دره‌های عمیق‌تری را شاهد هستیم. میانگین جذب در بازه ۶۰۰ تا ۸۵۰ نانومتر برای شعاع بیرونی ۹۰ نانومتر برابر ۸۹/۶٪، شعاع بیرونی ۹۵ نانومتر برابر ۹۳/۴٪ و شعاع بیرونی ۱۰۰ نانومتر برابر ۹۴/۳٪ به دست آمده است. بنابراین اندازل بهینه برای شعاع بیرونی حلقه‌های دایروی در ساختار سلول پیشنهادی برابر ۱۰۰ نانومتر است.

همان‌گونه که اندازه شعاع بیرونی حلقه می‌تواند بر میزان جذب سلول پیشنهادی مؤثر باشد، انتظار داریم شعاع درونی حلقه نیز بر این کمیت اثرگذار باشد. به منظور بررسی تأثیر این عامل بر میزان جذب سلول پیشنهادی، ضمن ثابت نگه داشتن سایر پارامترهای بهینه که در شکل‌های قبلی به دست آمده، طیف جذب ساختارهای با شعاع درونی شکاف‌های دایروی برابر با سه مقدار ۶۵، ۷۰ و ۷۵ نانومتر در شکل ۶ نشان داده شده است. همان‌طور که در شکل ۶ مشاهده می‌شود، در اینجا نیز از طول موج ۵۰۰ نانومتر تا حدود طول موج ۶۰۰ نانومتر نمودارهای جذب تقریباً بر هم منطبق‌اند. در خارج از این بازه برای شعاع درونی ۶۵ نانومتر، پهنای طیف جذب نسبت به سایر اندازه‌های شعاع درونی کاهش یافته است. میانگین جذب در بازه ۶۰۰ تا ۸۵۰ نانومتر برای شعاع درونی ۶۵ نانومتر برابر ۸۶/۴٪، شعاع درونی ۷۰ نانومتر برابر ۹۳/۴٪ و شعاع درونی ۷۵ نانومتر برابر ۹۱/۴٪ به دست آمده است. بنابراین اندازه بهینه برای شعاع درونی در سلول واحد جاذب پیشنهادی برابر با ۷۰ نانومتر است.

ضخامت لایه‌های به کار رفته در سلول پیشنهادی نیز می‌تواند موجب کاهش یا افزایش میزان جذب نور شود. به همین دلیل در

ادامه، تأثیر ضخامت لایه طلای بالایی سلول را بر میزان جذب آن بررسی می‌کنیم. بدین منظور ضمن ثابت نگه داشتن سایر پارامترهای بهینه، طیف جذب ساختارهای با ضخامت لایه طلای برابر با سه مقدار ۱۰، ۲۰ و ۳۰ نانومتر در شکل ۷ نمایش داده شده است. همان‌طور که در شکل ۷ مشاهده می‌شود، برای ضخامت ۱۰ نانومتر، پهنای جذب نسبت به سایر اندازه‌ها برای ضخامت فیلم طلا کاهش یافته است. همچنین برای ضخامت ۳۰ نانومتر در بازه طول موج ۶۳۰ تا ۶۵۰ نانومتر میزان جذب به زیر ۸۰٪ کاهش می‌یابد و حالت جذب پهن‌بند خود را از دست می‌دهد. میانگین جذب در بازه ۶۰۰ تا ۸۵۰ نانومتر برای ضخامت ۱۰ نانومتر برابر ۷۶/۴٪، ضخامت ۲۰ نانومتر برابر ۹۳/۴٪ و ضخامت ۳۰ نانومتر برابر ۸۵/۵٪ به دست آمده است. بنابراین اندازه بهینه برای ضخامت فیلم طلای شکاف‌دار بالایی در ساختار سلول پیشنهادی برابر با ۲۰ نانومتر است.

