

## بررسی تأثیر مدل گاوس در بهبود ثابت گذردهی و جذب تک‌لایه‌های TMDC در ناحیه طول موج مرئی

نرگس انصاری\*، فریناز قربانی، مریم مرادی

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

دریافت: 1395/12/06 ویرایش نهایی: 1396/04/14 پذیرش: 1396/08/01

### چکیده

لایه‌های دو بعدی کلکوژناید‌های فلزات واسطه (TMDC) با گاف‌های نواری مستقیم در بازه طول موج مرئی و مادون قرمز نزدیک، افق جدیدی در کاربری این مواد در فوتونیک و الکترواپتیک ایجاد کرده‌اند. تک‌لایه‌های  $WS_2$ ،  $MoS_2$  و  $MoSe_2$  به‌عنوان چند تک‌لایه از TMDCها دارای ویژگی‌های اپتیکی ویژه‌ای می‌باشند. در این مقاله ثابت گذردهی این تک‌لایه‌ها با استفاده از مدل لورنتس، لورنتس-گاوس و درود-لورنتس-گاوس به‌دست آمده است که تطابق بسیار خوبی با نتایج تجربی دارد. رفتار جذب این لایه‌های فوتولتائیک همانند رفتار قسمت موهمی ثابت گذردهی تک‌لایه‌ها می‌باشد. با بررسی جذب تک‌لایه‌ها در حضور چند زیرلایه مشاهده شد که استفاده از زیرلایه باعث کاهش میزان جذب می‌شود و با افزایش ضریب شکست زیرلایه میزان جذب کاهش می‌یابد. این نانولایه‌ها با جذب بالای 10 درصد در ضخامت کمتر از یک نانومتر، کاندیدای مناسبی در سلول‌های خورشیدی و کاربری‌های فوتولتائیک هستند.

**کلیدواژه‌گان:** ثابت گذردهی، جذب، کلکوژناید‌های فلزات واسطه، فوتولتائیک، مدل لورنتس، مدل درود و مدل گاوس

### مقدمه

می‌سازد [2 و 3]. پیشرفت‌های اخیر در توسعه لایه‌های اتمی نازک از مواد جامد با پیوند واندروالس، منجر به ساخت لایه‌های دوبعدی شده است [1]. اولین و برجسته‌ترین مثال از بلورهای دو بعدی گرافن می‌باشد که یک لایه از اتم‌های کربن در ساختار لانه زنبوری است. ساختار دو بعدی گرافن، خواص الکترونی و نوری منحصر به فردی را ایجاد کرده است اما عدم وجود گاف انرژی تا حد زیادی کاربرد آن در نیمه‌هادی‌ها را محدود می‌کند. تک‌لایه‌های کلکوژناید‌های فلزات واسطه<sup>2</sup> (TMDC) با فرمول شیمیایی  $MX_2$  ( $M=Mo,W; X=S,Se$ )، دارای گاف‌های نواری مستقیم در ناحیه مادون قرمز نزدیک و

نانو مواد دو بعدی به‌علت دارا بودن خواص مکانیکی، الکترونیکی و نوری ویژه که در همتایان توده‌ای<sup>1</sup> شأن وجود ندارد، توجه بسیاری را در حوزه علم و تکنولوژی نانو به‌خود جلب کرده‌اند [1]. در طبیعت مواد متعددی به‌شکل توده‌ای وجود دارند که به‌دلیل دارا بودن ساختار لایه‌ای قابلیت تبدیل شدن به مواد دو بعدی را دارند. این مواد از لایه‌هایی با پیوندهای درون صفحه‌ای قوی که با جاذبه بین لایه‌ای ضعیف واندروالس بر هم انباشته شده‌اند، تشکیل می‌شوند. این ویژگی امکان ورقه‌ورقه‌کردن با لایه برداری مکانیکی و تبدیل این مواد به لایه‌های نازک اتمی و مجزا را فراهم

\* نویسنده مسئول n.ansari@alzahra.ac.ir

<sup>1</sup> Bulk

<sup>2</sup> Transition Metal Dichalcogenides (TMDC)

باز نشر این مقاله با ذکر منبع آزاد است.

حامل‌های بارشان می‌توانند از نوع نیم‌رسانای  $n$  یا  $p$  باشند و در ساخت دیود مورد استفاده قرار گیرند [9]. به‌منظور طراحی و شبیه‌سازی دستگاه‌های اپتوالکترونیکی ساخته شده با TMDC‌های دو بعدی و توصیف برهم کنش‌های نور-ماده، دانستن ثابت گذردهی الکتریکی مختلط آنها مورد نیاز است [10] که نقطه اتصال میان نتایج تجربی و محاسبات تئوری است و میان ویژگی‌های ساختاری ماده و پاسخ‌های اپتیکی، طیف جذب و عبور و بازتاب، ارتباط برقرار می‌کند. همچنین آگاهی از تابع دی‌الکتریک برای توصیف خصوصیات این مواد و استفاده از آنها در برنامه‌های کاربردی در حال ظهور لازم است. به‌رغم نقش محوری ثابت گذردهی، هنوز یک مطالعه سیستماتیک از توابع دی‌الکتریک نوری برای این تک‌لایه‌های نانومتری TMDC گزارش نشده است [11]. لی<sup>2</sup> و همکاران در سال 2014 با استفاده از آنالیز مقید کرامز کرونیگ طیف بازتاب، تابع دی‌الکتریک این تک‌لایه‌ها را به‌دست آورده‌اند. استفاده از این روش مستلزم به‌کارگیری تعداد زیادی فرکانس تشدید در فرآیند محاسبات است که از نظر فیزیکی مطلوب نیست. همچنین مارتین<sup>3</sup> و همکاران در سال 2016 به بررسی ثابت گذردهی این تک‌لایه‌ها با استفاده از مدل لورنتس پرداخته‌اند [12]. در این مقاله به بررسی تأثیر مدل گاوس در بهبود ثابت گذردهی تک‌لایه‌های TMDC شامل  $\text{MoSe}_2$ ،  $\text{WSe}_2$ ،  $\text{MoS}_2$  و  $\text{WS}_2$  به‌عنوان چهار تک‌لایه مهم از این مواد می‌پردازیم. در مدل‌های لورنتس، لورنتس-گاوس و درود-لورنتس-گاوس در ناحیه مرئی و نزدیک مادون قرمز با استفاده از 3 یا 4 فرکانس تشدید تابع دی‌الکتریک تک‌لایه‌ها به‌دست آمده است. از میان مدل‌های گذردهی موجود، مدلی مناسب است که خواص نوری نمونه مورد نظر را در محدوده فرکانسی

