



بیست و هفتمین کنفرانس اپتیک و فوتونیک ایران و سیزدهمین کنفرانس مهندسی و فناوری فوتونیک ایران، دانشگاه سیستان و بلوچستان،



زاهدان، ایران. ۱۴-۱۶ بهمن ۱۳۹۹

کد مقاله : ۱-۲۵۶۶-۱۰-A

پنجره های هوشمند بر مبنای فیلم دی اکسید وانادیم- بررسی رفتار هیستریزیس گذار رسانایی - نیمه رسانایی ترموکرومیک با ضخامت فیلم

مهراد سهرابی، محمدحسین مهدیه

تهران ، نارمک دانشگاه علم و صنعت ایران ، دانشکده فیزیک

چکیده- دی اکسید وانادیم ماده ای است که با تغییرات دما، تغییرات چشمگیری در ویژگی های اپتیکی (عبور و انعکاس) این ماده ایجاد می شود. این خاصیت ترموکرومیک در دی اکسید وانادیم باعث شده است که از آن در طراحی پنجره های هوشمند استفاده شود. در این تحقیق، رفتار گذار فیلمهای نازک پلی کریستال دی اکسید وانادیم بر روی زیر لایه شیشه BK7 (بصورت یک منحنی هیستریسی) شبیه سازی شده است. در این بررسی وابستگی نسبی ضخامت به ویژگی های گذار نیمه رسانا به فلز (SMT) و شکل هیستریزیس توسط مدل های مختلف نظری محیط موثر مطالعه شده است. نتایج نشان داده اند استفاده از یکی از مدل ها (تحت عنوان مدل ماکسول گارنت اصلاح شده) نتایج دقیقتری برای گذار خنک سازی در گستره ضخامت نانو مقیاس فیلم ارائه می دهد. در نتیجه در این تحقیق بهینه سازی طیف عبوری وابسته به دما از شیشه های هوشمند ترموکرومیک به وسیله ی ضخامت وانادیم دی اکسید مورد توجه قرار گرفته است.

کلید واژه- دی اکسید وانادیم، گذار نیمه رسانا به فلز، نظریه محیط موثر، تابع توزیع بولتزمن، شیشه های هوشمند

Vanadium dioxide film based smart windows – Investigation of thermochromics hysteresis transition with film thickness

Mehrad Sohrabi¹, Mohammad Hossein Mahdich²

Department of Physics, Iran University of Science and Technology, Narmak, Tehran, Iran

1 mahdm@iust.ac.ir, 2 sohrabi1995@gmail.com

Abstract-Vanadium dioxide (VO₂) is a material that with variation of temperature. Hence by variation the environment temperature induces impressive changes in optical properties of VO₂. Such characteristics of VO₂ makes it a good candidate for designing thermochromics smart windows. In this research, a polycrystalline VO₂ thin film was assumed to be coated on BK7 glass substrates and its semiconductor-conductor transition (hysteresis characteristics) was simulated numerically. In this study by using 5 different models, the relative thickness dependence of the hysteresis semiconductor-metal transition (SMT) characteristics were investigated. The results show that one of these models (Known as modified Maxwell Garnet theory) gives more accurate results at nanoscale thicknesses. The results of these investigations lead in optimization of the VO₂ thickness and its temperature dependence transmission spectrum.

Keywords: Vanadium dioxide; Semiconductor to metal transition; Effective medium theory; Boltzmann function distribution; Smart windows

