

ثابتهای اپتیکی تک لایه های MoS₂ در ناحیه طول موجهای مرئی

صبورا صالحی^۱، علیرضا صفارزاده^۱

^۱گروه فیزیک، دانشگاه پیام نور تهران شرق

چکیده

در این مقاله خواص اپتیکی تک لایه های MoS₂ از جمله قسمت حقیقی و موهومی ثابت دی الکتریک، ضریب شکست و خاموشی و ضریب جذب با استفاده از روش تقریب بستگی قوی اسلیتر-کوستر محاسبه شده است. نتایج بدست آمده در توافق خوبی با کارهای تجربی و تئوری پیشین است. همچنین این مواد کاندیدای مناسبی برای استفاده در دستگاههای اپتوالکترونیک و فوتونیک می باشند.

۱- مقدمه

در سالهای اخیر مطالعه ی خواص الکتریکی و اپتیکی مواد لایه ای و اندروالس (TMDC) نظیر MoS₂ توجه زیادی را به خود جلب کرده است. این ماده شامل یک لایه از اتمهای Mo که توسط دو لایه از اتمهای سولفور که در بالا و پایین آن قرار دارند احاطه شده است. در این مواد داخل هر صفحه پیوند قوی کووالانسی وجود دارد اما بین صفحات پیوند ضعیف و اندروالسی برقرار است [۱،۳]. در این مقاله قصد داریم با استفاده از روش تقریب بستگی قوی اسلیتر-کوستر به بررسی برخی از ثابتهای اپتیکی در تک لایه های MoS₂ در ناحیه مادون قرمز نزدیک و مرئی بپردازیم.

۲- مدل نظری

در این مقاله ما برای بررسی ویژگی های اپتیکی MoS₂ از مدل تقریب بستگی قوی اسلیتر کوستر ۶ نواری با پایه های متعامد که در آن سه اوربیتال 4d (Mo) و ترکیبهای متقارن (پادمقارن) اوربیتالهای p_x، p_y، p_z اتمهای سولفور بالا و پایین شرکت دارند استفاده کردیم. پارامترهای جهش و سایر جزئیات این مدل ۶ نواری در رفرنس ۳ گزارش شده اند. ویژگیهای اپتیکی مواد را می توان با محاسبه ثابت دی الکتریک توصیف نمود. ثابت دی الکتریک از دو بخش حقیقی

$\epsilon_1(\omega)$ و موهومی $\epsilon_2(\omega)$ که به ترتیب مربوط به گذارهای درون نواری و گذارهای بین نواری است تشکیل شده است [۲]:

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_1(\omega) + i \epsilon_2(\omega) \quad (1)$$

گذارهای بین نواری در نیمرساناها اهمیت دارند و به دو بخش گذار مستقیم و گذار غیر مستقیم تقسیم می شوند. سهم گذارهای بین نواری ناشی از انتقالهای مستقیم که شامل یک جمع بندی روی تمام انتقالهای ممکن از حالت های پر شده نوار ظرفیت به حالت های پر نشده در نوار رسانش می باشند. گذارهای بین نواری غیرمستقیم نیز ناشی از پراکندگی های فونونی هستند و سهم کوچکی (در حدود میلی الکترون ولت) در ثابت دی الکتریک خواهند داشت و قابل صرف نظر

کردن می باشند. بخش موهومی ثابت دی الکتریک از رابطه ی ۲ به دست می آید که در آن ω فرکانس فوتون ورودی،

$|c_k\rangle, |v_k\rangle$ تابع موج الکترونیهای نوار رسانش و ظرفیت با بردار موج k اند و P ماتریس عملگر تکانه
 [۲] است $p^{\alpha(\beta)} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$

$$\varepsilon_{2\alpha\beta}(\omega) = \frac{Ve^2}{2\pi m^2 \omega^2} \int dk^3 \sum_{mn} \langle c_k | p^\alpha | v_k \rangle \langle v_k | p^\beta | c_k \rangle \delta(E_{ck} - E_{vk} - \omega) \quad (۲)$$

بخش حقیقی ثابت دی الکتریک از رابطه ی کرامرز- کرونیگ به صورت زیر بدست می آید که در آن P بخش اصلی
 انتگرال است.

$$\varepsilon_1(\omega) = 1 + \frac{2}{\pi} P \int_0^\infty d\omega' \frac{\omega' \varepsilon_2(\omega')}{\omega'^2 - \omega^2} \quad (۳)$$

ضریب شکست نیز مانند ثابت دی الکتریک یک تابع مختلط بوده و از رابطه زیر به دست می آید:

$$N(\omega) = n(\omega) + i k(\omega) \quad (۴)$$

که $n(\omega)$ بخش حقیقی ضریب شکست و $k(\omega)$ بخش موهومی ضریب شکست (ضریب خاموشی) هستند.