مرئی هستند که افق جدیدی در کاربری این لایه‌های دو بعدی در فوتونیک و الکترونیک‌های نوری گشوده‌اند [4]. تک‌لایه‌های TMDC علاوه بر دارا بودن گاف نواری مستقیم به‌علت عدم تقارن مرکز وارونگی در ساختار بلوری‌شان باعث دسترسی به یک درجه جدید آزادی حامل‌های بار یعنی شاخص  $k$ -valley می‌شود که باعث ایجاد شاخه جدیدی در فیزیک به‌نام valleytronics شده است. همچنین جفت شدگی قوی اسپین-مدار در این تک‌لایه‌ها، منجر به شکافتگی ارییتال-اسپین شده و با تنظیم انرژی تحریک فوتون لیزر، اسپین الکترون را کنترل می‌کند [5 و 6]. تمامی این ویژگی‌ها باعث تفاوت کاربری این مواد نسبت به گرافن می‌شود؛ به‌گونه‌ای که نانو مواد TMDC مانند دی‌سولفید تنگستن  $\text{WS}_2$ ، دی‌سلنید تنگستن  $\text{WSe}_2$ ، دی‌سولفید مولیبدن  $\text{MoS}_2$  و دی‌سلنید مولیبدن  $\text{MoSe}_2$  به‌عنوان یک نسل نانو مواد فوتونی جدید در حال ظهور هستند که منجر به تولید دستگاه‌هایی نظیر سوئیچ کننده، محدود کننده نوری، تابشگر، آشکارساز، دیود و ترانزیستور با کارایی بالا شده‌اند [4 و 7].

جذب نور در تک‌لایه‌های TMDC با ضخامت کمتر از 1 نانومتر در ناحیه طیفی مرئی و مادون قرمز نزدیک، از طریق انتقال مستقیم بین نوار ظرفیت و نوارهای رسانش است. به‌دلیل برهم‌کنش قوی نور-ماده و گاف نواری مطلوب 1 تا 2 الکترون‌ولت، جذب نوری این مواد در حدود 5 تا 10 درصد گزارش شده که نسبت به  $\text{Si}$  و  $\text{GaAs}$  جذب بیشتری را نشان داده است [8]. با توجه به متفاوت بودن قله‌های جذب این تک‌لایه‌ها، می‌توان از ساختارهای ناهمگون<sup>1</sup> برای افزایش جذب استفاده کرد که سبب توسعه دستگاه‌های فتولتائیک می‌شود [9]. همچنین این ساختارها، برحسب نوع

<sup>3</sup> Martin Weismannl

<sup>1</sup> Hetrostructure

<sup>2</sup> Yilei Li

مناسب برای تعیین ثابت گذردهی تک‌لایه‌ها تعیین می‌شود.

تک‌لایه‌های TMDC مورد بررسی شامل  $\text{MoSe}_2$ ،  $\text{WSe}_2$ ،  $\text{MoS}_2$  و  $\text{WS}_2$ ، دارای گاف نواری مستقیم در بازه نور مرئی بوده و نیم‌رسانا محسوب می‌شوند. مدل پیشنهادی ما برای تعیین ثابت گذردهی این نانو مواد دو بعدی، استفاده از مدل‌های درود، لورنتس و گاوس و یا ترکیب آنها است. در ادامه رابطه و پارامترهای مؤثر در هر مدل، به صورت جداگانه آورده شده است. ثابت گذردهی در مدل درود و مدل لورنتس به ترتیب به صورت

$$\varepsilon^D(\omega) = -\frac{a_j}{\omega^2 - i\omega b_j} \quad 1$$

$$\varepsilon^L(\omega) = \varepsilon_\infty + \sum_{j=1}^N \frac{a_j}{\omega_j^2 - \omega^2 - i\omega b_j} \quad 2$$

تعریف می‌شود که  $\omega$  فرکانس نور فرودی،  $\varepsilon_\infty$  گذردهی مستقیم،  $\omega_j$  فرکانس تشدید،  $a_j$  قدرت نوسان و  $b_j$  فاکتور میرایی نوسانگر  $j$ ام می‌باشد. علت وجود علامت جمع در مدل لورنتس، وابستگی‌های متفاوت الکترون‌های مقید به هسته می‌باشد [10]. در مدل گاوس ثابت گذردهی به صورت مجموع گذردهی قسمت حقیقی و قسمت موهومی،  $\varepsilon^G = \varepsilon_r^G + i\varepsilon_i^G$ ، تعریف می‌شود و قسمت موهومی آن با رابطه

$$\varepsilon_i^G(\omega) = \alpha \exp\left(-\frac{(\hbar\omega - \mu)^2}{2\sigma^2}\right) \quad 3$$

داده می‌شود که یک تابع توزیع گاوس با میانگین  $\mu$  واریانس  $\sigma$  و بیشینه مقدار  $\alpha$  است. قسمت حقیقی مدل گاوس با استفاده از رابطه کرامرز-کرونیگ به صورت

$$\varepsilon_r^G(\omega) = -\frac{1}{\pi} PV \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\varepsilon_i^G(\omega')}{\omega' - \omega} d\omega' \quad 4$$

مورد بررسی توجیه کند. انتخاب بهترین مدل بر اساس بیشترین تطابق با داده‌های تجربی مرجع [11] است. در ادامه تأثیر زیرلایه بر ویژگی‌های اپتیکی این تک‌لایه‌ها و میزان جذب آن نیز بررسی شده است.

