



## بررسی اثر ناخالصی آهن بر خواص اپتیکی لایه نازک اکسیدروی

طیبه صیادجنگلی<sup>۱</sup>، سیده ثریا موسوی<sup>۲</sup>، الهه معینی سده<sup>۱</sup>، بابک عفاقی<sup>۳</sup>، محمد حسین مجلس آرا<sup>۱\*</sup>

<sup>۱</sup> دانشکده فیزیک، دانشگاه خوارزمی

<sup>۲</sup> دانشکده فیزیک شیمی، دانشگاه الزهرا

<sup>۳</sup> دانشکده فیزیک، دانشگاه علم و صنعت

\*Majlesara@gmail.com

در این پژوهش لایه‌های نازک اکسیدروی خالص و آلائیده شده با درصد‌های مختلف ناخالصی آهن (۱٪-۳٪) روی زیرلایه شیشه به روش سل-ژل و لایه نشانی چرخشی تهیه و تاثیر غلظت ناخالصی بر گاف انرژی بررسی شده است. تصاویر میکروسکوپ الکترون روبشی، نانوذرات کروی با اندازه بین ۵۰-۶۰ نانومتر را نشان می‌دهند. طیف جذبی فرابنفش-مرئی همه نمونه‌ها جذب در طول موج‌های کمتر از ۴۰۰ نانومتر و عبوردهی حدود ۸۵٪ در ناحیه مرئی را برای اکسیدروی خالص نشان می‌دهد. همچنین مشاهده می‌شود که با افزایش غلظت ناخالصی، اندازه گاف انرژی کاهش می‌یابد.

کلید واژه- اکسیدروی آلائیده با آهن، خواص اپتیکی، گاف انرژی

## Influence of Fe-doping on the optical properties of ZnO thin films

T. Sayadjangali<sup>1</sup>, S. S. Mousavi<sup>2</sup>, E. Moeini sede<sup>1</sup>, B. Efaqi<sup>3</sup>, M. H. Majles Ara<sup>1\*</sup>

<sup>1</sup> Department of Physics, Kharazmi University, Tehran, 15719-14911, Iran.

<sup>2</sup> Department of Chemistry and Physics, Alzahra University, Tehran, Iran

<sup>3</sup> Department of Physics, Iran University of Science and Technology, Tehran, Iran

\* Majlesara@gmail.com

**Abstract:** In this work pure zinc oxide and Iron doped zinc oxide (Fe:ZnO) thin films were deposited on glass substrates through sol-gel followed by spin-coating technique with different concentration of dopant. Then optical properties of the thin films were characterized using UV-Vis spectroscopy. The SEM image, exhibit that the average grain size of the synthesized powder was around 50-60 nm and its spherical shape morphology was confirmed. UV-Vis analysis reveals that all samples had high UV absorbance at the wavelengths below 400 nm and with high transparency at visible region. Also it can be seen that the transparency of the pure ZnO in the visible wavelength was about 85%. Moreover there is a red shift in absorption edge with increasing the concentration of Fe dopant.

Keywords: Band gap, optical properties, ZnO-doped Fe

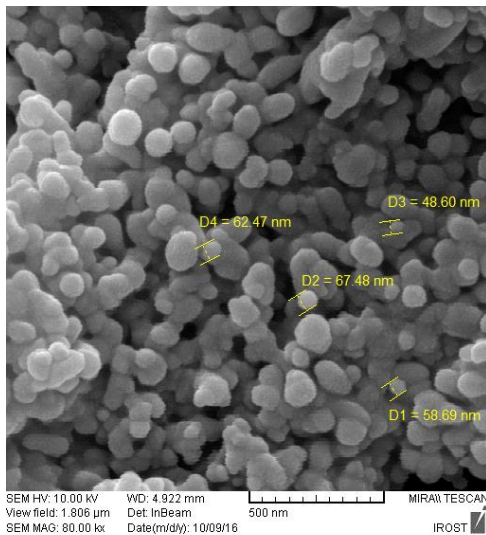
## مقدمه

همزده شدن، محلول شفاف و همگن قهوه‌ای رنگی به دست می‌آید. بعد از ۳۶ ساعت محلول برای لایه نشانی آماده است. پس از شستشوی زیرلایه بر اساس دستورهای استاندارد RCA، لایه‌نشانی به روش چرخشی روی آن انجام می‌شود. لایه‌های آماده شده را ابتدا در دمای ۶۰ درجه سانتیگراد به مدت ۶۰ دقیقه خشک کرده و سپس به مدت ۲ ساعت در دمای ۴۰۰ درجه سانتیگراد تحت عملیات حرارتی قرار می‌دهیم. در فرآیند سنتز محلول به روش فوق مشاهده شد که حد انحلال ناخالصی آهن در غلظت ۱ مولار اکسید روی ۳ درصد است و افزایش ناخالصی بیش از این مقدار منجر به ناپایداری محلول می‌شود.

