بررسی انتشار امواج تراهرتز در MoS_2 در مرز بین دو دی‌الکتریک

نرگس انصاری*، مریم مرادی

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

چکیده

امروزه خواص اپتیکی منحصر به‌فرد تک لایه MoS_2 به‌عنوان نیمه‌هادی دو بعدی مورد توجه قرار گرفته است. در این مقاله از ضرایب فرنل برای تعیین خواص اپتیکی مانند جذب، بازتاب و عبور لایه MoS_2 در بازهٔ تراهرتز استفاده شده است. ساختار کلی شامل دو محیط نیمهٔ بی‌نهایت SiO_2 و هوا است که تک لایه MoS_2 در بین آنها قرار دارد. ما دریافتیم که بیشینه جذب برابر با مقدار اندک $۲٫۵\times۱۰^{-۶}$ است که در بازتاب داخلی، برای قطبش TE و در زاویه حد رخ می‌دهد. این میزان جذب کم، نشان‌دهندهٔ کاربردی بودن چنین لایه‌ای در ساخت ابزار نوری به‌ویژه الکترود شفاف و دیگر قطعات الکترونیکی است.

کلیدواژگان: تک لایه MoS_2، ضرایب فرنل، تراهرتز، جذب.

مقدمه

در سال‌های اخیر تحقیقات زیادی بر روی مواد دوبعدی TMDC[1] به‌علت خواص اپتوالکتریکی ویژه‌شان انجام شده است. از بین آنها، MoS_2 به‌دلیل خواص فیزیکی، الکتریکی، و نوری منحصر به‌فرد حاصل از ساختار باند انرژی خاص خود مورد توجه قرار گرفته است. ساختار لایه لایهٔ این ماده دارای پیوندهای واندروالس بوده و بلور MoS_2 یک نیمه‌هادی با گاف نواری غیر مستقیم، E_g=۱٫۲۹ eV، است [۱]. در اثر شکسته شدن پیوندهای واندروالس، این ماده به تک لایه MoS_2 با گاف نواری مستقیم نسبتا بزرگ، E_g=۱٫۹ eV، تبدیل می‌شود [۲]. این مطلب، موجب برتری آن نسبت به گرافن که فاقد گاف نواری است، می‌شود. زیرا گاف نواری، عامل اصلی در کارکرد و فرایند خاموش و روشن دستگاه های نوری است [۲]. ترانزیستورهای ساخته شده بر اساس MoS_2، تحریک‌پذیری اثر میدان بالای آن تا $۲۰۰ cm^2v^{-1}s^{-1}$ و نسبت جریان خاموش و روشن بالای $۱۰^۸$ را در این ماده نشان داده اند که این دو ویژگی در ساخت قطعات الکترونیکی دارای اهمیت هستند [۱].

محدودهٔ فرکانسی تراهرتز، کاربرد گسترده‌ای در آشکارسازها، مدولاتورها و تغییردهنده‌های فاز دارد که در اغلب آنها، نیاز به الکترود شفاف است. تاکنون، تعداد متعددی از الکترود های شفاف با استفاده از الکترون گاز دو بعدی، یون-ژل و گرافن با چگالی حامل کم پیشنهاد شده است. اما تلاش برای یافتن الکترودهای با عبور بسیار زیاد، همچنان ادامه دارد. با توجه به خواص تک لایه MoS_2، فرضیه استفاده از تک لایه MoS_2 در ساخت الکترود شفاف در محدودهٔ تراهرتز مطرح می‌شود [۳]. لازمهٔ بررسی عبور بالا و رسانندگی، دانستن ویژگی‌های اپتیکی ماده است. بیشترین توصیف‌های پایه در برهم‌کنش امواج الکترومغناطیسی با ماده به‌وسیله تابع گذردهی ماده، ε، داده می‌شود. معادلات فرنل از اساسی‌ترین یافته‌های اپتیک کلاسیک بر پایهٔ تابع گذردهی هستند، زیرا رفتار موج را در سطوح مختلف توصیف می‌کند و تقریباً به