## تئوری

تعیین مشخصه‌های اپتیکی، طیف عبور، جذب و بازتاب تک‌لایه‌های TMDC نیازمند ارائه مدل برای ثابت گذردهی این نانو مواد دوبعدی جدید است. ارتباط بین جزئیات میکروسکوپی در ساختار نواری یک ماده با مشاهدات ماکروسکوپی تجربی را می‌توان توسط یک تابع پاسخ مشخص نمود. در مورد تعاملات فوتون‌ها و الکترون‌ها به طور رایج این تابع پاسخ، ثابت گذردهی مختلط وابسته به فرکانس و بردار موج می‌باشد که از خواص اساسی ماده در بررسی ضریب شکست، جذب، رسانایی، ظرفیت و غیره محسوب می‌شود. به دلیل وابستگی این برهم‌کنش‌ها به نوع ماده، مدل‌های مختلفی برای ثابت گذردهی مواد رسانا، دی‌الکتریک و نیم‌رسانا وجود دارند که از مرسوم‌ترین آنها مدل درود، لورنتس، درود-لورنتس، درود-لورنتس-گاوس و کرامرز-کرونیگ می‌باشد. مدل درود برای محیط‌هایی با بار آزاد (مواد رسانا) و مدل لورنتس برای محیط‌هایی با الکترون‌های مقید به هسته (مواد دی‌الکتریک) ارائه می‌شود. خواص اپتیکی مواد نیم‌رسانا حاصل از سهم‌های قابل ملاحظه‌ای از بارهای آزاد و مقید است به همین علت برای این دسته از مواد اغلب از مدل درود-لورنتس استفاده می‌شود. مدل کمکی پوش‌دهنده گاوس که برای تطابق بیشتر داده‌ها با نتایج تجربی مورد استفاده قرار می‌گیرد را می‌توان با هریک از مدل‌های فوق جمع نمود. از سوی دیگر با استفاده از تحلیل کرامرز-کرونیگ با داشتن قسمت حقیقی گذردهی، می‌توان قسمت موهومی آن را به دست آورد. با توجه به ویژگی‌های رسانایی و دی‌الکتریکی هر ماده، مدل

انتقال<sup>2</sup>، TMM، به دست آمده است [14]. لایه‌ها به صورت موازی در راستای محور Z قرار دارند. در لایه

زام ( $j=1,2,3$ ) میدان الکتریکی با رابطه

$$E_n(z,x) = (a_j e^{iN_j k_{jz}} + b_j e^{-iN_j k_{jz}}) \hat{e}_y \quad 5$$

داده می‌شود.  $\hat{e}_y$  بردار واحد در جهت Y و  $k_{jz}$  مؤلفه Z بردار موج در محیط زام است که به علت تابش عمود نور، بردار موج تنها دارای مؤلفه Z، مختلط هر محیط می‌باشد. مرز اول یعنی مرز بین هوا و تک لایه TMDC در  $z=0$  فرض می‌شود. با اعمال شرایط مرزی و پیوستگی مؤلفه مماسی میدان الکتریکی و مغناطیسی، ضرایب میدان در لایه 1 و 3 از طریق ماتریس انتقال M به صورت زیر

$$\begin{bmatrix} a_1 \\ b_1 \end{bmatrix} = M \begin{bmatrix} a_3 \\ b_3 \end{bmatrix} \quad 6$$

به یکدیگر مرتبط می‌شوند [15]. ماتریس M در ساختار سه لایه‌ای طبق رابطه

$$M = D_{1 \rightarrow 2} P(d) D_{2 \rightarrow 3} \\ = \begin{bmatrix} 1 + \frac{k_{2z}}{k_{1z}} & 1 - \frac{k_{2z}}{k_{1z}} \\ 1 - \frac{k_{2z}}{k_{1z}} & 1 + \frac{k_{2z}}{k_{1z}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e^{-ik_{2z}d} & 0 \\ 0 & e^{ik_{2z}d} \end{bmatrix} \times \\ \begin{bmatrix} 1 + \frac{k_{3z}}{k_{2z}} & 1 - \frac{k_{3z}}{k_{2z}} \\ 1 - \frac{k_{3z}}{k_{2z}} & 1 + \frac{k_{3z}}{k_{2z}} \end{bmatrix} \quad 7$$

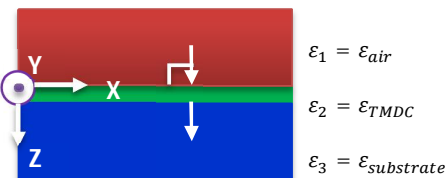
به دست می‌آید که در آن ماتریس عبور نور از مرز محیط 1 به 2 یعنی از هوا به ساختار دو بعدی،  $P(d)$  ماتریس انتشار موج در تک لایه TMDC،  $D_{2 \rightarrow 3}$  ماتریس عبور نور از مرز محیط 2 به 3 یعنی از ساختار دو بعدی TMDC به زیرلایه و ضخامت تک لایه‌های  $WS_2$ ،  $MoSe_2$ ،  $WSe_2$ ،  $MoS_2$  می‌باشد. ضخامت تک لایه‌های  $WS_2$ ،  $MoSe_2$ ،  $WSe_2$ ،  $MoS_2$  به ترتیب برابر 0,646، 0,615، 0,649 و 0,618 نانومتر

محاسبه می‌شود که PV بیانگر انتگرال مقدار اصلی کوشی<sup>1</sup> می‌باشد [13].

مدل ترکیبی درود-لورنتس به صورت  $\epsilon^{DL} = \epsilon^D + \epsilon^L$  و مدل ترکیبی درود-لورنتس-گأوس به صورت  $\epsilon^{DLG} = \epsilon^{DL} + \epsilon^G$  تعریف می‌شود. ثابت گذردهی به دست آمده از هر یک از مدل‌ها را می‌توان به صورت  $\epsilon = \epsilon_{real} + i \epsilon_{img}$  نمایش داد که  $\epsilon_{real}$  و  $\epsilon_{img}$  به ترتیب قسمت حقیقی و موهومی ثابت گذردهی می‌باشد.

ضریب شکست مختلط مواد با استفاده از رابطه  $N(\lambda) = n + ik = \sqrt{\epsilon_{TMDC}}$  به دست می‌آید که  $n$  و  $k$  به ترتیب ضریب شکست و ضریب خاموشی ماده نامیده می‌شود.

با دانستن ثابت گذردهی نانومواد TMDC، می‌توان عبور، بازتاب و جذب را برای ساختار مورد نظر به دست آورد. ساختار مورد بررسی در این مقاله شامل دو محیط دی‌الکتریک نیمه بی‌نهایت هوا و زیرلایه به ترتیب با ضریب شکست  $n_0$  و  $n_s$  می‌باشد که یکی از تک لایه‌های TMDC شامل  $MoSe_2$ ،  $WSe_2$ ،  $MoS_2$  و  $WS_2$  در مرز بین محیط هوا و زیرلایه قرار دارد و نور فرودی به صورت عمود از سمت هوا به ساختار تابانده می‌شود. در شکل 1 این ساختار نشان داده شده است.