یکی از عوامل دیگر که می‌تواند بر میزان جذب تأثیر گذار باشد، ضخامت لایه دی‌الکتریک میانی سیلیکون یا دی‌اکسید سیلیسیم است. به منظور بررسی تأثیر این عامل بر میزان جذب سلول پیشنهادی، مجدداً ضمن ثابت نگه داشتن سایر پارامترهای بهینه، طیف جذب ساختارهای با ضخامت لایه سیلیکون برابر با سه مقدار ۱۱۰، ۱۲۰ و ۱۳۰ نانومتر را در شکل ۸ مشاهده می‌کنید. همان‌طور که در شکل ۸ مشاهده می‌شود، برای ضخامت ۱۱۰ نانومتر، در طول موج‌های پایین‌تر شاهد افزایش میزان جذب هستیم. البته در طول موج‌های بالاتر و در محدوده مورد نظر، این ساختار میانگین جذب کمتری دارد به گونه‌ای که میانگین جذب در بازه ۶۰۰ تا ۸۵۰ نانومتر برای ضخامت ۱۱۰ نانومتر برابر ۸۷٪، ضخامت ۱۲۰ نانومتر برابر ۹۳/۴٪ و ضخامت ۱۳۰ نانومتر برابر ۸۸/۴٪ به دست آمده است. بنابراین اندازه بهینه برای ضخامت لایه سیلیکون در ساختار سلول پیشنهادی برابر با ۱۲۰ نانومتر است.

آخرین عامل مؤثر بر میزان جذب که برای این ساختار بررسی می‌کنیم قطبش نور فرودی بر سطح ساختار است. به منظور بررسی تأثیر این عامل بر میزان جذب سلول پیشنهادی، ضمن ثابت نگه داشتن سایر پارامترهای بهینه، قطبش نور فرودی بر این ساختار را برای چهار زاویه  $0^\circ$ ،  $30^\circ$ ،  $60^\circ$  و  $90^\circ$  نسبت

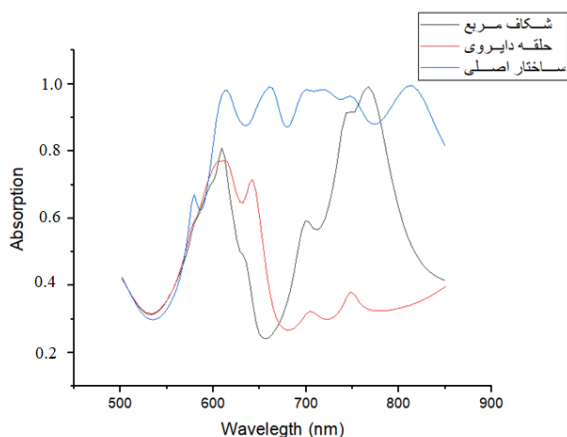
به راستای  $y$  به کمک نرم افزار لومریکال شبیه سازی کرده ایم. لازم به ذکر است نتایجی که در بخش های قبلی مورد بررسی قرار دادیم، تحت تابش نور فرودی با قطبش در راستای محور  $y$  بود. شکل ۹ نمودار طیف جذب سلول پیشنهادی را برای قطبش های ذکر شده نشان می دهد. همان طور که در شکل ۹ مشاهده می شود، برای تمامی زوایای قطبش نمودارهای میزان جذب برهم منطبق اند و هیچ گونه اختلافی نسبت به یکدیگر نشان نمی دهند. بنابراین میزان جذب در این سلول پیشنهادی هیچ وابستگی به راستای قطبش نور تابیده از چشمه ندارد. در ادامه، سازوکارهای مؤثر در طی فرایند جذب جاذب پیشنهادی را مورد بررسی قرار می دهیم. در این فرایند چند سازوکار متمایز ولی هم زمان اتفاق می افتد. اولین مورد تشدید پلاریتون پلاسمون-های سطحی (SPPR) است که به علت آرایش دوره های ساختار پدید می آید. طول موج تشدید SPPR در یک ساختار دو بعدی دوره ای از رابطه زیر پیروی می کند [۱]:

که  $p$  دوره تناوب ساختار،  $(m, n)$  شماره مد،  $\epsilon_m$  گذردهی الکتریکی فلز (طلا) و  $\epsilon_d$  ثابت گذردهی الکتریکی محیط دی الکتریک (سیلیکون) است. مطابق رابطه فوق، بسامد تشدید مدهای SPPR بیشتر متأثر از دوره تناوب ساختار و جنس مواد موجود در فصل مشترک فلز-دی الکتریک است. در این مطالعه، جنس مواد و دوره تناوب ساختار ثابت فرض شده اند. مورد دیگر تشدید پلاسمون سطحی جایگزیده (LSPR) است. این حالت معمولاً تحت تأثیر اندازه و شکل شکاف ها است. هر دو حالت تشدید SPPR و LSPR با افزایش میدان نوری در اطراف لایه  $WSe_2$  می توانند میزان جذب در این لایه را افزایش دهند. در کنار ساز و کارهای فوق باید رفتار موجبرگونه شکاف های موجود در لایه طلای بالایی و ماهیت تشدیدگری و کاواک گونه فضای بین دو لایه فلزی از جنس طلا در بالا و پایین جاذب پیشنهادی را نیز در نظر گرفت. اولی تحت تأثیر ضخامت فیلم طلای شکاف دار و ماده دی الکتریک داخل شکاف ها (هوا) است و دومی تحت تأثیر جنس و ضخامت ماده دی الکتریک (سیلیکون) بین دو لایه طلا است [۲۸ و ۲۹].

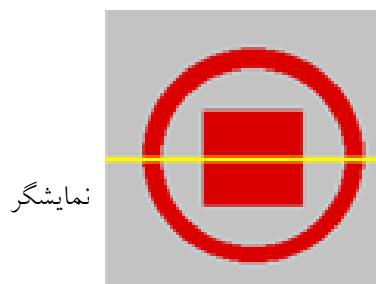
$$\lambda_{SPP}(n, m) = \frac{p}{\sqrt{n^2 + m^2}} \sqrt{\frac{\epsilon_d \epsilon_m(\lambda)}{\epsilon_d + \epsilon_m(\lambda)}} \quad (2)$$

با توجه به ثابت بودن دوره تناوب ساختار و جنس مواد مطابق رابطه (۲) در شکل های ۴ تا ۶، با تغییر پارامترهای هندسی از قبیل ابعاد شکاف ها، قله اول در طول موج های کوچک تغییر نکرده ولی قله دوم جابه جا شده است. علت کوچک بودن قله دوم در ساختار شامل حلقه دایروی به تنهایی، کوچک بودن پهنای حلقه جهت ایجاد LSPR است. بنابراین با تغییرات جزئی پهنای حلقه دایروی چندان میزان جذب در ساختار تغییر نکرده است.

از طرفی میدان ورودی از طریق حفره های موجود در لایه طلای شکاف دار بالایی که به صورت موجبر عمل می کنند به فضای بین دو لایه فلزی از جنس طلا در بالا و پایین ساختار منتقل می شوند. البته طی انتقال، بخشی از میدان ورودی صرف به تشدید در آوردن پلاسمون های سطحی جایگزیده در فصل مشترک هوا-طلای داخل موجبرها می شود. مطابق این تحلیل انتظار داریم ضخامت لایه طلای شکاف دار بالایی پارامتر مهمی جهت انتقال میدان های ورودی به داخل ساختار باشد. این پارامتر می تواند بر روی هر دو نوع قله ها در طیف جذب اثر گذارد. در شکل ۷ مقدار بهینه این پارامتر به دست آمده است.

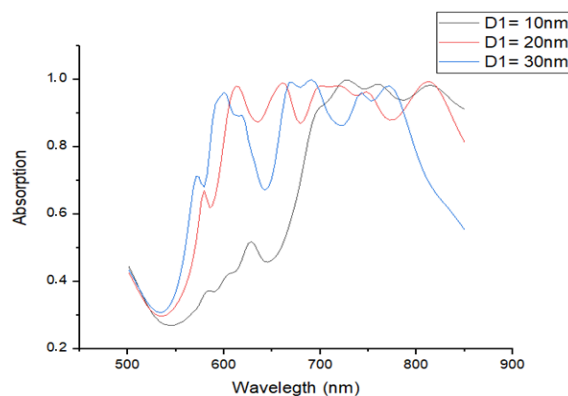


شکل ۱۰. طیف جذب در ساختارهای شامل شکاف های مربعی و حلقه های دایروی به صورت مجزا و در ترکیب با هم. ضخامت لایه طلائی شکاف دار، سیلیکون، دی سلناید تنگستن و لایه طلائی پایینی به ترتیب برابر با ۲۰، ۱۲۰، ۰/۶۹۴، و ۱۰۰۰ نانومتر، طول ضلع شکاف مربعی  $L = 90\text{ nm}$ ، شعاع بیرونی و درونی حلقه دایروی برابر با  $R_1 = 100\text{ nm}$  و  $R_2 = 70\text{ nm}$  است.

