

MoSe₂ ба WSe₂-ийн дан үеийн оптик шинж чанарын судалгаа

Г.Мөнхсайхан*, Б.Одонтуяа, Р.Буянжаргал, Д.Отгонбаяр, О.Сүх, Д. Наранчимэг

Шинжлэх Ухаан Технологийн Их Сургууль, Хэрэглээний Шинжлэх Ухааны Сургууль

Энэ ажилд тасалгааны температурт, материалд тусах гэрлийн тусгалыг нормал байх нөхцөлд MoSe₂ ба WSe₂-ийн дан үеийн оптик шинж чанарыг тооцоолсон үр дүнг харуулав. Тооцооллын үр дүнг бусад судлаачдын судалгааны ажлын үр дүнтэй харьцуулахад сайн тохирсон болно. Сонгон авсан материалуудын дан үеийн хугарлын илтгэгч, сулруулах коэффициентыг тодорхойлж материалд туссан гэрлийн ойлт, нэвтрүүлэлт, шингээлтийг тоцоолоход шингээлтийн хамгийн их утга 2.78% (MoSe₂) ба 1.62% (WSe₂) гэж тодорхойлогдсон. Энэ нь материалын зузаан маш бага тул кристаллд шингээгдэх эрчим бага байгаатай холбоотой.

PACS number: 74.25.Gz, 78.20.Ci, 81.05.Hd

Түлхүүр үг: Хугарлын илтгэгч, сулруулах коэффициент, гэрлийн ойлт, нэвтрүүлэлт, шингээлт.

ОРШИЛ

Шилжилтийн металлын дихалкогенидын (ШМДХ) бүл нь MX₂ томъёогоор илэрхийлэгдэх бөгөөд M нь шилжилтийн металл, X нь халкогеныг илэрхийлдэг. Тухайн материалын бүтцэд орсон металл болон халкогенээс хамаарч эдгээр нь хагас дамжуулагчаас хэт дамжуулагч хүртэлх шинж чанартай байдаг. ШМДХ-ийн балк материал нь босоо чиглэлд Ван-дер-Ваальсын сул харилцан үйлчлэлийн хүчээр холбогдсон олон тооны үеүдээс тогтоно. ШМДХ-ийн балк материалыг хуулах байдлаар дан үеийг гаргаж дээрх үеийг хөндийрүүлэгч суурин дээр буулгадаг [1], [2]. MX₂ материалын дан үеийн оптик болон электрон шинж чанарын онцлогийг харгалзан нарны зай, электроникийн салбарт өргөн ашиглах боломжтой [3]. MX₂ материалын дан үеийг гарган авах процесс нь нэн төвөгтэй бөгөөд эдгээрийг гарган авсаны дараа оптик микроскоп болон АХМ, СТМ зэрэг төхөөрөмжүүдээр баталгаажуулдаг. Дээрх аргууд нь хямд, энгийн бөгөөд үл эвдэх арга тул ШМДХ-ийн дан үеийн судалгаанд ашиглагддаг. MoSe₂, WSe₂ нь дан үетэй тохиолдолд хориотой бүсийн шууд, балк тохиолдолд хориотой бүсийн шууд бус шилжилттэй байдаг. Энэ материалын хориотой бүс нь үзэгдэх гэрлийн спектрийн мужид оршдог (400 нм - 700 нм). Сүүлийн жилүүдэд шилжилтийн металлын дихалкогенидуудын оптик шинж чанарын чиглэлээр нилээд олон судалгааны ажлууд

хийгдэж байгаа. Үүнд спектрал ойлт, дифференциал ойлт, дифференциал нэвтрэлт, спектрал шингээлтийн судалгаанууд багтдаг. Эдгээр судалгаанууд нь гол төлөв туршилтын үр дүнд суурилсан бөгөөд онолын загварчлалын ажлууд цөөн хийгдсэн байна. ШМДХ-ын оптик судалгаа эрчимтэй явагдаж байгаа ч эдгээр материалын хугарлын илтгэгч болон сулруулах коэффициентийг тодорхойлсон ажлууд бараг хийгдээгүй байна. Үүнээс гадна ойлт, шингээлт, нэвтрүүлэлтийн коэффициентийг судалсан үр дүнгүүд нь өөр хоорондоо уялддаггүй. Энэхүү ажилд MoSe₂, WSe₂-ийн оптик тогтмолууд (n ба k), оптик шинж чанарын судалгааг онолоор тайлбарлах зорилт тавьсан. Лий нарын судлаачид [4] Крамерс–Кронигийн дүн шинжилгээгээр байгуулсан ойлтын спектрийн туршилтын үр дүнг ашиглан MoSe₂, WSe₂-ийн дан үеийн диэлектрик тогтмолыг (ϵ_1 ба ϵ_2) тасалгааны температурт тооцсон болно. Дээрх утгыг ашиглан фотоны энергээс хамаарсан хугарлын илтгэгч ба сулруулах коэффициент болон бусад оптик шинэ чанаруудыг тооцоолсон.