با استفاده از طیف‌سنجی مرئی-فرابنفش طیف جذبی، عبوری و اندازه گاف انرژی لایه‌های نازک آلاییده با درصدهای مختلف آهن، اندازه گیری شدند.

## بحث و نتیجه‌گیری

شکل (۱) تصویر میکروسکوپ الکترون روبشی نانوذرات اکسیدروی آلاییده با آهن به روش مذکور را نشان می‌دهد. همانطور که در تصویر مشاهده می‌شود، اندازه متوسط ذرات بین ۵۰-۶۰ نانومتر است و کروی شکل هستند.



شکل (۱)- تصویر میکروسکوپ الکترون روبشی

طیف سنجی فرابنفش- مرئی

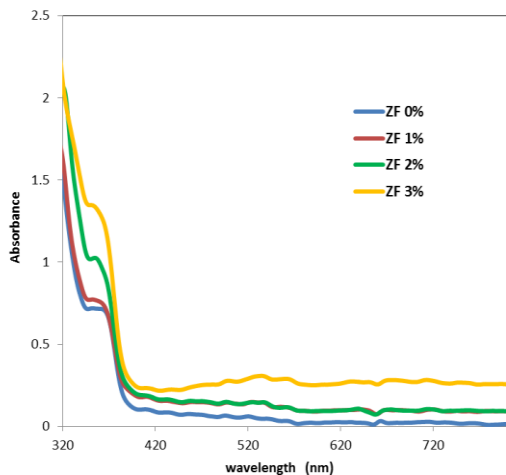
شکل (۲) طیف جذبی فرابنفش-مرئی لایه‌های نازک اکسیدروی آلاییده شده با آهن در درصدهای (۰، ۱، ۲، ۳ درصد اتمی) و ضخامت ۳۷۲/۴۳ نانومتر در دمای

امروزه نانوساختارهای اکسیدروی به دلیل داشتن ویژگی‌های منحصر بفرد فیزیکی و شیمیایی مورد توجه قرار گرفته‌اند. اکسیدروی نیمه‌رسانای ذاتی نوع n و دارای گاف انرژی مستقیم و پهن (۳/۳۷ eV) و انرژی اکسایشی بزرگ (۶۰ meV) در دمای اتاق است [۱]. از ویژگی‌های دیگر این ماده می‌توان به پایداری شیمیایی و گرمایی، مقرون به صرفه بودن و سازگاری با محیط زیست اشاره کرد. با توجه به ویژگی‌های اپتیکی و الکتریکی اکسیدروی، این ماده در فوتوکاتالیست‌ها، سلول‌های خورشیدی و انواع حسگرهای گازی، نوری، زیستی و ... کاربرد دارد [۲]. علاوه بر این آلاینش این ماده با عناصر دیگر می‌تواند منجر به بهبود هر چه بیشتر خواص آن شود. برای مثال از عناصر واسطه مانند Cu, Co, Ni, Fe به عنوان ناخالصی در اکسیدروی استفاده شده‌است. در این بین آهن به منظور بهبود خواص الکتریکی، اپتیکی و مغناطیسی مورد توجه بسیاری از پژوهشگران قرار گرفته است. لایه نازک اکسیدروی آلاییده شده با آهن به روش‌های مختلفی مانند سل‌ژل، PLD، روش هم‌رسوبی، کندوپاش و spray-pyrolysis تهیه شدند [۳]. در مقایسه با روش‌های دیگر روش سل-ژل به سبب سادگی، مقرون به صرفه بودن، نیاز نداشتن به خلا، دمای مورد نیاز پایین، امکان تولید انبوه، تهیه محصولاتی با خلوص بالا روش مناسبی به شمار می‌رود [۴]. در این پژوهش لایه‌های نازک اکسیدروی آلاییده شده با آهن به روش سل ژل و لایه نشانی چرخشی تهیه و با طیف سنجی فرابنفش-مرئی و میکروسکوپ الکترون روبشی مشخصه یابی شدند.