شکل 1. ساختار شامل دو دی‌الکتریک بی‌نهایت با گذردهی  $\epsilon_1$  و  $\epsilon_3$  می‌باشد که تک لایه TMDC با گذردهی  $\epsilon_{TMDC}$  بین این دو لایه قرار دارد. نور فرودی به صورت عمودی همواره از سوی هوا به ساختار تابانده می‌شود.

در این پژوهش ویژگی‌های اپتیکی ساختار سه لایه‌ای نشان داده شده در شکل 1، با استفاده از روش ماتریس

<sup>2</sup> Transfer Matrix Method (TMM)

<sup>1</sup> Cauchy Principle Value

استفاده شد و مدلی انتخاب شد که بیشتر با داده‌های تجربی جذب مرجع [11] تطابق داشت. در نهایت مدل لورنتس برای تک‌لایه‌های  $WSe_2$  و  $WS_2$ ، مدل ترکیبی لورنتس-گائوس برای تک‌لایه  $MoSe_2$  و مدل ترکیبی لورنتس-درود-گائوس برای تک‌لایه  $MoS_2$  به‌عنوان مدل‌های مناسب توجیه‌کننده خواص نوری پیشنهاد شده است. ضرایب  $a_j$  و  $b_j$  و  $\omega_j$  مربوط به مدل لورنتس برای هر چهار تک‌لایه به‌صورت خلاصه در جدول 1 آمده است. وقتی  $\omega_j=0$  باشد مدل لورنتس به مدل درود تبدیل می‌شود که فقط برای تک‌لایه  $MoS_2$  این جمله وجود دارد. ضرایب  $\alpha$ ،  $\mu$  و  $\sigma$  مربوط به مدل گائوس در جدول 2 آمده است.

می‌باشد [11]. با استفاده از ماتریس  $M$  ضرایب فرنل به‌صورت

$$r = \frac{M_{21}}{M_{11}}, \quad t = \frac{1}{M_{11}} \quad 8$$

و بازتاب و عبور و جذب به‌صورت زیر به‌دست می‌آیند [15].

$$R = |r|^2, \quad T = \frac{n_2}{n_1} |t|^2, \quad 9$$

$$A = 1 - R - T$$

### نتایج

برای یافتن مدل مناسب ثابت گذردهی برای هر یک از تک‌لایه‌های دوبعدی، ابتدا هر سه مدل لورنتس، لورنتس-درود و مدل لورنتس-درود-گائوس برای هر یک از تک‌لایه‌های  $MoSe_2$ ،  $WSe_2$ ،  $MoS_2$  و  $WS_2$

جدول 1. ضرایب  $a_j$  و  $b_j$  و  $\omega_j$  مربوط به مدل لورنتس برای هر چهار تک‌لایه  $MoSe_2$ ،  $WSe_2$ ،  $MoS_2$  و  $WS_2$ .

$\epsilon_\infty$	$MoSe_2$			$WSe_2$			$MoS_2$			$WS_2$		
	$\omega_j$ (eV)	$a_j$ (eV <sup>2</sup> )	$b_j$ (eV)	$\omega_j$ (eV)	$a_j$ (eV <sup>2</sup> )	$b_j$ (eV)	$\omega_j$ (eV)	$a_j$ (eV <sup>2</sup> )	$b_j$ (eV)	$\omega_j$ (eV)	$a_j$ (eV <sup>2</sup> )	$b_j$ (eV)
	12,9			9,5			4,4			7,4		
1	1,5	0,98	0,06	1,6	0,6	0,04	0	0,14	0,01	2,0	1,8	0,02
2	1,7	1,5	0,1	2,0	1,8	0,2	1,8	0,04	0,05	2,4	3,3	0,2
3	2,6	12,2	0,4	2,4	9,6	0,3	2,0	0,057	0,11	2,8	8,4	0,2
4	3,1	0,6	2,07	2,8	23,0	0,4	2,7	0,058	0,11	3,1	41,6	0,6
5	----	----	----	----	----	----	2,9	0,23	0,28	----	----	----
6	----	----	----	----	----	----	4,3	3,12	0,78	----	----	----

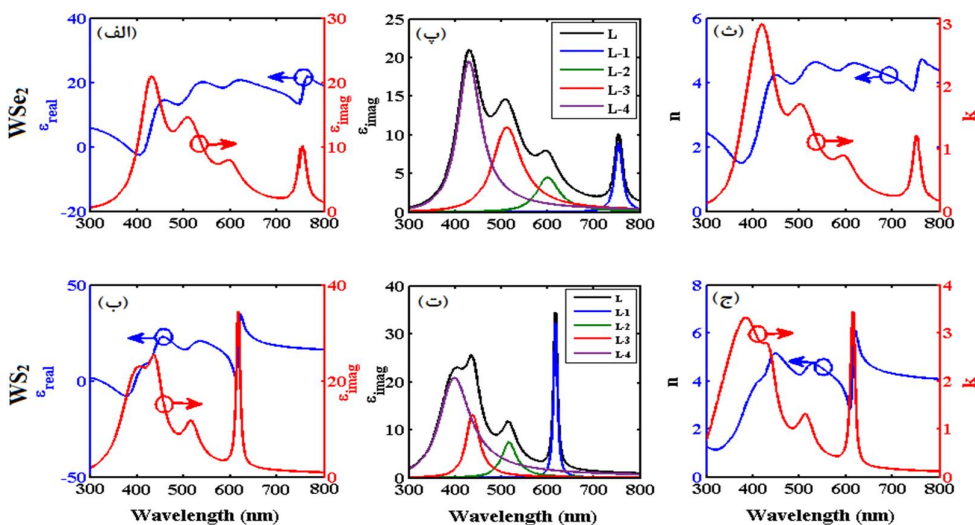
جدول 2. ضرایب مربوط به مدل گاوس.

	MoSe <sub>2</sub>	MoS <sub>2</sub>
$\alpha$	17/6	23/2
$\mu$	2/6	2/7
$\sigma$	0/5	0/3

ضرایب بهبود یافته با مدل لورنتس رسم گردید تا نیازی به پوش اضافی گاوس نباشد.