$$n(\omega) = \sqrt{\frac{\varepsilon_1^2 + \varepsilon_2^2 + \varepsilon_1}{2}}, \quad k(\omega) = \sqrt{\frac{\varepsilon_1^2 + \varepsilon_2^2 - \varepsilon_1}{2}} \quad (۵)$$

همچنین ضریب جذب که نشان دهنده ی عمق نفوذ طول موجی معین می باشد از رابطه ی زیر بدست می آید.

$$\alpha = \frac{2k\omega}{c} = \frac{4\pi k}{\lambda} \quad (۶)$$

طبق رابطه ۶ ضریب جذب با ضریب خاموشی رابطه مستقیم دارد. اگر $k > 0$ به معنی جذب نور و اگر $k = 0$ یعنی
 نور به طور مستقیم از ماده عبور می کند و جذب رخ نمی دهد.

۳- نتایج

شکل ۱ (a) ساختار نواری تک لایه ی MoS_2 را در گستره انرژی $|E| \leq 2.3\text{eV}$ نشان می دهد. این ماده دارای گاف
 نواری مستقیمی در ناحیه ی طیف مادون قرمز نزدیک و مرئی است که افق جدیدی را برای کاربرد این ماده در فوتونیک
 و الکترواپتیک ایجاد کرده است [۳]. شکل های ۱ (b) و (c) بخش های موهومی و حقیقی ثابت دی الکتریک را نشان
 می دهند. سهم موهومی ثابت دی الکتریک برای ML-MoS_2 تا قبل از انرژی های حدود $1/6\text{eV}$ دارای مقادیری در حدود
 صفر می باشد که ناشی از جذب فوتون های کم انرژی است که منجر به گذارهای درون نواری می شوند اما برای انرژی های
 بزرگتر از $1/6\text{eV}$ ، سهم موهومی ثابت دی الکتریک به طور ناگهانی افزایش می یابد که این امر بیانگر جذبی است که به
 دنبال آن گذارهای بین نواری رخ می دهد. در واقع شروع جذب از انرژی های حدود $1/6\text{eV}$ اتفاق می افتد که بیانگر

انرژی لازم برای عبور از گاف اپتیکی این ماده است و با اندازه گاف نواری نیز مطابقت دارد. گذارهای بین نواری از نوار ظرفیت به نوار رسانش ساختار پله‌ای با سطوح هموار را در گستره انرژی پایین و یک سری پیک‌های تیز را در گستره انرژی‌های بالاتر در نمودار بخش موهومی ثابت دی‌الکتریک ایجاد می‌کند. پیک‌های A, B, C و D که در ساختار نواری مشخص شده اند تعدادی از گذارهای بین نواری مجاز را مشخص می‌کنند که در نمودار بخش موهومی ثابت دی‌الکتریک نیز آمده‌اند [۵].

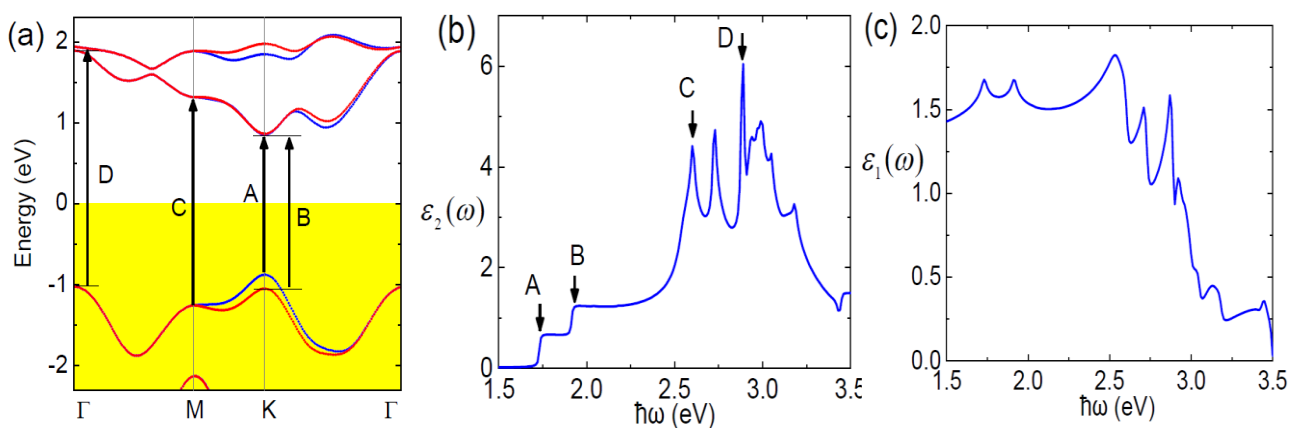
شکل‌های ۲ (a) و (b) به ترتیب ضریب شکست و ضریب خاموشی را برای ML-MoS₂ نشان می‌دهد. مقدار ضریب شکست در انرژی صفر را ضریب شکست استاتیکی می‌گویند که با بخش حقیقی ثابت دی‌الکتریک به صورت