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

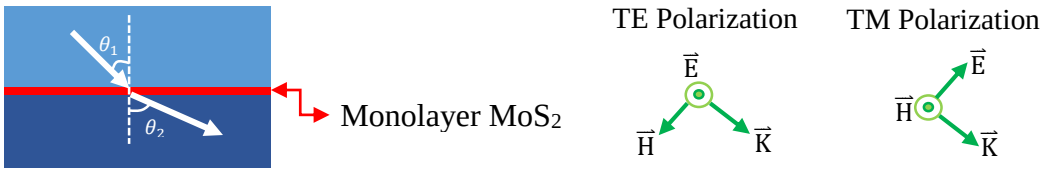
[1] Transition metal dichalcogenides

تمام زمینه‌های مختلف از جمله طراحی لنز، تصویربرداری، لیزر، ارتباطات، طیف‌سنجی و غیره مربوط می‌شوند. درک مناسب از وابستگی ضرایب فرنل به فرکانس و زاویه، در طراحی لایه‌های نازک ضروری است. در این مقاله به بررسی ضرایب فرنل برای مادهٔ جدید MoS_2 در بازهٔ تراهرتز می‌پردازیم.

مبانی نظری

ساختار مورد نظر شامل دو محیط دی‌الکتریک نیمه‌بی‌نهایت SiO_2 و هوا به‌ترتیب با گذردهی ε_{SiO2} =۲٫۱ و ε_{air} =۱ در بازهٔ فرکانسی ۰٫۲ تا ۳ تراهرتز می‌باشد [٤] که تک لایه MoS_2 در مرز این دو محیط قرار دارد که در شکل ۱ نشان داده شده است. در اکثر کارهای تجربی، MoS_2 بر روی SiO_2 و Si لایه نشانی شده است و ما در این کار SiO_2 را انتخاب کرده‌ایم.

گذردهی تک‌لایه MoS_2 مطابق با نتایج تجربی در محدوده تراهرتز با مدل درود و رابطهٔ $\varepsilon(\omega) = \varepsilon_\infty - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 + i\Gamma\omega}$ به‌دست می‌آید [۱] که در آن $\omega_p/2\pi$ =۲٫۷٦ THz فرکانس پلاسما، $\Gamma/2\pi$ =۱٫۱۷THz نرخ میرایی و ε_∞ =۱۱٫۷۷ گذردهی فرکانس بالا می‌باشند [۱]. با استفاده از گذردهی $\varepsilon(\omega)$ رسانندگی تک لایه MoS_2 از رابطهٔ $\sigma(\omega) = -i\varepsilon_0\omega(\varepsilon(\omega) - 1)$ به‌دست می‌آید که در آن ε_0 ثابت گذردهی خلاء می‌باشد.



شکل ۱. ساختار شامل دو محیط نیمه‌بینهایت هوا و SiO_2 که تک لایه MoS_2 بین این دو لایه قرار دارد. موج از محیط اول به ساختار می‌تابد که این محیط در بازتاب داخلی SiO2 و در بازتاب خارجی هوا می‌باشد. جهت بردارهای میدان الکتریکی و مغناطیسی برای دو قطبش TE و TM در شکل نشان داده شده است.

با توجه به رسانندگی و ضخامت بسیار کم لایه MoS_2، اثر آن در معادلات شرایط مرزی فقط به‌عنوان یک چگالی سطحی به‌صورت:

$$\hat{n} \times (\vec{E}_2 - \vec{E}_1) = \vec{0}\,,$$
$$\hat{n} \times (\vec{H}_2 - \vec{H}_1) = \vec{J}_s\,,$$

وارد می‌شود. با استفاده از معادلات فوق و معادلات ماکسول، بازتاب، عبور و جذب به‌صورت:

$$R_p = \left|\frac{\sqrt{\varepsilon_2}/\cos\theta_2 - \sqrt{\varepsilon_1}/\cos\theta_1 + \tilde{\sigma}}{\sqrt{\varepsilon_2}/\cos\theta_2 + \sqrt{\varepsilon_1}/\cos\theta_1 + \tilde{\sigma}}\right|^2$$

$$R_s = \left|\frac{\sqrt{\varepsilon_1}\cos\theta_1 - \sqrt{\varepsilon_2}\cos\theta_2 - \tilde{\sigma}}{\sqrt{\varepsilon_1}\cos\theta_1 + \sqrt{\varepsilon_2}\cos\theta_2 + \tilde{\sigma}}\right|^2$$

$$T_p = \frac{4\sqrt{\varepsilon_1\varepsilon_2}/(\cos\theta_1\cos\theta_2)}{\left|\frac{\sqrt{\varepsilon_2}}{\cos\theta_2} + \sqrt{\varepsilon_1}/\cos\theta_1 + \tilde{\sigma}\right|^2}$$