به علت مشابهت رفتار طیف جذب به رفتار قسمت موهومی ثابت گذردهی و ایجاد قله‌های جذب به ازای فرکانس‌های تشدید،  $\omega_j$ ، تأثیر هر یک از جملات لورنتس در قسمت موهومی گذردهی به صورت جداگانه مورد بررسی قرار گرفت. اثر هر یک از جملات نوسانی مدل لورنتس، در بخش موهومی گذردهی در شکل 2پ و 2ت با رنگ‌های آبی، سبز، قرمز و بنفش و مجموع این جملات با رنگ مشکی و با مشخصه L نشان داده شده است. در هر یک از جملات قسمت موهومی گذردهی تک‌لایه‌ها، به ازای هر  $\omega_j$  یک قله تشدید در آن فرکانس مشاهده می‌شود. از سوی دیگر برای یافتن ویژگی‌های اپتیکی در روش TMM و با توجه به معادلات (7-9)، نیاز است که وابستگی ضریب شکست مختلط به طول موج دیده شود. وابستگی ضرایب شکست و خاموشی به طول موج برای این دو تک‌لایه در شکل 2ث و 2ج نشان داده شده است.

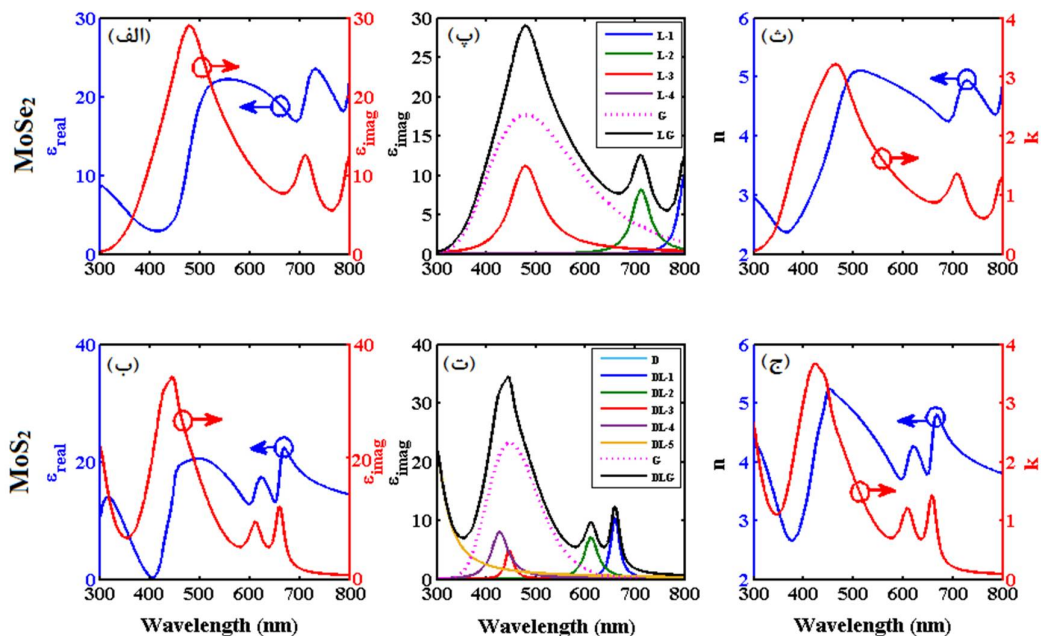
در شکل 2الف و 2ب، قسمت حقیقی و موهومی ثابت گذردهی تک‌لایه‌های WSe<sub>2</sub> و WS<sub>2</sub> با استفاده از روش لورنتس رسم شده است. در مدل لورنتس، رابطه 2ج ها با استفاده از قله‌های تشدید طیف جذب تک‌لایه‌ها، از داده‌های تجربی مرجع [11] به دست آمده‌اند که اعداد ثابتی هستند. برای یافتن بهترین ضرایب برای  $a_j$  و  $b_j$ ، با کمک نرم افزار متلب، در ابتدا با استفاده از مدل لورنتس ضرایبی به دست آمد. سپس با استفاده از مدل ترکیبی لورنتس-گاوس، ضرایب روش لورنتس بهبود یافتند. با جای گذاری ضرایب مدل ترکیبی در مدل لورنتس، شکل مدل لورنتس بهبود یافت و تطابق خوبی با نتایج تجربی به دست آمد. در نهایت قسمت حقیقی و موهومی ثابت گذردهی با استفاده از



شکل 2. قسمت موهومی و حقیقی ثابت گذردهی تک‌لایه‌های WSe<sub>2</sub> و WS<sub>2</sub> (الف-ب)، بخش‌های موهومی ثابت گذردهی مربوط به مدل لورنتس برای  $j=1,2,3,4$  (پ-ت) و قسمت موهومی و حقیقی ضریب شکست تک‌لایه‌های WSe<sub>2</sub> و WS<sub>2</sub> (ث-ج) برحسب طول موج.

به ترتیب با استفاده از مدل ترکیبی لورنتس-درود-گأوس و لورنتس-گأوس رسم شده است. تأثیر هر یک از جملات نوسانی مدل درود-لورنتس-گأوس و لورنتس-گأوس، در بخش موهومی گذردهی تک‌لایه‌های  $\text{MoSe}_2$  و  $\text{MoS}_2$  در شکل 3پ و 3ت با رنگ‌های آبی، سبز، قرمز و بنفش برای تک‌لایه  $\text{MoS}_2$  و رنگ‌های آبی، سبز، قرمز، بنفش، فیروزه‌ای و نارنجی برای تک‌لایه  $\text{MoSe}_2$  و پوش گأوس با رنگ خط چین صورتی برای هر دو تک‌لایه  $\text{MoSe}_2$  و  $\text{MoS}_2$  نشان داده شده است. مجموع این جملات با رنگ مشکی و با اندیس LG برای تک‌لایه  $\text{MoSe}_2$  و DLG برای تک‌لایه  $\text{MoS}_2$  نشان شکست و خاموشی برحسب طول موج این دو تک‌لایه در شکل 3ث و 3ج نشان داده شده است.