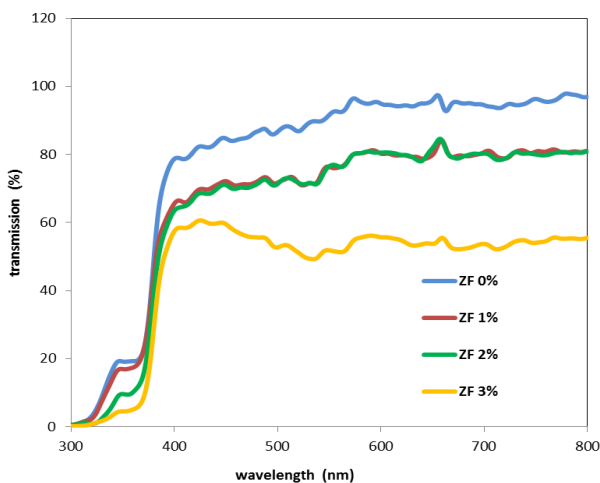
## روش آزمایشگاهی

برای تهیه سل ۱ مولار اکسیدروی آلاییده با آهن (ZF) با غلظت (۰، ۱، ۲، ۳ درصد اتمی) زینک استات دوآبه، نیترات آهن ۹ آبه، اتانول و تری اتیل آمین به ترتیب به عنوان پیش ماده اصلی، ماده ناخالصی، حلال و سورفکتانت استفاده شدند. ابتدا زینک استات را در محلول اتانول و تری اتیل آمین حل کرده و به مدت ۲۰ دقیقه هم زده می‌شود. محلول شامل نیترات آهن و اتانول را که به مدت ۱۰ دقیقه هم زده شده بود را به محلول زینک استات اضافه کرده و بعد از ۴ دقیقه

میزان ناخالصی رسم شد با توجه به شکل (۴) پیداست که با افزایش میزان ناخالصی گاف انرژی کاهش یافته و انتقال جذب به سمت طول موج‌های بزرگتر (انتقال سرخ) به وضوح مشاهده می‌شود. مقادیر دقیق اندازه گاف با غلظت‌های مختلف ناخالصی در جدول (۱) آمده است.



شکل (۲)- طیف جذبی لایه‌های اکسیدروی آلاییده یا درصدی مختلف



شکل (۳)- طیف عبوری لایه‌های اکسیدروی آلاییده با درصدی مختلف ناخالصی

اتاقی را نشان می‌دهد. با توجه به این شکل دیده می‌شود که بیشینه جذب لایه‌ها در محدوده ۳۵۰-۳۷۰ نانومتر صورت می‌گیرد. همچنین با افزایش غلظت ناخالصی، شدت بیشینه افزایش می‌یابد که می‌تواند مربوط به افزایش نقوص شبکه با افزایش ناخالصی باشد [۵]. بیشترین جذب مربوط به لایه اکسید روی با غلظت آهن ۳٪ و در ۳۵۱ نانومتر است که این نتیجه موید آن است که افزایش یون‌های آهن، ساختار الکترونیکی اکسیدروی را تغییر داده است [۶]. همچنین مشاهده می‌شود که با افزایش غلظت، قله جذب به سمت طول موج‌های بلندتر می‌رود و انتقال به سرخ داریم، این نتیجه در پژوهش‌های مشابه که با روش‌های دیگر صورت گرفته است نیز مشاهده شده است [۲،۷،۸]. شکل (۳) طیف عبوری لایه‌های نازک را نشان می‌دهد. همانطور که از شکل پیداست با افزایش ناخالصی شدت نور عبوری از نمونه‌ها به تدریج کاهش می‌یابد. در غلظت‌های کمتر از ۳٪ ناخالصی، عبوردهی تا ۸۵٪ در ناحیه مرئی از ویژگی منحصر بفرد لایه‌ها است. طیف عبوری در غلظت ۳٪ نسبت به سایر نمونه‌ها شدت کمتری دارد که نشان از جذب بیشتر بواسطه وجود گذار از ترازهای ناشی از نقایص شبکه بواسطه افزایش ناخالصی این لایه دارد. این امر با توجه به کاهش پایداری محلول مورد استفاده برای لایه‌نشانی با افزایش ناخالصی و مشاهده حد انحلال ۳ درصد قابل پیش‌بینی است.