$$T_s = \frac{4\sqrt{\varepsilon_1\varepsilon_2}(\cos\theta_1\cos\theta_2)}{|\sqrt{\varepsilon_2}\cos\theta_2 + \sqrt{\varepsilon_1}\cos\theta_1 + \tilde{\sigma}|^2}$$

$$A_p = 1 - T_p - R_p$$

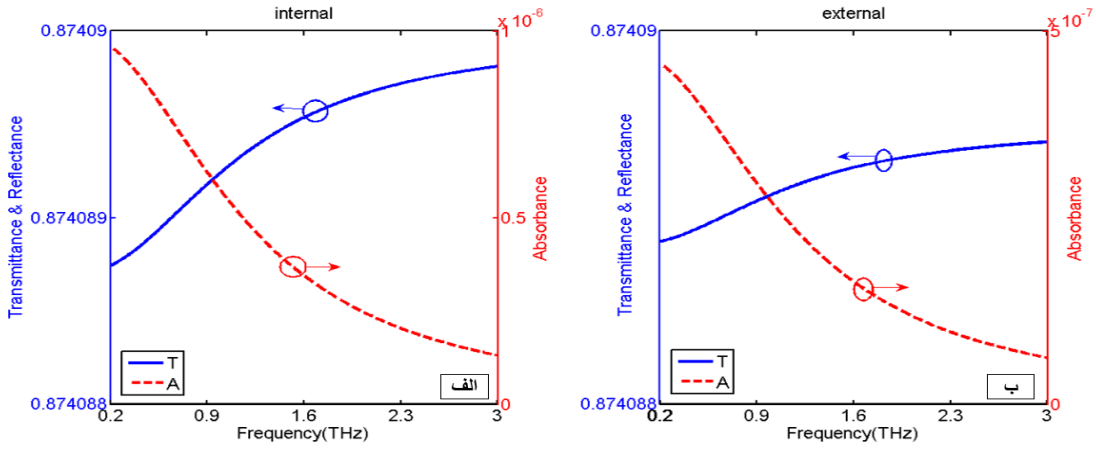
$$A_s = 1 - T_s - R_s$$

به‌دست می‌آید که در این روابط $\tilde{\sigma} = \sigma/c$، c سرعت نور و ε_1،ε_2 به‌ترتیب گذردهی محیط یک و دو می‌باشند و علامت s و p به‌ترتیب نشان دهندهٔ قطبش TE و TM می‌باشد.

نتایج وبحث

در ابتدا عبور، بازتاب و جذب ساختار مد نظر را برای تابش عمودی در محدوده فرکانسی ۰٫۲ تا ۳ تراهرتز، برای هر دو حالت بازتاب داخلی و خارجی مورد بررسی قرار می‌دهیم که در بازتاب داخلی، موج از SiO_2 به هوا و در بازتاب خارجی از هوا به SiO_2 وارد می‌شود.

در شکل۲ دیده می‌شود در بازتاب داخلی و خارجی، با افزایش فرکانس، میزان جذب کاهش و میزان عبور افزایش می‌یابد. سرعت تغییرات در عبور در حالت بازتاب داخلی نسبت به بازتاب خارجی بیشتر است. بیشینه مقدار جذب در بازتاب داخلی تقریباً دو برابر بیشینه مقدار جذب در بازتاب خارجی می‌باشد. برای بازتاب داخلی میزان جذب کمتر از 10^{-5} (شکل۲-الف) و برای بازتاب خارجی میزان جذب کمتر از 10^{-6} بوده (شکل۲-ب) و میزان عبور در هردو حالت بازتاب داخلی و خارجی بالا است. علت این جذب اندک و سرعت انتقال بالا را می‌توان در میزان تأثیر بالای حامل‌ها، کوچک بودن قسمت حقیقی و موهومی گذردهی و ضخامت بسیار کم درحدود ۰٫٦۵ نانومتر تک لایه MoS_2 دانست [۳].