مقدمه

مربوط به گذار نیمه رسانا - رسانا، از دو قسمت : گرمایشی (Heating) و خنک سازی (Cooling)، تشکیل شده است. در مدل های معرفی شده برای هردو گذار سرمایش و گرمایش، از یک روابط ریاضی استفاده می کند. برای بالا بردن دقت محاسبات، مدل ماکسول گارنت اصلاح شده (MMG) معرفی شده است که برای این هریک از گذارهای سرمایش و گرمایش، روابط ریاضی جداگانه تعریف کرده است. به همین دلیل این مدل نسبت به مدل های قبلی، نتایج دقیق تری را برای حالت خنک سازی می دهد [۸]. در گذار نیمه رسانا به فلز، ویژگی های مختلف گذار، هنگام گرمایش و خنک سازی، حتی در یک دما با همدیگر متفاوت است. مدل سازی گذار فاز و همچنین شکل منحنی هیستریزس در طراحی وسایل الکتریکی و اپتیکی بسیار مهم است. از این رو یافتنیک مدل نظری برای پیش بینی دقیق شکل هیستریزس دارای اهمیت به سزایی می باشد. در این تحقیق، مدل های که در سال های اخیر برای مدل سازی شکل هیستریزس اپتیکی فیلم و انادیم دی اکسید استفاده شده است به طور کامل مورد بررسی قرار گرفته شده است. با مقایسه نتایج محاسبات با نتایج تجربی، مناسب ترین مدل ها با در نظر گرفتن خصوصیات اپتیکی وابسته به دما در گستره بزرگی از ضخامت برای دی اکسید و انادیم تعیین شده است. نتایج این تحقیق اطلاعات مفیدی را برای طراحی با راندمان بالای پنجره های هوشمند بر مبنای دی اکسید و انادیم فراهم کرده است.

روش محاسبات

همانگونه که ذکر شد، منحنی هیستریزس گذار نیمه رسانا به فلز با استفاده از مدل های مختلف نظری محیط موثر بررسی می شود. این مدل ها در جدول (۱) ارائه شده است. پارامتر های مهم برای استفاده از این مدل ها، ثابت دی الکتریک فاز نیمه رسانا و ثابت دی

دی اکسید و انادیم (VO_2) به عنوان یک ماده هوشمند ترموکرومیک برای طیف گسترده ای از کاربردهای عملی ثابت شده است، زیرا تحت یک گذار ناگهانی فاز برگشتپذیر در دما بحرانی ($T_c \sim 341K$) معروف به گذار مرتبه اول از نیمه رسانا به فلز و فلز به نیمه رسانا می باشد [۱]. دی اکسید و انادیم در دمای زیر دمای T_c در حالت فاز نیمه رسانا با ساختار (مونوکلینیکی) است. در دمای بالاتر از دمای T_c ، دی اکسید و انادیم در حالت فاز فلزی با ساختار (تتراگونال) قرار دارد [۲]. با استفاده از این ویژگی های منحصر به فرد و برجسته، فیلم و انادیم دی اکسید برای طیف گسترده ای از کاربردهای بالقوه مورد مطالعه قرار گرفته است [۳]. از کاربردهای مهم فیلم دی اکسید و انادیم می توان مواردی نظیر پنجره های هوشمند [۴] و مواد دارای حافظه [۵] را نام برد.

با استفاده از مدل های نظری تحت عنوان "مدل محیط موثر"، رفتار گذار نیمه رسانا به فلز (SMT) در دی اکسید و انادیم مورد بررسی قرار داده می شود. محیط موثر ماکسول گارنت (MG)، اجزای فلزی را کروبو با فاصله کم در یک ماتریس فرض می کند. در مدل دیگری به نام محیط موثر بروگمن (BR)، اجزای فلزی را کرووی و البته با فاصله زیاد در نظر می گیرد. علاوه بر این مدل ها، مدل دیگری به نام مدل لوبینکا (L)، با وجود ویژگی های دو مدل قبل، پارامتر شکل را نیز در نظر می گیرد و نتایج دقیق تری (بر اساس شکل ماده مورد بررسی) را نسبت به دو مدل قبلی فراهم می کند [۶]. مدل موثر خطی، نسبت به تمام مدل های استفاده شده ساده تر می باشد و اخیراً برای توضیح (SMT) در فیلم و انادیم دی اکسید به کار برده شده است [۷]. خواص اپتیکی و الکترونیکی عبارت دیگر گذار نیمه رسانا به فلز در دی اکسید و انادیم به وسیله ی منحنی ای تحت عنوان منحنی هیستریزس تعیین می شود. لازم به ذکر است که منحنی هیستریزس

اکسید وانادیم d و ضریب شکست آنمختلط می باشد که بر روی زیرلایه ای با ضریب شکست مختلط پوشش داده شده است. بنابراین طیف عبوری (T) از هوا - فیلم - زیرلایه محاسبه می گردد. عبور و انعکاس با استفاده از روابط دقیق اپتیک موجی محاسبه می گردد. در شرایطی که جذب در زیر لایه ممکن است قابل توجه باشد، از معادله هوین (Heavens) برای عبور از این ساختار استفاده شده است [۱۰].