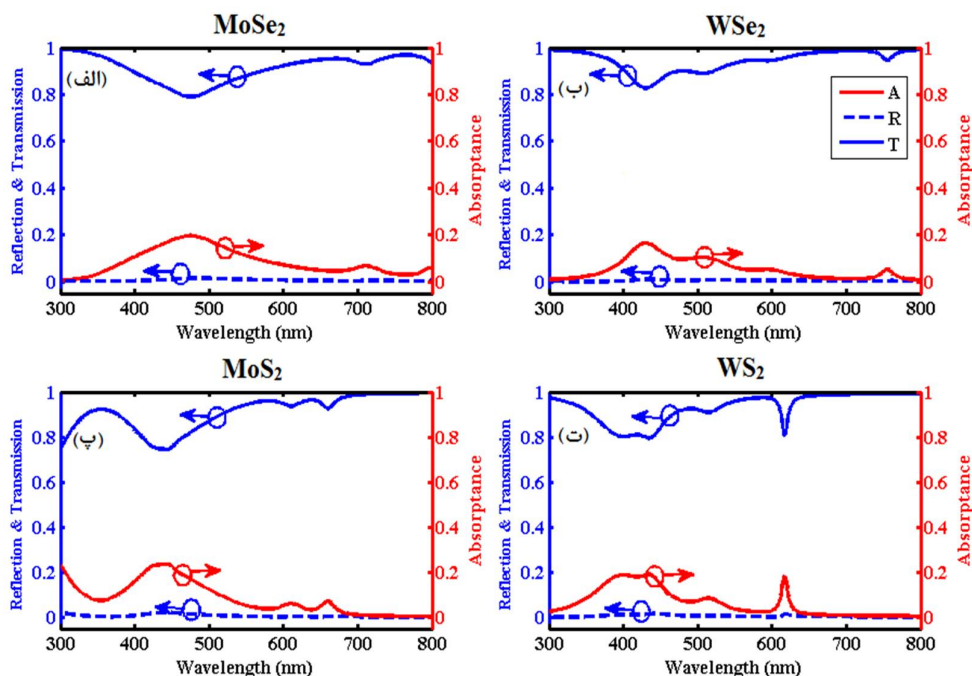
با دقت در شکل 2 مشاهده می‌شود که قسمت موهومی گذردهی  $\text{WSe}_2$  دارای 4 قله در طول‌موج‌های 430، 508، 598 و 753 نانومتر و قسمت موهومی گذردهی  $\text{WS}_2$  دارای 3 قله در طول‌موج‌های 435، 514 و 616 نانومتر می‌باشد که طول‌موج‌ها با طول موج‌های تشدید مدل لورنتس مطابقت دارند. برای تک‌لایه‌های  $\text{MoSe}_2$  و  $\text{MoS}_2$  نیز در ابتدا از مدل لورنتس استفاده شد اما مشاهده شد که با جمع کردن پوش گأوس با جملات مدل لورنتس، قسمت موهومی گذردهی با نتایج تجربی تطابق بهتری پیدا می‌کند. به همین دلیل در این دو تک‌لایه، به جای بهبود ضرایب لورنتس با مدل ترکیبی همانند تک‌لایه‌های  $\text{WSe}_2$  و  $\text{WS}_2$ ، از مدل ترکیبی لورنتس-گأوس استفاده شد. به‌طور مشابه در شکل 3الف و 3ب، قسمت حقیقی و موهومی ثابت گذردهی تک‌لایه‌های  $\text{MoSe}_2$  و  $\text{MoS}_2$



شکل 3. قسمت موهومی و حقیقی ثابت گذردهی تک‌لایه‌های  $\text{MoSe}_2$  و  $\text{MoS}_2$  (الف-ب)، بخش‌های موهومی ثابت گذردهی مربوط به مدل ترکیبی لورنتس-گأوس برای قسمت موهومی  $\text{MoSe}_2$  (پ) و مدل ترکیبی لورنتس-درود-گأوس برای  $\text{MoS}_2$  (ت) و ضریب شکست تک‌لایه‌های  $\text{MoSe}_2$  و  $\text{MoS}_2$  (ث-ج)، برحسب طول موج.

گرفته است اما روش‌های فوق در تعیین ثابت گذردهی تک‌لایه‌های جدید  $\text{MoSe}_2$ ،  $\text{WSe}_2$  و  $\text{WS}_2$  برای اولین بار در این پژوهش مطالعه شده است. با دانستن ضریب شکست تک‌لایه‌های TMDC، در ادامه به بررسی ویژگی‌های اپتیکی آنها می‌پردازیم. طیف عبور، بازتاب و جذب تک‌لایه‌های معلق (زیر لایه هوا)  $\text{MoSe}_2$ ،  $\text{WSe}_2$ ،  $\text{MoS}_2$  و  $\text{WS}_2$ ، در شکل 4 با استفاده از روابط 8 و 9 رسم شده است.

قسمت موهومی گذردهی  $\text{MoSe}_2$  دارای 2 قله در طول موج‌های 479 و 711 نانومتر و قسمت موهومی گذردهی  $\text{MoS}_2$  دارای 3 قله در طول موج‌های 445، 610 و 659 نانومتر می‌باشد که این طول موج‌ها با طول موج‌های تشدید مدل ترکیبی لورنتس-گاوس و درود-لورنتس-گاوس مطابق است ثابت گذردهی تک‌لایه  $\text{MoS}_2$  در سال 2014 توسط موخرجی<sup>3</sup> و همکاران [10] با روش درود-لورنتس-گاوس مورد بررسی قرار



شکل 4. طیف عبور، بازتاب و جذب تک‌لایه‌های  $\text{MoSe}_2$ ،  $\text{WSe}_2$ ،  $\text{MoS}_2$  و  $\text{WS}_2$  برحسب طول موج.

$\text{WS}_2$  نسبت به هوا، منجر به اثرپذیری رفتار جذب ساختار از  $\epsilon_{\text{img}}$  می‌شود.

بیشینه مقدار جذب تک‌لایه‌های  $\text{MoSe}_2$ ،  $\text{WSe}_2$ ،  $\text{MoS}_2$  و  $\text{WS}_2$  به ترتیب در طول موج 445، 430، 474 و 435 نانومتر برابر 0,190 و 0,235، 0,164 و 0,196 است. همچنین تک‌لایه‌های  $\text{MoSe}_2$ ،  $\text{WSe}_2$  و  $\text{MoS}_2$  به ترتیب در بازه 398 تا 561 نانومتر، 403 تا

در شکل 4 مشاهده می‌شود میزان بازتاب در کل بازه طول موج مرئی برای چهار تک‌لایه TMDC را می‌توان تقریباً صفر در نظر گرفت در نتیجه رفتار طیف جذب و عبور عکس یکدیگر شده و با افزایش جذب، عبور کاهش می‌یابد. بزرگ بودن قسمت موهومی ثابت گذردهی تک‌لایه‌های  $\text{MoSe}_2$ ،  $\text{WSe}_2$ ،  $\text{MoS}_2$  و

<sup>3</sup> Mukherjee



جذب قابل توجه است. طول موج‌های تشدید تک‌لایه‌های معلق  $\text{MoSe}_2$ ،  $\text{WSe}_2$ ،  $\text{MoS}_2$  و  $\text{WS}_2$  و میزان جذب در این طول موج‌ها به‌طور خلاصه در جدول 3 آمده است.