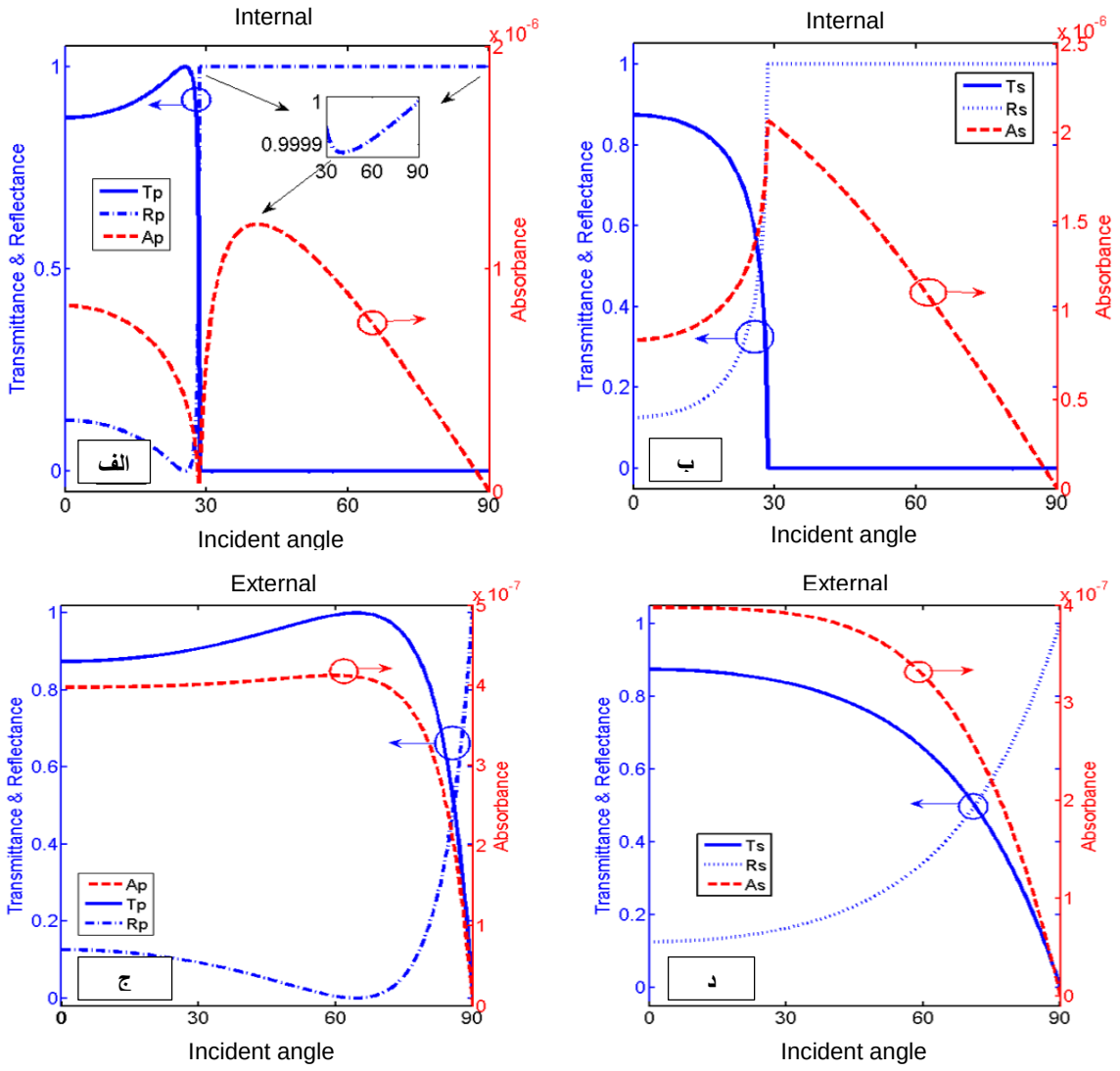


شکل۲. طیف جذب، عبور و بازتاب برای تابش عمودی در دو حالت (الف) بازتاب داخلی و (ب) بازتاب خارجی.

بررسی ضرایب فرنل در زوایای متفاوت از دیدگاه‌های مختلف حائز اهمیت می‌باشد. با توجه به شکل۲ که بیشینه مقدار جذب در بازهٔ پایین تراهرتز اتفاق می‌افتد. با انتخاب فرکانس ۰٫۵ THz، به بررسی ضرایب فرنل در زوایای مختلف برای هر دو حالت بازتاب داخلی وخارجی در دو قطبش TE و TM پرداخته و در شکل ۳ طیف عبور، جذب و بازتاب را رسم کرده‌ایم.