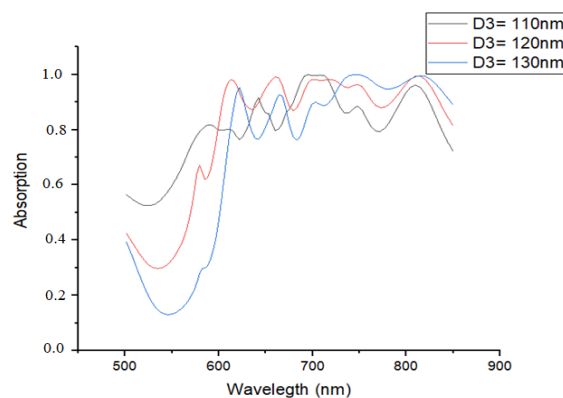


شکل ۱۱. محل قرارگیری نمایشگر استفاده شده برای بررسی توزیع میدان های مغناطیسی ساختار.

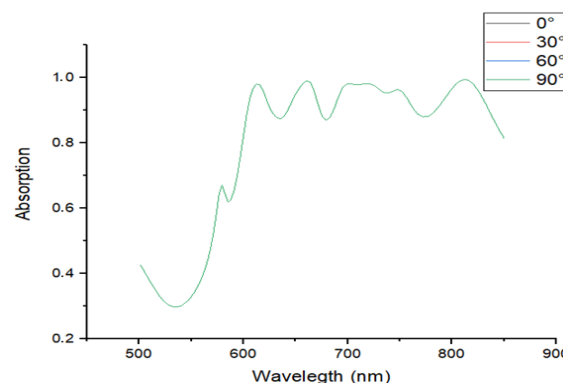
در ادامه، ضخامت و حتی ضریب شکست لایه دی الکتریک که از جنس سیلیکون و بین دو لایه طلائی بالایی و پایینی جهت گیرانداختن و به تشدید در آوردن میدان نوری در فضای کاواک-گونه بین دو لایه طلا است، نقش اساسی ایفا می کند. با تغییر طول راه اپتیکی بین دو لایه طلا می توان شرایط تشدید را فراهم کرد تا بیشترین میدان نوری در فضای بین دو لایه طلا متمرکز شود. شرایط تشدید در شکل ۸ از طریق تغییر ضخامت لایه سیلیکون به دست آمده است. این شرایط را با تغییر ضریب شکست و جنس ماده دی الکتریک نیز می توان فراهم کرد. در خارج از شرایط تشدید، امکان بازتاب و برگشت نور از طریق حفره های موجود در لایه طلائی شکاف دار بالایی به بیرون ساختار ممکن است. در نهایت با توجه به تقارن موجود در سلول واحد جاذب پیشنهادی انتظار داریم نوع قطبش میدان ورودی تأثیری در عملکرد این جاذب نداشته باشد. شکل ۹ این انتظار را تأیید می کند.



شکل ۷. نمودار طیف جذب با ضخامت های مختلف لایه طلائی بالایی. ضخامت لایه دی سلناید تنگستن، سیلیکون و لایه طلائی پایینی به ترتیب برابر با ۰/۶۹۴، ۱۲۰ و ۱۰۰۰ نانومتر، طول ضلع شکاف مربعی  $L = 90\text{ nm}$ ، شعاع بیرونی و درونی حلقه دایروی برابر با  $R_1 = 100\text{ nm}$  و  $R_2 = 70\text{ nm}$  است.