516 نانومتر و 378 تا 512 نانومتر تک‌لایه  $\text{WS}_2$  در دو بازه 359 تا 462 نانومتر و 612 تا 621 نانومتر، دارای کمینه جذب 10 درصد می‌باشند که با توجه به ضخامت کمتر از یک نانومتر این تک‌لایه‌ها این میزان

جدول 3. طول موج‌های تشدید تک‌لایه‌های معلق  $\text{MoSe}_2$ ،  $\text{WSe}_2$ ،  $\text{MoS}_2$  و  $\text{WS}_2$  و میزان جذب در این طول موج‌ها برحسب نانومتر.

	$\lambda_{res1} (nm)$	$A_{\lambda_{res1}}$	$\lambda_{res2} (nm)$	$A_{\lambda_{res2}}$	$\lambda_{res3} (nm)$	$A_{\lambda_{res3}}$	$\lambda_{res4} (nm)$	$A_{\lambda_{res4}}$
$\text{MoSe}_2$	474	0,196	711	0,064	-	-	-	-
$\text{MoS}_2$	445	0,235	610	0,060	659	0,070	-	-
$\text{WSe}_2$	430	0,164	508	0,104	598	0,051	753	0,05
$\text{WS}_2$	435	0,190	514	0,084	616	0,178	-	-

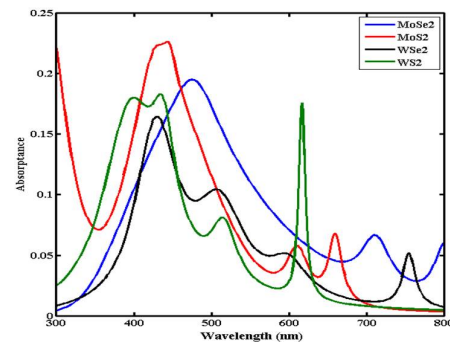
مشاهده طیف جذب این تک‌لایه‌ها در کنارهم، می‌تواند برای انتخاب این مواد برای این‌گونه کاربردها سودمند باشد. در شکل 5 طیف جذب هر چهار تک‌لایه  $\text{MoSe}_2$ ،  $\text{WSe}_2$ ،  $\text{MoS}_2$  و  $\text{WS}_2$  برحسب طول موج نشان داده شده است.

با توجه به متفاوت بودن قله‌های جذب این تک‌لایه‌ها، برای افزایش جذب در لایه‌های فوتوولتائیک، می‌توان از این چهار تک‌لایه در ساختارهای ناهمگون، استفاده کرد. همچنین این ساختارها، برحسب نوع حامل‌های بارشان می‌توانند از نوع نیم‌رسانای n یا p باشند و در ساخت دیود مورد استفاده قرار گیرند [9].

از آنجایی‌که ساخت تک‌لایه‌های  $\text{MoSe}_2$ ،  $\text{WSe}_2$ ،  $\text{MoS}_2$  و  $\text{WS}_2$  به‌صورت معلق امکان‌پذیر نیست، ویژگی‌های اپتیکی باید در حضور زیرلایه بررسی شود. بدین منظور زیرلایه‌های  $\text{Si}$ ،  $\text{fused Silica}$  و  $\text{SiO}_2$  که بیشتر در کارهای تجربی مورد استفاده قرار می‌گیرند انتخاب شده‌اند. ضریب شکست  $\text{fused Silica}$  برابر با  $n_{\text{fused Silica}}=1,46$  [11]، ضریب شکست  $\text{Si}$  از مطالعات قبل [16] گرفته شده است و ضریب شکست  $\text{SiO}_2$  از رابطه

$$n_{\text{SiO}_2} = \sqrt{1,28 + \frac{1,07\lambda^2}{(\lambda \times 10^{-3})^2 - 1,005 \times 10^{-2}} + \frac{1,102\lambda^2}{(\lambda \times 10^{-3})^2 - 100}}$$

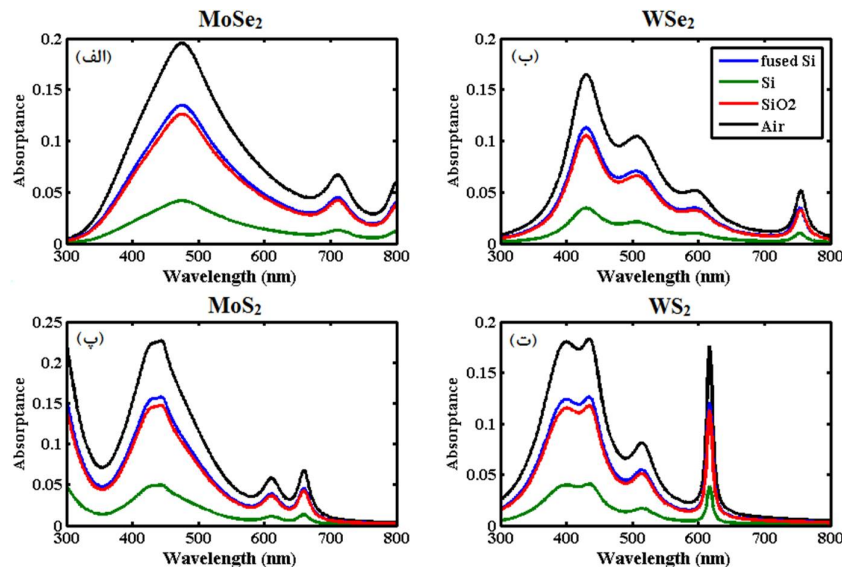
به‌دست می‌آید که در آن طول‌موج برحسب نانومتر است [17]. وجود زیرلایه به‌دلیل بازتاب‌های متوالی بر



شکل 5. طیف جذب هر چهار تک‌لایه  $\text{MoSe}_2$ ،  $\text{WSe}_2$ ،  $\text{MoS}_2$  و  $\text{WS}_2$  برحسب طول موج.