بحث

منحنی گذار بخصوص برای محاسبه طیف عبوری منبع نور در دماهای مختلف ضروری است. در مدل های فیزیکی معرفی شده اغلب از لگاریتم مقاومت (بصورت تابعی غیر خطی از دما) استفاده شده است. در بررسی هایی انجام شده نشان داده شده است که در مقایسه با داده های اپتیکی (به خصوص عبور بر حسب دما)، داده های مقاومت الکتریکی وابستگی های مشابهی از دمای گذار و پهنای گذار بر حسب تابعی از ضخامت وجود دارد [۹]. به همین دلیل در این تحقیق برای پارامتر های دمای گذار و پهنای گذار، داده های اپتیکی از فعالیت های قبلی استخراج و مورد استفاده قرار گرفته اند. نهایتاً از پنج مدل بکار گرفته شده، برای پیش بینی شکل هیستریزس گذار برای عبور وابسته به دمای دی اکسید وانادیم پلی کریستال با ده ضخامت (جدول ۲) استفاده شده است [۹؛ ۱۱]. شکل (۱-الف) نتایج آزمایشگاهی عبور وابسته به دما و شکل (۱-ب) نتایج شبیه سازی شده باهمان شرایط آزمایشگاهی را نشان می دهند. در این شکل ها طول موج نور ۲۵۰ نانومتر و ضخامت دی اکسید وانادیم ۹۰ نانومتر (پوشش برشیشه BK7) فرض شده است.

الکترونیک فاز فلزی دی اکسید وانادیم می باشد که به ترتیب ϵ_m و ϵ_s معرفی می شوند. برای دو پارامتر بالا، از داده های با دقت آزمایشگاهی بالا استفاده شده است [۷]. در مدل های معرفی شده در جدول (۱)، $f(T)$ تابع توزیع می باشد، که با استفاده از مدل های ترمودینامیکی مختلفی نظیر: تابع توزیع فرمی دیراک [۷]، تابع توزیع موازنه مرتبه اول [۶]، و تابع توزیع بولتزمن [۸] توصیف شده است. طبق تعریف، $f(T)$ کسری از حجم دی اکسید وانادیم در یک کره می باشد که در دمای T و در فاز فلزی قرار داد. هنگامی که $f(T)=0$ باشد، یعنی این ماده به طور کامل در فاز نیمه رسانا قرار دارد. اگر $f(T)=1$ باشد یعنی این ماده به طور کامل در فاز فلزی قرار دارد. لازم به ذکر است که پارامتر های لازم برای تابع توزیع بولتزمن در اکثر تحقیقات قبلی وجود دارد. همچنین این تابع توزیع، نتایج بسیار خوبی در استفاده از مدل های معرفی شده در جدول (۱) ارائه کرده است. به همین دلیل در این تحقیق از تابع توزیع بولتزمن استفاده شده است. مدل ریاضی این تابع با رابطه (۱) توصیف می گردد:

$$f \quad (1)$$

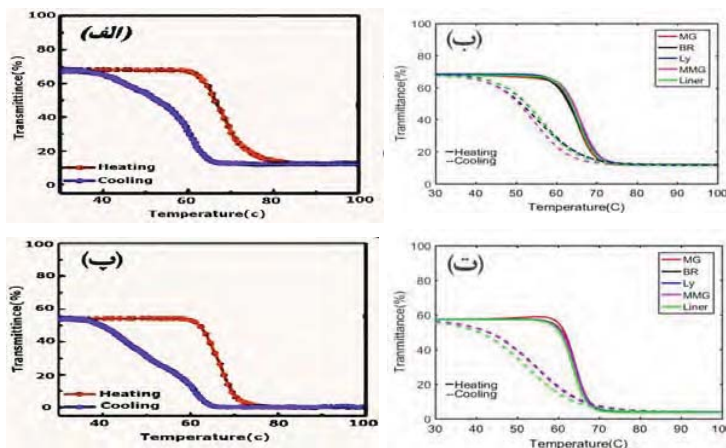
در رابطه (۱)، پارامتر $f_{max} = 1$ و کسری از حجم فلز در بالاترین دما می باشد. خواص اپتیکی گذار نیمه رسانا به فلز در وانادیم دی اکسید به وسیله شیب منحنی هیستریزس (ΔT) و دمای گذار (T_{SMT}) تعیین می شود. که از روش گاوسی برای تعیین این پارامتر ها استفاده شده است. در روش گاوسی، با لگاریتم گیری از مشتق داده های اپتیکی نسبت به دما (از جمله عبور) یک شکل گاوسی حاصل خواهد شد، که دمای گذار (T_c) قله منحنی گاوسی و شیب گذار (ΔT)، FWHM منحنی گاوسی می باشد [۹]. پرتو فرودی بر فیلم دی اکسید وانادیم با طول موج (λ) فرض می شود که از یک محیط غیر جذب کننده تابیده می شود. ضخامت فیلم دی