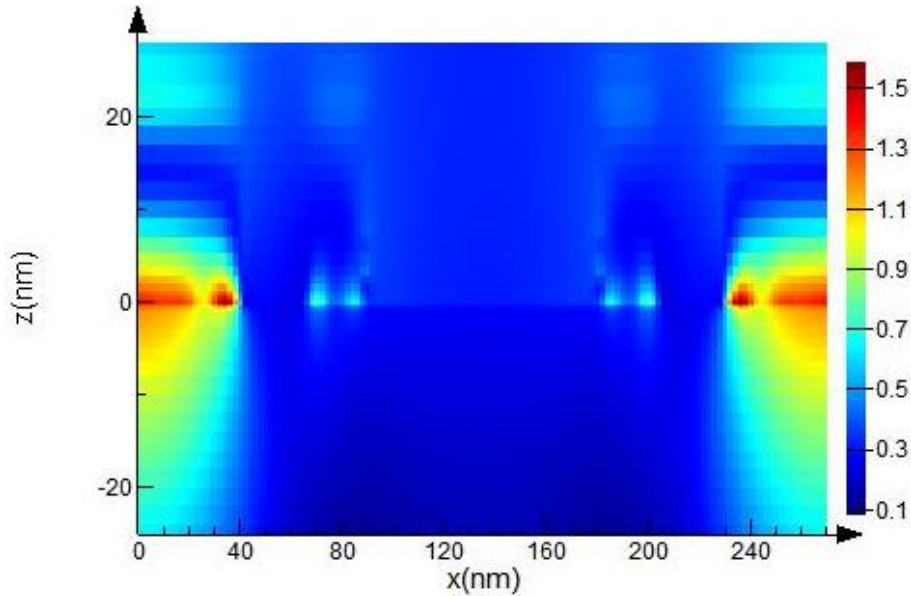


شکل ۸. نمودار طیف جذب با ضخامت های مختلف لایه  $\text{SiO}_2$  ضخامت لایه طلائی شکاف دار، دی سلناید تنگستن و لایه طلائی پایینی به ترتیب برابر با ۲۰، ۰/۶۹۴، و ۱۰۰۰ نانومتر، طول ضلع شکاف مربعی  $L = 90\text{ nm}$ ، شعاع بیرونی و درونی حلقه دایروی برابر با  $R_1 = 100\text{ nm}$  و  $R_2 = 70\text{ nm}$  است.

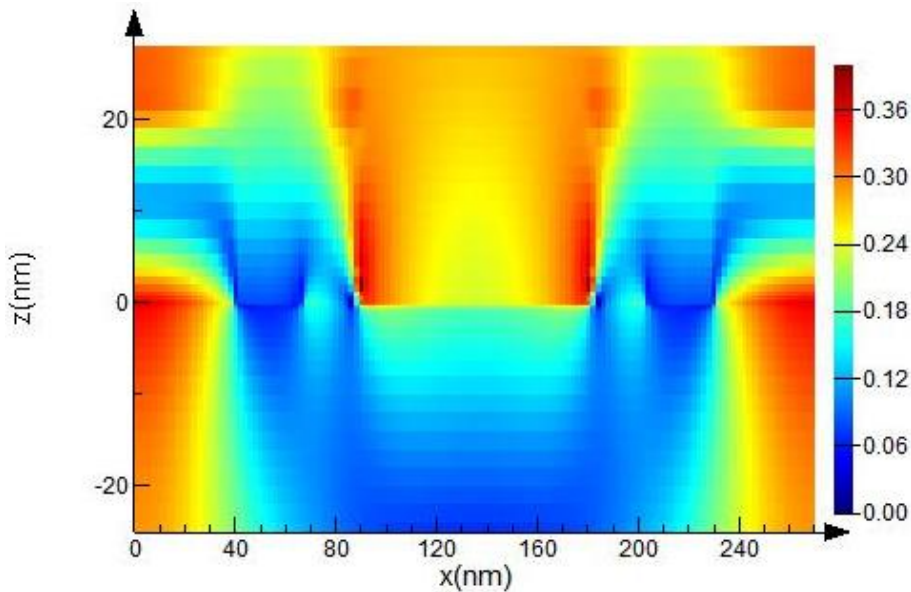


شکل ۹. نمودار طیف جذب با زوایای قطبش مختلف (هرچهار نمودار بر هم منطبق هستند). ضخامت لایه طلائی شکاف دار، سیلیکون، دی سلناید تنگستن و لایه طلائی پایینی به ترتیب برابر با ۲۰، ۱۲۰، ۰/۶۹۴، و ۱۰۰۰ نانومتر، طول ضلع شکاف مربعی  $L = 90\text{ nm}$ ، شعاع بیرونی و درونی حلقه دایروی برابر با  $R_1 = 100\text{ nm}$  و  $R_2 = 70\text{ nm}$  است.