با زیرلایه‌های fused Silica، Si و SiO<sub>2</sub> و حالت معلق برای مقایسه نشان داده شده است.

جذب ساختار اثر می‌گذارد. در شکل 6، طیف جذب هر یک از تک‌لایه‌های MoSe<sub>2</sub>، WSe<sub>2</sub>، MoS<sub>2</sub> و WS<sub>2</sub>



شکل 6. اثر زیرلایه‌های متفاوت در میزان جذب تک‌لایه‌های MoSe<sub>2</sub>، WSe<sub>2</sub>، MoS<sub>2</sub> و WS<sub>2</sub> و مقایسه با زیرلایه هوا.

متعارف در کارهای تجربی بررسی و مشخص شد که استفاده از زیرلایه باعث کاهش میزان جذب می‌شود و با افزایش ضریب شکست زیرلایه میزان جذب کاهش می‌یابد. همچنین این ساختارها، برحسب نوع حامل‌های بارشان می‌توانند از نوع نیم‌رسانای n یا p باشند و در ساخت دیود مورد استفاده قرار گیرند.

با توجه به شکل 6، استفاده از زیرلایه باعث کاهش میزان جذب می‌شود. در بین زیرلایه‌های انتخاب شده کمترین ضریب شکست مربوط به fused Silica و بیشترین مربوط به Si است. مشاهده می‌شود که میزان جذب در ساختاری با زیرلایه‌ای با ضریب شکست بالاتر باعث کاهش بیشتر جذب نسبت به حالت معلق می‌شود.

## نتیجه‌گیری

تأثیر مدل گاوس در بهبود ثابت گذردهی تک‌لایه‌های TMDC شامل MoSe<sub>2</sub>، WSe<sub>2</sub>، MoS<sub>2</sub> و WS<sub>2</sub> در ناحیه طول موج مرئی و مادون قرمز نزدیک در مدل لورنتس، لورنتس-گاوس و درود-لورنتس-گاوس را بررسی کرده‌ایم که تطابق بسیار خوبی با نتایج تجربی دارد. رفتار جذب ساختار همانند رفتار قسمت موهومی ثابت گذردهی تک‌لایه‌ها است و قله‌های جذب بر فرکانس‌های تشدید مدل‌های استفاده شده منطبق می‌باشد. جذب تک‌لایه‌ها در حضور چند زیرلایه

## مراجع

- [1] K.F. Mak, J. Shan, Photonics and optoelectronics of 2D semiconductor transition metal dichalcogenides, *Nature Photonics* **10** (2016) 216-226.
- [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** (2012) 699-712.
- [3] Y.X. Chen, C.W. Wu, T.Y. Kuo, Y.L. Chang, M.H. Jen, I.W. Chen, Large-Scale Production of Large-Size Atomically Thin Semiconducting Molybdenum Dichalcogenide Sheets in Water and Its Application for Supercapacitor, *Scientific reports* **6** (2016) 26660-26668.

- and visible, *Optical Materials Express* **5** (2015) 447-455.
- [11] Y. Li, A. Chernikov, X. Zhang, A. Rigosi, H.M. Hill, A.M. Zande, D.A. Chenet, E.M. Shih, J. Hone, T.F. Heinz, Measurement of the optical dielectric function of monolayer transition-metal dichalcogenides: MoS<sub>2</sub>, MoSe<sub>2</sub>, WS<sub>2</sub>, and WSe<sub>2</sub>, *Physical Review B* **90** (2014) 205422-205427.
- [12] M. Weisman, N.C. Panoiu, Theoretical and computational analysis of second and third-harmonic generation in periodically patterned graphene and transition-metal dichalcogenide monolayers, *Physical Review B* **94** (2016) 035435.
- [13] John R. Reitz, *Foundations of Electromagnetic Theory*, Addison Wesley, (1993).
- [14] T. Zhan, X. Shi, Y. Dai, X. Liu, J. Zi, Transfer matrix method for optics in graphene layers, *J. Phys.: Condens. Matter* **25** (2013) 215301-215309.
- [15] P. Yeh, *Optical waves in layered media*, John Wiley & Sons, Inc, (2005).
- [16] M.A. Green, M.J. Keevers, Optical properties of intrinsic silicon at 300 K, *Progress in photovoltaics* **3**, (1995) 189-192.
- [17] G. Ghosh, Dispersion-equation coefficients for the reflective index and birefringence of calcite and quartz crystals, *Optics Communications* **163** (1999) 95-102.
- [4] K.L. Seyler, J.R. Schaibley, P. Gong, P. Rivera, A.M. Jones, S. Wu, J. Yan, D.G. Mandrus, W. Yao, X. Xu, Electrical control of second-harmonic generation in a WSe<sub>2</sub> monolayer transistor, *Nature Nanotechnology* **10** (2015) 407-411.
- [5] H. Zeng, J. Dai, W. Yao, D. Xiao, X. Cui, Valley polarization in MoS<sub>2</sub> monolayers by optical pumping, *Nature Nanotechnology* **7** (2012) 490-493.
- [6] J.A. Reyes-Retana, F. Cervantes-Sodi, Spin-orbital effects in metal-dichalcogenide semiconducting monolayers, *Scientific Reports* **6** (2016) 24093-24098.
- [7] Y.J. Noori, Y. Cao, J. Roberts, C. Woodhead, R. Bernardo-Gavito, P. Tovee, R.J. Young, Photonic crystals for enhanced light extraction from 2D materials, *ACS Photon.* **3** (2016) 2515-2520.
- [8] Z. Zheng, T. Zhang, J. Yao, Y. Zhang, J. Xu and G. Yang, Flexible transparent and ultra-broadband photodetector based on large-area WSe<sub>2</sub> film for wearable devices, *Nanotechnology* **27** (2016) 225501-225512.
- [9] M.L. Tsai, M. Y. Li, Y. Shi, L.J. Chen, L.J. Li, J.H. He, High-efficiency omnidirectional photoresponses based on monolayer lateral p-n heterojunctions, *Nanoscale Horizons* **2** (2017) 37-42.
- [10] B. Mukherjee, F. Tseng, D. Gunlycke, K. Kumar, G. Eda, E. Simsek, Complex electrical permittivity of the monolayer molybdenum disulfide (MoS<sub>2</sub>) in near UV