ОНОЛЫН ХЭСЭГ

Материалын хугарлын илтгэгч n ба сулруулах коэффициент k нь $\epsilon_r = \epsilon_1 + i\epsilon_2$ гэсэн комплекс диэлектрик тогтмолоос хамаардаг. Комплекс диэлектрик функц нь тухайн материалд шингээгдсэн гэрлийн энергээс хамаардаг.

* Electronic address: gmunkhsaikhan@must.edu.mn

Эдгээр тогтмолуудыг ашиглан материалын хугарлын илтгэгч болон сулруулах коэффициентыг тодорхойлно. Комплекс диэлектрик тогтмол нь n ба k -аас дараах байдлаар хамаарна.

$$\epsilon_1 = n^2 - k^2 \quad (1)$$

$$\epsilon_2 = 2nk \quad (2)$$

(1) ба (2)-р тэгшитгэлээс k коэффициентийг олбол

$$4n^4 - 4n^2\epsilon_1 = \epsilon_2^2 \quad (3)$$

$$k = \frac{\epsilon_2}{2n} \quad (4)$$

(3)-р тэгшитгэлийг бодоход n -ийн утгууд олддог ба n -ийн бодит, эерэг утгуудыг ашиглан сулруулах коэффициентийг олно. Орчны диэлектрик нэвтрэх чадвар нь ω давтамжаас $\epsilon(\omega) = 1 - \frac{4\pi N e^2}{m\omega^2}$ гэж хамаарна. Энд: m - электроны масс, e -электроны цэнэг, ρ -ШМДХ-ийн нягт, N_e -нэг атомд агуулагдах электроны тоо, N - нийт атомд агуулагдах электроны тоо бөгөөд $N = \rho \mu N_e / N_a$ болно. Материалыг өндөр давтамжтай гэрлээр үйлчлэхэд материалын диэлектрик нэвтрэх чадвар нь нэг рүү дөхнө [5]. Энэ хамаарал нь нано хэмжээст материалын хувьд биелдэггүй тул зарим судлаачид туршилтын оновчтой утгыг онолын томъёонд орлуулах байдлаар n ба k -г тодорхойлдог.

MoSe₂ ба WSe₂-ийн дан үеийн оптик шинж чанар болох ойлт (R), нэвтрүүлэлт (T) ба шингээлтийг (A) дараах систем тэгшитгэлүүдээр тодорхойлдог:

$$R = \frac{(n-1)^2 + k^2}{(n+1)^2 + k^2} \quad (5)$$

$$T = (1 - R)e^{-\alpha t} \quad (6)$$

(6) - р тэгшитгэл дэх α нь шингээлтийн коэффициент, t нь үеийн зузаан болно. Шингээлтийн коэффициент нь туссан долгионы урт ба ШМДХ-ийн сулруулах коэффициентээс хамаарна:

$$\alpha = \frac{4\pi k}{\lambda} \quad (7)$$

Шингээлт нь

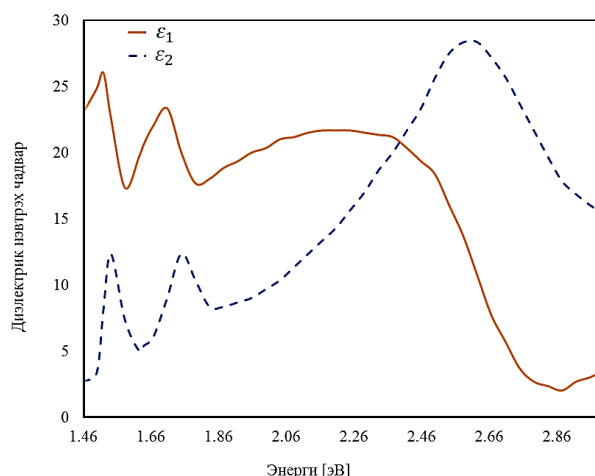
$$A = 1 - (R + T) \quad (8)$$

тэгшитгэлээр илэрхийлэгдэнэ.