شکل ۱۲. توزیع میدان مغناطیسی ثبت شده مربوط به ساختار بهینه در طول موج  $603$  نانو متر. ضخامت لایه طلائی شکاف دار، سیلیکون، دی سلناید تنگستن و لایه طلائی پایینی به ترتیب برابر با  $20$ ،  $120$ ،  $0/694$  و  $1000$  نانومتر، طول ضلع شکاف مربعی  $L = 90 \text{ nm}$ ، شعاع بیرونی و درونی حلقه دایروی برابر با  $R_1 = 100 \text{ nm}$  و  $R_2 = 70 \text{ nm}$  است.



شکل ۱۳. توزیع میدان مغناطیسی ثبت شده مربوط به ساختار بهینه در طول موج  $748$  نانو متر. ضخامت لایه طلائی شکاف دار، سیلیکون، دی سلناید تنگستن و لایه طلائی پایینی به ترتیب برابر با  $20$ ،  $120$ ،  $0/694$  و  $1000$  نانومتر، طول ضلع شکاف مربعی  $L = 90 \text{ nm}$ ، شعاع بیرونی و درونی حلقه دایروی برابر با  $R_1 = 100 \text{ nm}$  و  $R_2 = 70 \text{ nm}$  است.

دایروی و یک شکاف مربعی در داخل آن را نمایش می دهد. در شکل ۱۲ توزیع میدان مغناطیسی مربوط به سلول جاذب پیشنهادی در طول موج کوچک  $603$  نانو متر نشان داده شده است. در این نمودارها سطح  $z = 0$  مربوط به سطح مشترک میان لایه طلائی بالایی و تک لایه  $WSe_2$  است. همان طور که

همچنین برای بررسی سازوکارهای فیزیکی رخ داده می توانیم از توزیع میدان مغناطیسی و یا الکتریکی در ساختار پیشنهادی استفاده کنیم. به این منظور از یک نمایشگر در صفحه  $xz$  مطابق شکل ۱۱ بهره می گیریم. نمایشگر به گونه ای طراحی شده است که اندازه میدان های مغناطیسی در بخشی از سلول واحد شامل یک حلقه

ناحیه مرئی و فروقرمز نزدیک در بازه طول موجی ۶۰۰ تا ۸۵۰ نانومتر به کمک تک لایه‌های دی‌سلناید تنگستن معرفی شده است. سلول واحد جاذب پیشنهادی شامل تک لایه‌ای از دی‌سلناید تنگستن است که بر روی یک فیلم نازک سلیکونی قرار گرفته است. بر روی تک لایه  $WSe_2$  یک فیلم نازک طلا دارای شکاف‌های ترکیبی مربعی و یک حلقه دایروی قرار دارد و کل ساختار توسط یک بستر طلای مسطح پشتیبانی می‌شود. با بهینه‌سازی پارامترهای هندسی دخیل، به میانگین جذب برابر با ۹۳/۴ درصد در ناحیه طول‌موجی ذکر شده دست یافتیم. سازوکارهای فیزیکی تأثیرگذار بر افزایش میزان جذب در این ساختار، پدیده‌های تشدید پلاسمون پلاریتون‌های سطحی و تشدید پلاسمون‌های سطحی جایگزیده هستند. در واقع به کمک این پدیده‌ها می‌توان نور را در نزدیکی تک لایه  $WSe_2$  محصور کرده و شرایط جذب بیشتر نور توسط این تک لایه‌ها را فراهم کرد. از مزایای دیگر جاذب پهن‌بند پیشنهادی تقارن آن است که منجر به عدم حساسیت به نوع قطبش نور ورودی می‌شود. با توجه به جذب بالا و پهن‌بند نور و عدم حساسیت به نوع قطبش نور ورودی، این جاذب پیشنهادی را می‌توان در طراحی سلول‌های خورشیدی استفاده کرد.