$$n(0) = \sqrt{\epsilon_1(0)}$$

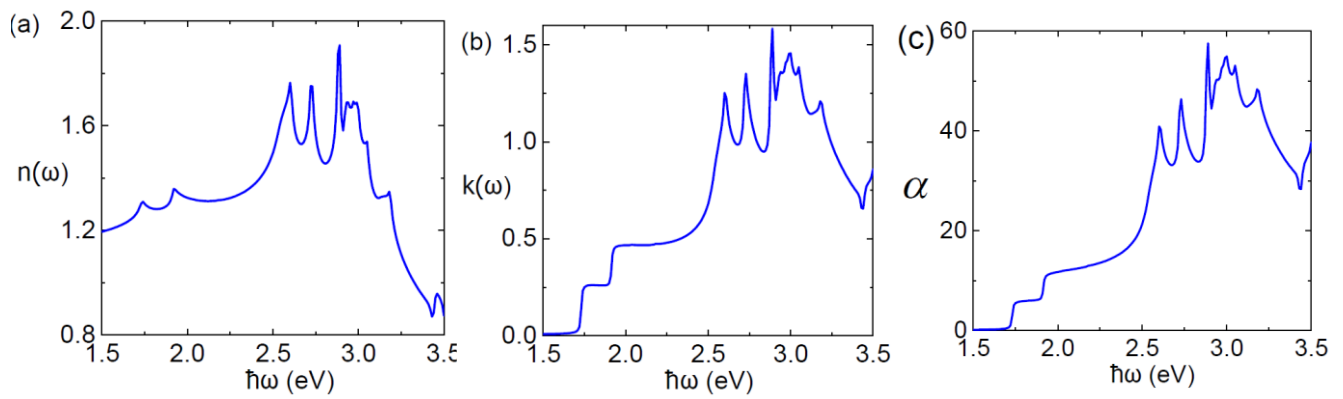
شکل‌های می‌فهمیم که بیشترین مقدار ضریب خاموشی برای ML-MoS₂ در انرژی حدود ۲/۹eV اتفاق می‌افتد که

متناظر با بیشترین مقدار جذب است. همچنین در بازه‌های انرژی صفر تا حدود ۱/۷eV، $|k(\omega)| \ll |n(\omega)| \approx 1$ ناحیه شفاف است و ضریب جذب نیز در این بازه‌ها به کمترین مقدار خود یعنی صفر می‌رسد و در انرژی‌های بزرگتر

از ۱/۷ eV $|k(\omega)| \ll |n(\omega)|$ است و ضریب جذب دارای مقدار غیر صفر است. همچنین می‌توان مشاهده کرد که تغییرات نمودار ضریب شکست نسبت به ضریب خاموشی بسیار کمتر است. با توجه به نمودارهای به دست آمده می‌توان نتیجه گرفت که نمودارهای ضریب شکست رفتاری مشابه با سهم حقیقی ثابت دی‌الکتریک دارند و نمودارهای ضریب خاموشی رفتاری مانند سهم موهومی ثابت دی‌الکتریک از خود نشان می‌دهد، که البته این امر با توجه به روابطی که این کمیات از آن‌ها پیروی می‌کنند دور از انتظار نیست. شکل ۲ (c) نیز نشان می‌دهد که ضریب جذب در انرژی‌های کمتر از گاف نواری مقدارش ناچیز است. شروع جذب در انرژی حدود ۱/۶eV اتفاق می‌افتد و قله‌های طیف جذب در محدوده‌های انرژی فوتون ورودی ۲/۸eV قرار دارند و ضریب جذب با ضریب خاموشی رابطه مستقیم دارد [۴].



شکل ۱: (a) ساختار نواری، (b) و (c) به ترتیب بخش‌های موهومی و حقیقی ثابت دی‌الکتریک را برای ML-MoS₂ نشان می‌دهد.



شکل ۲: (a) و (b) به ترتیب ضریب شکست و ضریب خاموشی و (c) ضریب جذب را برای ML-MoS₂ نشان می‌دهد.

مراجع

- 1] A. K. Geim and I. V. Grigorieva. Nature 499, 419 (2013).
- 2] F. Wooten, optical properties of solids, Academic press, (2013)
- 3] S. Salehi and A. Saffarzadeh, J. Phys. Chem. Solids 121 172 (2018)
- 4] Applied Physics Letters 105, 201905 (2014).
- 5] Phys. Rev. B 90, 205422 – Published 17 November 2014