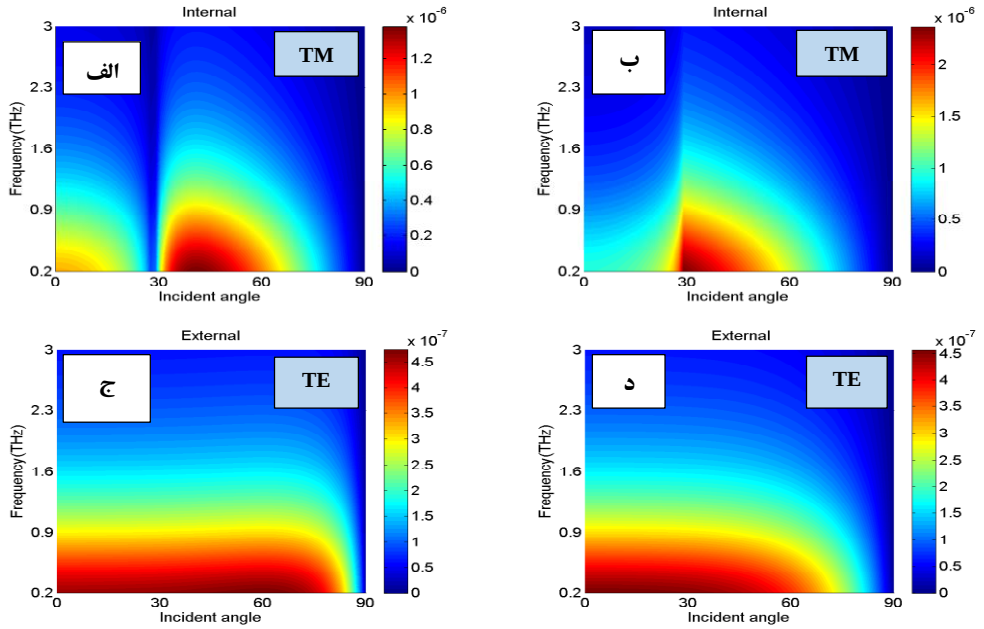
در بازتاب داخلی و برای قطبش‌های TE وTM زاویه حد با رابطهٔ $\sin^{-1}\frac{n_2}{n_1}$ داده می‌شود و برابر با ۲۸٫٤۳ درجه است که n_2 و n_1 ضریب شکست دو محیط هستند و نور از محیط ۱ به محیط ۲ می‌رود. برای قطبش TM زاویهٔ بروستر با رابطهٔ $\tan^{-1}\frac{n_2}{n_1}$ برابر با ۲۵٫٤٦ درجه به‌دست می‌آید. در بازتاب خارجی زاویه حد وجود ندارد ولی زاویه بروستر در قطبش TM، ٦٤٫۵۳ درجه به‌دست می‌آید که این زوایا در شکل۳ مشاهده می‌شوند. در بازتاب داخلی، در قطبش TM در محدودهٔ بین زاویه حد تا زاویه ۹۰ درجه، میزان بازتاب بسیار بزرگتر از میزان عبور و نزدیک به‌یک است، در نتیجه با توجه به رابطهٔ A=1-R-T بیشینهٔ جذب در کمینهٔ بازتاب رخ داده است (شکل۳-الف) اما برای قطبش

TE آن، میزان جذب تا زاویه بروستر افزایش یافته و سپس کاهش می‌یابد (شکل۳-ب). در بازتاب خارجی، در حالت قطبش TM میزان جذب با روند کندی تا زاویه بروستر افزایش و سپس کاهش می‌یابد (شک۳-پ) در حالی که در قطبش TE میزان جذب به‌ازای همهٔ زاویه‌های فرود موج کاهش می‌یابد (شکل۳-ت). در دو شکل۳-الف و۳-ب منحنی‌های جذب به‌دست آمده به‌طور مشابه برای گرافن نیز وجود دارند با این تفاوت که میزان جذب در گرافن بالاتر بوده و حداقل تا ۱۰۴برابر میزان جذب در MoS_2 می‌باشد [۵]. هرچه میزان جذب مادهٔ نیمه‌هادی بیشتر باشد میزان گرمای تولید شده در قطعه الکترونیکی بالاتر است، در نتیجه احتمال صدمه دیدن قطعه بالاتر می‌رود، لذا MoS_2 از این لحاظ در ساخت قطعات الکترونیکی بر گرافن در بازه فرکانسی بررسی شده ارجحیت دارد.



شکل۳. جذب، عبور و بازتاب برحسب زاویهٔ فرود نور در فرکانس 0.5THz که قطبش TE با s و قطبش TM با p نمایش داده است. (الف) بازتاب داخلی و قطبش TM ،(ب) بازتاب داخلی و قطبش TE (ج) بازتاب خارجی و قطبش TM (د) بازتاب خارجی و قطبش TE مورد بررسی قرار گرفته است.