در شکل ۱۲ مشاهده می‌کنید، میدان مغناطیسی بیشتر بین فیلم طلا و لایه  $SiO_2$  در نقاط با  $z < 0$  متمرکز است. تمرکز و گیر افتادن میدان مغناطیسی در نزدیکی لایه سلیکون منطبق با حالت تشدید پلاسمون پلاریتون‌های سطحی است. در شکل ۱۳ توزیع میدان مغناطیسی مربوط به سلول جاذب پیشنهادی در طول موج بلندتر ۷۴۸ نانومتر نشان داده شده است. همان‌طور که در شکل ۱۳ مشاهده می‌کنید، میدان مغناطیسی علاوه بر تمرکز در فصل مشترک لایه سلیکون و طلا، در فضای داخل شکاف‌های موجود در لایه طلای حفره‌دار بالایی نیز متمرکز شده است. در این وضعیت هم مدهای LSPR و موجبری و هم مدهای SPPR تحریک شده‌اند. همچنین بخشی از میدان در فضای بالایی ساختار بین لایه طلا و هوا گیر افتاده است و منجر به تحریک پلاسمون‌های سطحی در این فصل مشترک می‌شود. این امواج پلاسمون سطحی جایگزیده نبوده و امکان انتقال آنها از داخل حفره‌های موجود در لایه طلای بالایی به مجاورت ماده جاذب دو بعدی وجود دارد.

#### ۴. نتیجه‌گیری

در این مقاله یک جاذب پهن‌بند ساده جهت جذب نور در

#### مراجع

1. S A Maier, "Plasmonics: Fundamentals and Applications Springer", springer, New York, NY (2007).
2. E L Ru, and P Etchegoin, "Principles of Surface Enhanced Raman Spectroscopy and related plasmonic effect" 1 ed. Oxford: Elsevier Science Ltd. (2008).
3. A V Zayats, I I Smolyaninov, and A A Maradudin, *Physics Reports* **408** (2005) 131.
4. J Weiner, *Reports on Progress in Physics* **72** (2009) 64401.
5. M L Brongersma and V M Shalae, *Science* **328** (2010) 440.
6. A K Geim, and K S Novoselov, *Nature Materials* **6** (2007) 183.
7. M I Katsnelson, *Materials Today* **10** (2007) 20.
8. M Chhowalla, H S Shin, G Eda, L J Li, K P Loh, and H Zhang, *Nature Chemistry* **5** (2013) 263.
9. L M Xie, *Nanoscale* **7** (2015) 18392.
10. P Chen, et al., *Nature Communication* **9** (2018) 2003.
11. W Ju, et al. *Results in Physics* **25** (2021) 104250.
12. Y Li, et al., *Physical Review B* **90** (2014) 205422.
13. Y Yang, R Pan, S Tian, C Gu, and J Li, *Micromachines* **11** (2020) 1109.
14. W Choi, et al, *Materials Today* **20** (2017) 116.
15. C Xin, and A R McDonald. *Advanced Materials* **28** (2016) 5738.
16. N Ansari, and F Ghorbani, *JOSA B* **35** (2018) 1179.
17. X Jiang, T Wang, S Xiao, X Yan, L Cheng and Q Zhong, *Nanotechnology* **29** (2018) 335205.
18. H Lu, X Gan, D Mao, Y Fan, D Yang, J Zhao, *Optics Express* **25** (2017) 21630.

19. C Janisch, et al, *2D Mater.* **3** (2016) 025017.
20. H Li, M Qin, L Wang, X Zhai, R Ren, and J Hu, *Optics Express* **25** (2017) 31612.
21. Y Jiang, W Chen, J Wang, *Optics Express* **26** (2018) 24403.
22. X Luo, Z Liu, Z Cheng, J Liu, Q Lin, and L Wang, *Optics Express* **26** (2018) 33918.
23. J Li, Z Chen, H Yang, Z Yi, X Chen, W Yao, T Duan, P Wu, G Li, and Y Yi, *Nanomaterials* **10** (2020) 257.
24. S Butun, S Tongay, K Aydin, *Nano Lett.* **15** (2015) 2700.
25. Z Wang, et al, *Nature Communication* **7** (2016) 11283.
26. A Taflove, S C Hagness, and M Picket-May, "Computational electromagnetics: the finite-difference time-domain method", *The Electrical Engineering Handbook* **3** (2005) 629.
27. M Weismann, NC Panoiu, *Physical Review B* **94** (2016) 035435.
28. A Shabani, M Rezaee Roknabadi, M Behdani, M Khazaei Nezhad, and N Rahmani, *J. Nanophoton* **11** (2017) 036006.
29. A Shabani, M Khazaei Nezhad, N Rahmani, M Rezaee Roknabadi, M Behdani, and B Sanyal, *Plasmonics* **14** (2019) 1871.