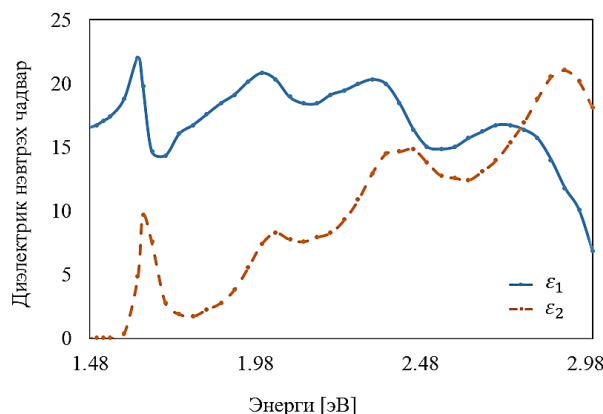
ТООЦООЛЛЫН ҮР ДҮН

Оптик тогтмолууд. MoSe₂ ба WSe₂-ийн дан үеийн оптик тогтмолууд болох n ба k -г Лий

нарын туршилтын үр дүнгээр тодорхойлогдсон ϵ_1 ба ϵ_2 -ын утгыг ашиглан тооцоолно [4] (1 ба 2-р зураг). MoSe₂ ба WSe₂-ийн дан үеийн зузааныг 0.7 нм [6] байхаар тооцов.



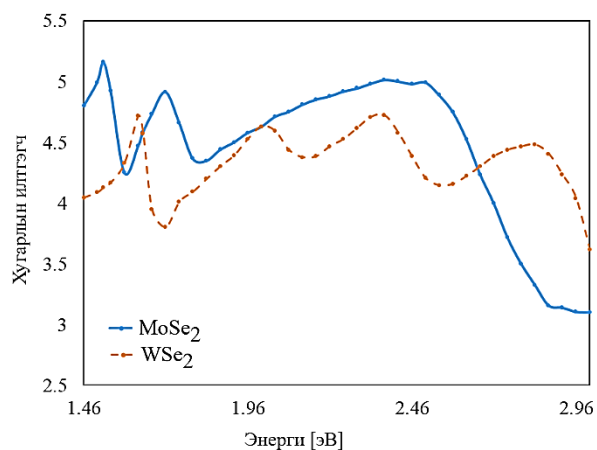
Зураг 1. MoSe₂-ийн диэлектрик нэвтрэх чадвар болон материалд тусах гэрлийн энергийн хамаарал [4].



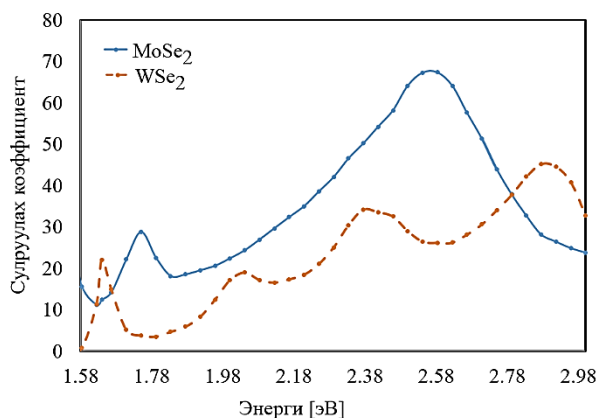
Зураг 2. WSe₂-ийн диэлектрик нэвтрэх чадвар болон материалд тусах гэрлийн энергийн хамаарал [4].