گاف انرژی نمونه‌ها از رابطه Tauc (۱) به دست آمد [۲].

$$(1) \quad (ahv)^2 = B(hv - E_g)$$

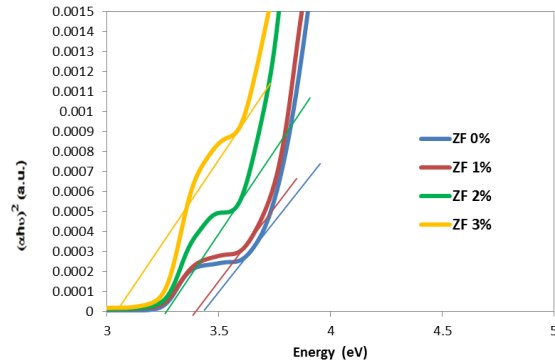
$$(2) \quad \alpha = (2.303 \times A) / T$$

که در آن  $\alpha$  ضریب جذب و  $B$  ثابت عددی و  $h\nu$  انرژی فوتون تابیده شده و  $E_g$  گاف انرژی است. از رابطه (۲)، ضریب جذب را به دست آوردیم که در آن  $A$  جذب و  $T$  ضخامت لایه است [۸].

با رسم نمودار  $(ahv)^2$  بر حسب  $h\nu$  در مقیاس الکترون-ولت و به دست آوردن محل تلاقی خط مماس بر منحنی بر محور انرژی می‌توان انرژی گاف را به دست آورد. لذا تغییرات گاف انرژی بر حسب افزایش

## مراجع:

- [1] M. Willander, *Optical Properties of and Optical Devices from ZnO-Based Nanostructures*. 2014.
- [2] M. A. Ciciliati, M. F. Silva, D. M. Fernandes, M. A. C. De Melo, A. Adelina, W. Hechenleitner, and E. A. G. Pineda, "Fe-doped ZnO nanoparticles: Synthesis by a modified sol-gel method and characterization," vol. 159, pp. 84-86, 2015.
- [3] A. P. Rambur, V. Nica, and M. Dobromir, "Superlattices and Microstructures Influence of Fe-doping on the optical and electrical properties of ZnO films," *Superlattices Microstruct.*, vol. 59, pp. 87-96, 2013.
- [4] L. Xu and X. Li, "Influence of Fe-doping on the structural and optical properties of ZnO thin films prepared by sol-gel method," *J. Cryst. Growth*, vol. 312, no. 6, pp. 851-855, 2010.
- [5] A. Goktas, I. H. Mutlu, and Y. Yamada, "Superlattices and Microstructures Influence of Fe-doping on the structural, optical, and magnetic properties of ZnO thin films prepared by sol-gel method," *Superlattices Microstruct.*, vol. 57, pp. 139-149, 2013.
- [6] C. B. and A. Punnoose J.J. Beltran, "Understanding the role of Iron in the magnetism of Fe-doped ZnO nanoparticle," *Russian Soc. Chem.*, 2015.
- [7] M. M. Hassan, A. S. Ahmed, M. Chaman, W. Khan, A. H. Naqvi, and A. Azam, "Structural and frequency dependent dielectric properties of Fe<sup>3+</sup> doped ZnO nanoparticles," *Mater. Res. Bull.*, vol. 47, no. 12, pp. 3952-3958, 2012.
- [8] P. Sharma, K. Sreenivas, and K. V. Rao, "Analysis of ultraviolet photoconductivity in ZnO films prepared by unbalanced magnetron sputtering," vol. 3963, 2003.



شکل (۴)- نمودار گاف انرژی لایه‌های اکسیدروی آلانید با درصد‌های مختلف

جدول (۱)- اندازه گاف انرژی با درصد‌های مختلف

درصد ناخالصی (at.%)	اندازه گاف (eV)
۰	۳/۴۴
۱	۳/۴۰
۲	۳/۲۶
۳	۳/۰۵

## نتیجه گیری

لایه‌های نازک اکسیدروی آلانید شده با آهن با درصد‌های مختلف ناخالصی (۰٪-۳٪) به روش سل-ژل تهیه شدند و خواص اپتیکی آن‌ها بررسی شد. نتایج نشان می‌دهد که با افزایش ناخالصی گاف کاهش می‌یابد. در ۳٪ ZF گاف به شدت کاهش یافته که می‌تواند مربوط به حد انحلال آهن و تغییر در ساختار اکسیدروی باشد.