

光閉じ込めによる単層 MoS₂ の光吸収率の向上

Absorptivity enhancement of monolayer MoS₂ by light trapping strategy

東大先端研¹, エコール・ポリテクニーク² ○金 明玉¹, 謝 舟榮¹, Paul Jacquet², Antoine Faugère²,
橋本悠亮¹, 岡田至崇¹

RCAST, UTokyo¹, Ecole Polytechnique² °Myeongok Kim¹, Dangrong Xie¹, Paul Jacquet²,
Antoine Faugère², Yusuke Oteki¹, Yoshitaka Okada¹

E-mail: kim@mbe.rcast.u-tokyo.ac.jp

【はじめに】高い光吸収係数を持つ遷移金属ダイカルコゲナイド(TMDC)のMoS₂などは、1 nm以下の膜厚でも可視光域の光吸収率が10%程度あるが、フォトディテクター等の応用に向けてはより高い光吸収率が求められる[1]。そのため単層TMDCの特徴である直接遷移型を維持しながら光吸収率を向上させるための様々な方法が検討されている。特に金属ナノ粒子は、表面散乱、局在表面プラズモン共鳴、ホットキャリア注入などの効果によりTMDCの光吸収率が向上すると報告されている[2,3]。しかし金属ナノ粒子は様々なメカニズムでTMDCの光吸収率に影響を及ぼすことから、制御することは必ずしも容易でない。そこで本研究では、AuとPdナノ粒子が単層MoS₂の光吸収率に及ぼす影響を調べた。

【方法】本研究ではCOMSOLシミュレーションを用いて金属ナノ粒子による電場の増強が単層MoS₂の光吸収率に及ぼす影響を調べた。材料(Au及びPd)、ナノ粒子のサイズ(半径10~50 nm)及び表面被覆率(5~50%)を変えた場合の単層MoS₂の光吸収率を計算した。ナノ粒子間の相互作用とナノ粒子によるshadow effectを排除するため、一つのナノ粒子をMoS₂

の背面に配置しsurface coverageはunit cellの大ききさで調整した。

【結果と考察】系全体の光吸収率の向上は、材料に依存せずナノ粒子の半径50 nm、表面被覆率50%のときに最大であった。この光吸収率の増強は、金属ナノ粒子による局在表面プラズモン共鳴による電場の増強によると考えられるが、AuとPd NPの間では、大きな差は見られなかった。

【まとめ】金属ナノ粒子を配置することで単層MoS₂の光吸収率が増強するものの、局在表面プラズモン共鳴の効果は小さかった。今回、一つの金属ナノ粒子による周辺の電場の変化が光吸収に及ぼす影響を調べたが、多数のナノ粒子がある場合、またナノ粒子からのホットキャリア注入がある場合は考慮していない。これらが膜全体の光吸収率に及ぼす影響も今後検討が必要である。

【参考文献】

- [1] An et al., *Adv. Funct. Mater.* **32** (2022). 2110119.
[2] Dunklin et al., *ACS Photonics* **7** (2020). 197.
[3] Zeng et al., *Adv. Mater. Interfaces* **4** (2017). 1700739.

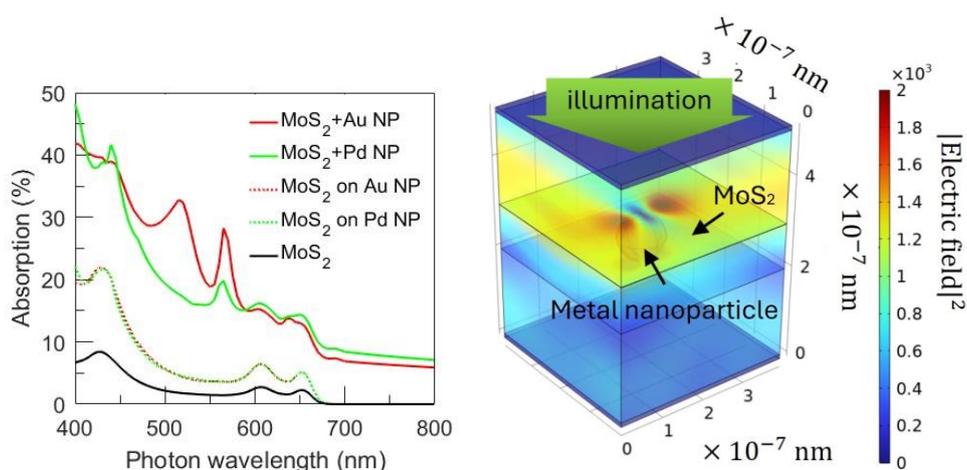


Figure 1. Comparison of absorption spectrum when nanoparticle (NP) radius is fixed at 50 nm at surface coverage of 5%. Solid red and green lines are absorption of total system. Dotted line indicates absorption of MoS₂ only. (Right) Example of one-dimensional calculation of electric field enhancement of air/MoS₂/NP/air model under illumination of 650 nm monochromatic light.