3 ба 4-р зурагт MoSe₂ ба WSe₂ -ийн дан үеийн n ба k утгуудыг үзүүлэв. MoSe₂-ийн хувьд дан үед 1.52 эВ энергид n хугарлын илтгэгч нь 5.2, балкийн хувьд 1.51 эВ энергид 5.49 хэмээн тооцоологдов. Харин энэ материалын хувьд сулруулах коэффициентийн хамгийн их утга нь дан үед 3.29 (2.7 эВ), балкийн хувьд 2.43 (3.00 эВ) хэмээн тодорхойлогдсон. WSe₂ материалын хувьд энерги ба хугарлын илтгэгчийн хамаарлыг дан ба балкийн хувьд тодорхойлсон болно. Энд дан үеийн хувьд 1.63 эВ энергид хугарлын илтгэгчийн хамгийн их утга 4.72, балкийн хувьд 1.62 эВ утгад 4.69 болох нь тогтоогдсон. Энэ материалын хувьд сулруулах коэффициентийн хамгийн их утгууд нь дан үед 2.6 (2.94 эВ), балкад 1.56 (3 эВ) болох нь тодорхойлогдсон.

Бид тооцоондоо харьцуулах зорилгоор $MoSe_2$ ба WSe_2 -ийн дан ба балк материалын хугарлын илтгэгчийг тооцоолсон бөгөөд энэ ажилд зөвхөн дан үеийн хувьд гарсан үр дүнг харуулсан болно.



Зураг 3. $MoSe_2$ ба WSe_2 -ийн дан үеийн хугарлын илтгэгч, энергийн хамаарал.



Зураг 4. $MoSe_2$ ба WSe_2 -ийн дан үеийн сулруулах коэффициент ба энергийн хамаарал.

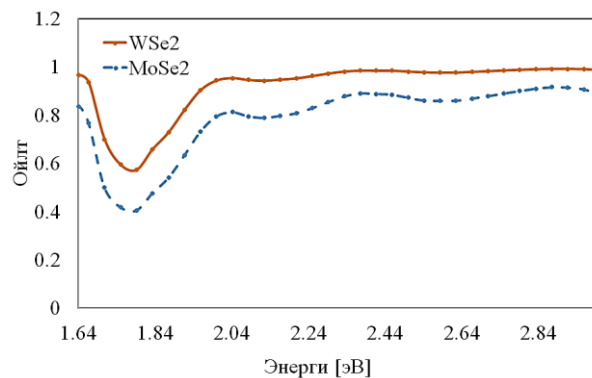
$MoSe_2$ ба WSe_2 -ийн дан ба балк материалын хугарлын илтгэгчийг харьцуулахад илэрхий зөрүүтэй байгаа нь үеийн тоо хугарлын илтгэгчид нөлөөлдөг болохыг харуулж байна. Үүнтэй ижил шинж чанар сулруулах коэффициентэд ажиглагдсан. Эдгээр утгууд нь Жан нарын [7] тодорхойлсон оптик тогтмолуудын утгуудтай ойролцоо байна.

Оптик шинж чанар. $MoSe_2$ ба WSe_2 -ийн дан үе ба балкийн оптик шинж чанарууд болох ойлт, нэвтрэлт, шингээлтийг онолын хэсэгт дурдсан тэгшитгэлүүд ашиглан тооцоолсон.

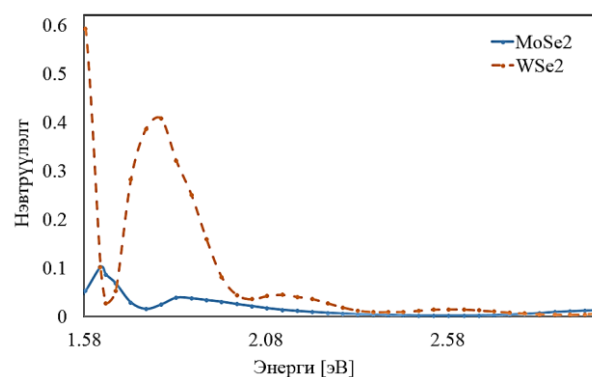
5, 6 ба 7-р зурагт дээрх материалуудын дан үеийн оптик шинж чанар болох ойлт, нэвтрүүлэлт, шингээлтийн гэрлийн энергээс хамаарах хамаарлыг үзүүлсэн. Дан үеийн хувьд

материалын гэрлийн шингээлт нь балк үеийнхээс харьцангуй бага байсан.