با توجه به‌شکل۲ و ۳ می‌توان دریافت که با بررسی هم‌زمان فرکانس و زاویه، دید بهتری برای یافتن بیشینه مقدار جذب به‌دست می‌آید. شکل٤ نشان می‌دهد میزان جذب در فرکانس‌های پایین بیشتر می‌باشد که این مطلب در شکل۲ به‌ازای تابش عمودی نشان داده شده است. در بازتاب داخلی و قطبش TM در دو ناحیه، جذب بالا دیده می‌شود، همان‌طور که درشکل۳-الف نیز دو قلهٔ جذب را به‌ازای یک فرکانس مشخص مشاهده می‌کنیم اما برای قطبش TE یک ناحیه با جذب بالا دیده می‌شود که در شکل۳-ب نیز تک قلهٔ مربوط به جذب، در یک فرکانس مشخص دیده می‌شود. با توجه به نبود زاویه حد در بازتاب خارجی، تغییرات جذب در هر دو قطبش بدون تغییرات سریع صورت می‌گیرد که در شکل٤-پ و ٤-ت نشان داده شده است.



شکل٤. میزان جذب برحسب فرکانس و زاویهٔ تابش برای چهار حالت (الف) بازتاب داخلی و قطبش TM ،(ب) بازتاب داخلی و قطبش TE (ج) بازتاب خارجی و قطبش TM (د) بازتاب خارجی و قطبش TE مورد بررسی قرار گرفته است.

نتیجه‌گیری

در ساختار مورد نظر، جذب در حالت بازتاب داخلی بیشتر از بازتاب خارجی است و بیشینه مقدار آن نیز برای قطبشTE در اطراف زاویه حد دیده می‌شود در حالی‌که در همان زاویه، جذب برای قطبش TM کمینه مقدار ممکن است و با دور شدن از زاویه حد تا رسیدن به زاویهٔ ٤۰ درجه جذب زیاد می‌شود.

در بازهٔ فرکانسی تراهرتز، MoS_2 به‌عنوان یک لایه رسانا با معادله درود مورد بررسی قرار می‌گیرد که بیشینهٔ مقدار جذب برای این ساختار $۲/۵\times۱۰^{-۶}$ است و می‌توان نقاطی را یافت که ساختار، عبور بسیار بالایی نیز داشته باشد که با توجه به این مقدار جذب کم و عبور بالا و رسانندگی MoS_2 می‌توان از آن به‌عنوان الکترود شفاف استفاده کرد.

منابع

[1] X. Yan, L. Zhu, Y. Zhou, Y.E.L. Wang, X. Xu, Dielectric property of mos2 crystal in terahertz and visible region, *Applied Optics*. 54 (2015) 6732-6736.

[2] C.C. Shen, Y.T. Hsu, L.J. Li, H.L Lin, Charge Dynamics and Electronic Structures of Monolayer MoS2 Films Grown by Chemical Vapor Deposition, *Applied Physics Express*. 6 (2013) 125801-125804.

[3] X.Y. Deng, X.H. Deng, F.H. Su, N.H. Liu, J.T. Liu, Broadband ultra-high transmission of

terahertz radiation through monolayer MoS_2, *Journal of Applied Physics* 118 (2015) 224304

[4] H. Hajian, A. Soltani-vala, M. Kalafi, Optimizing terahertz surface plasmons of a monolayer graphene and a graphene parallel plate waveguide using one-dimensional photonic crystal, *Journal of Applied Physics* 114 (2013) 033102.

[5] T. Zhan, X. Shi, Y. Dai, X. Liu, J. Zi, Transfer matrix method for optics in graphene layers. *Journal of Physics Condensed Matter*. 25 (2013) 215301

Investigation of THz waves propagation in MoS_2 monolayer between two dielectric media

Narges Ansari*, Maryam Moradi

Department of Chemistry, College of Sciences, Alzahra University, Tehran, Iran

Abstract

Today, exclusive optical properties of monolayer MoS_2 as a two-dimensional semiconductor have found a rapid attention. In this paper, Fresnel equations are used to determine optical properties, i.e. absorbance, reflectance and transmittance of MoS_2 layer in the THz range. The whole structure includes two semi-infinite SiO_2 and air with monolayer MoS_2 in between. We found that the maximum absorption to be as low as 2.5×10^{-6} which appears in internal reflection for TE mode closed to the critical angle. This low amount of absorption suggests application of such a layer in optoelectronics devices especially in transparent electrodes and other electronics elements.

Keywords: Monolayer MoS_2, Fresnel coefficients, terahertz, absorption

* Corresponding Author: n.ansari@alzahra.ac.ir