جدول (۱): مدل های نظری محیط موثر و روابط آنها

مدل	رابطه	مدل	رابطه
Looyenga	$\varepsilon_{eff}^L = \sqrt[3]{(1-f)\varepsilon_s^{1/3} + f\varepsilon_m^{1/3}}$	Liner	$\varepsilon_{eff}^{Liner} = (1-f)\varepsilon_s + f\varepsilon_m$
Modified Maxwell Garnett	$\varepsilon_{eff,h} = \varepsilon_s \frac{\varepsilon_m(1+2f) + \varepsilon_s(2-2f)}{\varepsilon_m(1-f) + \varepsilon_s(2+f)}$ $\varepsilon_{eff,c} = \varepsilon_m \frac{\varepsilon_m * 2f + \varepsilon_s(3-2f)}{\varepsilon_m(3-f) + \varepsilon_s * f}$	Maxwell Garnett	$\varepsilon_{eff}^{MG} = \varepsilon_s \frac{\varepsilon_m(1+2f) - \varepsilon_s(2f-2)}{\varepsilon_m(1-f) + \varepsilon_s(2+f)}$
Bruggeman	$\varepsilon_{eff}^{BR} = \frac{1}{4} \{ \varepsilon_s(2-3f) + \varepsilon_m(3f-1) + \sqrt{\varepsilon_s(2-3f) + \varepsilon_m(3f-1) + 8\varepsilon_s\varepsilon_m} \}$		

جدول (۲): تناسب محیط موثر نسبت به ضخامت مختلف

ضخامت (نانومتر)	محیط موثر مناسب	ضخامت (نانومتر)	محیط موثر مناسب
۱۸	MMG(best)-MG-BR-L-Liner	۱۸۰	MMG(best)-MG-BR-L-Liner
۳۰	MMG(best)-MG-BR-L-Liner	۲۷۰	MMG(best)-MG-BR-L-Liner
۴۴	MMG(best)-MG-BR-L-Liner	۳۶۰	MMG-MG-BR-L-Liner
۶۰	MMG(best)-MG-BR-L-Liner	۴۵۰	MMG-MG-BR-L-Liner
۹۰	MMG(best)-MG-BR-L-Liner	۵۴۰	MMG-MG-BR-L-Liner



شکل (۱): مقایسه ی نتایج تجربی و شبیه سازی شده برای عبور وابسته به دما برای طول موج ۲۵۰۰ نانومتر دی اکسید وانادیم بر روی شیشه BK7 (الف) ۹۰ نانومتر آزمایشگاهی (ب) ۹۰ نانومتر شبیه سازی شده (پ) ۳۶۰ نانومتر آزمایشگاهی (ت) ۳۶۰ نانومتر شبیه سازی شده

اطلاعات شکل (۱-پ) نشان می دهد که دی اکسید وانادیم با ضخامت ۳۶۰ نانومتر (با مدل های مختلف محیط موثر) خطای کمی رانسبت به داده های

اطلاعات دو شکل نشان می دهند که برای این ضخامت، داده های شبیه سازی شده (با مدل های مختلف محیط موثر)، تطابق خوبی با نتایج آزمایشگاهی دارد. اما

ضخامت مفید می باشد.