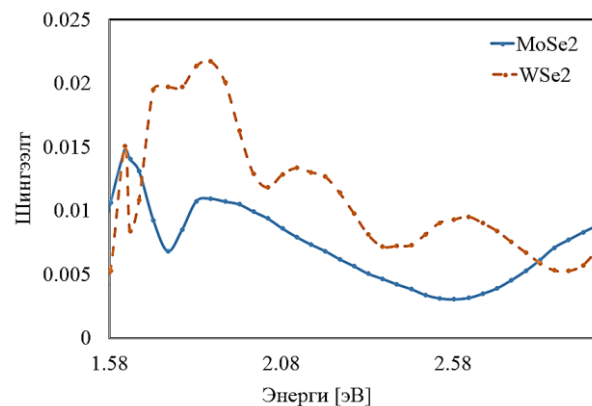
$MoSe_2$ -ийн дан үеийн ойлтын хамгийн утга нь 55.7% (2.64 эВ), нэвтрүүлэлтийн хамгийн их утга 59.2% (1.6 эВ) байсан бөгөөд шингээлтийн хамгийн их утга 2.78% нь гэж тооцоологдсон.



Зураг 5. $MoSe_2$ ба WSe_2 -ийн гадаргын ойлт ба энергийн хамаарал.



Зураг 6. $MoSe_2$ ба WSe_2 -ийн гадаргын нэвтрүүлэлт ба энергийн хамаарал.



Зураг 7. $MoSe_2$ ба WSe_2 -ийн гадаргын шингээлт ба энергийн хамаарал.

WSe_2 -ийн дан үеийн ойлт, нэвтрүүлэлт болон шингээлтийн хамгийн утгууд харгалзан 49.7% (2.9 эВ), 65.4% (1.71 эВ) ба 1.62% (2.47 эВ) байсан болно. Энэ нь материалын зузаан маш

бага тул кристаллд шингээгдэх эрчим бага байгаатай холбоотой.

monolayer MoS₂ with high confidence. Scientific reports.

ДҮГНЭЛТ

Энэ ажилд MoSe₂ ба WSe₂-ийн дан үеийн оптик шинж чанарыг тооцоолж бусад судлаачдын судалгааны ажлын үр дүнтэй харьцуулахад сайн тохирсон болно. Дээрх материалуудын хугарлын илтгэгч, сулруулах коэффициентыг тодорхойлж материалд туссан гэрлийн ойлт, нэвтрүүлэлт, шингээлтийг тоцоолоход шингээлтийн хамгийн их утга 2.78% (MoSe₂) ба 1.62% (WSe₂) гэж тодорхойлогдсон. Энэ нь материалын зузаан маш бага тул кристаллд шингээгдэх эрчим бага байгаатай холбоотой.

ТАЛАРХАЛ

Энэхүү ажлыг ШУТСангийн “Нанохэмжээст вольфрам болон молибдений диселенид гарган авах судалгаа” (ШУС-2019/08) сэдэвт төслийн санхүүжилтээр гүйцэтгэсэн болно.

НОМ ЗҮЙ

- [1] R. F. Frindt and A. D. Yoffe, “Physical Properties of Layer Structures: Optical Properties and Photoconductivity of Thin Crystals of Molybdenum Disulphide,” Proc. R. Soc. Lond. A 273, 135269 (1963)
- [2] Geim, A. K; Novoselov, K. S. The rise of graphene. Nat.Mater. 2007, 6, 183–191.
- [3] Radisavljevic, B.; Radenovic, A.; Brivio, J.; Giacometti, V.; Kis, A. Single-layer MoS₂ transistors. Nat. Nanotechnol. **2011**, 6, 147–150.
- [4] Li, Y., Chernikov, A., Zhang, X., Rigosi, A., Hill, H. M., van der Zande, A. M., Heinz, T. F. (2014). Measurement of the optical dielectric function of monolayer transition-metal dichalcogenides: MoS₂, MoSe₂, WS₂, and WSe₂. Physical Review B, 90(20), 205422
- [5] Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. Теоретическая физика. Электродинамика сплошных сред. 2-е изд., испр. -М.: Наука. (т. VIII)
- [6] K. F. Mak, K. He, C. Lee, G. H. Lee, J. Hone, T. F. Heinz, and J. Shan, “Tightly bound trions in monolayer MoS₂,” Nature Mat. **12**, 207 (2013).
- [7] Zhang, H., Ma, Y., Wan, Y., Rong, X., Xie, Z., Wang, W., & Dai, L. (2015). Measuring the refractive index of highly crystalline