مرجع

- [1] J. Nag, R. Haglund Jr, "Synthesis of vanadium dioxide thin films and nanoparticles", *Condens. Matter Phys.*, Vol.20, No.26, pp.264016,2008.
- [2] N.B. Aetukuri, A.X. Gray, M. Drouard, et al., "Control of the metal-insulator transition in vanadium dioxide by modifying orbital occupancy", *Nat. Phys.*, Vol.9, No.10, pp.661-666,2013.
- [3] J. Bian, L. Miao, S. Zhao, et al., "Vanadium oxide films deposited on sapphire substrate with in situ AlN stress layer: structural, electric, and optical properties", *J. Mater. Sci.*, Vol.50, No.17, pp.5709-5714,2015.
- [4] J. Zhou, Y. Gao, Z. Zhang, et al., "VO₂ thermochromic smart window for energy savings and generation", *Sci. Rep.*, Vol.3, No.1, pp.1-5,2013.
- [5] T. Driscoll, H.-T. Kim, B.-G. Chae, et al., "Memory metamaterials", *Science*, Vol.325, No.5947, pp.1518-1521,2009.
- [6] C. Wan, Z. Zhang, D. Woolf, et al., "On the Optical Properties of Thin-Film Vanadium Dioxide from the Visible to the Far Infrared", *Ann. Phys.*, Vol.531, No.10, pp.1900188,2019.
- [7] M. Currie, M.A. Mastro, V.D. Wheeler, "Characterizing the tunable refractive index of vanadium dioxide", *Opt. Mater. Express*, Vol.7, No.5, pp.1697-1707,2017.
- [8] J.D. Frame, N.G. Green, X. Fang, "Modified Maxwell Garnett model for hysteresis in phase change materials", *Opt. Mater. Express*, Vol.8, No.7, pp.1988-1996,2018.
- [9] M. Currie, V.D. Wheeler, B. Downey, et al., "Asymmetric hysteresis in vanadium dioxide thin films", *Opt. Mater. Express*, Vol.9, No.9, pp.3717-3728,2019.
- [10] S. Tomlin, "Optical reflection and transmission formulae for thin films", *J. Phys. D: Appl. Phys.*, Vol.1, No.12, pp.1667,1968.
- [11] Y. Yang, X. Cao, G. Sun, et al., "Transmittance change with thickness for polycrystalline VO₂ films deposited at room temperature", *J Alloys Compd.*, Vol.791, pp.648-654,2019.

آزمایشگاهی در شکل (۱-ت) داشته است. این نتایج نشان می دهند که ضخامت های بالاتر از ۲۷۰ نانومتر، در صد خطای بیشتری رانست به ضخامت های پایین تر دارند به علاوه با توجه به اطلاعات جدول (۲) ، می توان نتیجه گرفت که استفاده از مدل "محیط موثر ماکسول گارنت اصلاح شده" برای تمام ضخامت ها مناسب تر است. به علاوه به دلیل اینکه این مدل برای گذار حالت گرمایشی (heating) و گذار خنک سازی (cooling) تفکیک شده است ، استفاده از آن منجر نتایج دقیق تری برای حالت خنک سازی شده است.

نتیجه گیری

در این تحقیق رفتار گذار نیمه رسانا-رسانا در پلی کریستال دی اکسید وانادیم (پوشش شده بر روی شیشه Bk7) با تغییرات دما بررسی شد. در این تحقیق تاثیر ضخامت های متفاوت پوشش در نتایج مورد بررسی قرار گرفت و طیف عبوری نور از این ساختار با استفاده ازینج مدل نظری محیط موثر شبیه سازی شده است . با مقایسه داده های شبیه سازی شده با نتایج آزمایشگاهی نتیجه گیری شده است، که مدل ماکسول گارنت اصلاح شده نتایج بهتری بخصوص برای حالت خنک سازی برای ضخامت های پایین تر از ۲۷۰ نانومتر را فراهم می کند. همچنین نتیجه گرفته شد که برای ضخامت های بالای ۲۷۰ نانومتر این مدل ها خطای بیشتری را نسبت به ضخامت های پایین از ۲۷۰ نانومتر ایجاد می کنند. دلیل این خطا ممکن است به دلیل استفاده از داده های مربوط به ضریب شکست فیلم باشد. در واقع تحقیقات نشان داده است که ضریب شکست در لایه های بسیار نازک (کمتر از ۱۰۰ نانومتر)، تابعی از ضخامت فیلم می باشد و دارای مقدار ثابت نیست. نتایج این تحقیق برای طراحی پنجره های هوشمند و بهینه سازی طیف عبوری وابسته به دما در شیشه های ترموکرومیک براساس