



بیست و یکمین کنفرانس اپتیک و فوتونیک ایران
و هفتمین کنفرانس مهندسی و فناوری فوتونیک ایران
۲۳ تا ۲۵ دی ماه ۱۳۹۳، دانشگاه شهید بهشتی



افزایش گاف اپتیکی نانو ساختارهای سیلیکون کارباید با ایجاد تغییرات سطحی

محمد مردانی، نسترن منصور، الهام شیخی و مصطفی پورامینی*

گروه فیزیک دانشگاه شهید بهشتی، اوین، ۱۹۸۳۹۶۹۴۱۱۳، تهران، ایران

* گروه شیمی دانشگاه شهید بهشتی، اوین، ۱۹۸۳۹۶۹۴۱۱۳، تهران، ایران

چکیده - در این کار تحقیقاتی، پیوندهای Si-O و C-O بر روی سطح نانو ساختارهای سیلیکون کارباید با ابعاد حدود ۵۰ نانومتر توسط بازپخت و حکاکی شیمیایی تشکیل شده است. حضور این پیوند ها توسط طیف تبدیل فوریه مادون قرمز (FTIR) مورد تایید قرار گرفته است. همچنین طیف فرابنفش - مرئی کلوئید، افزایش گاف انرژی نانو ساختارهای سیلیکون کارباید را نشان می دهد. پیوند C-O باندازه ۰.۵۸ الکترون ولت گاف اپتیکی نانو ساختارهای سیلیکون کارباید را افزایش داده است. پیوندهای Si-O و C-O نیز گاف اپتیکی این نانو ساختارها را ۰.۸۷ الکترون ولت افزایش داده اند. خواص اپتیکی مشاهده شده در نانو ساختارهای سیلیکون کارباید، این مواد را گزینه با ارزشی برای ساختن دیود های گسیل نوری و لیزرها می نماید.

کلید واژه - نانوکریستال های سیلیکون کارباید، تغییرات سطحی، پیوند C-O، پیوند Si-O، افزایش گاف اپتیکی.

Enhanced Optical Band Gap of Silicon Carbide Nanostructures by Surface Modification

Mohammad Mardani, Nastaran Mansour, Elham Sheykhi and Mostafa Pouramini*

Physics Department, Shahid Beheshti University, Evin, 19839694113, Tehran, Iran

* Chemistry Department, Shahid Beheshti University, Evin, 19839694113, Tehran, Iran

Corresponding Author E-mail: n-mansour@sbu.ac.ir

Abstract- In this research work, Si-O and C-O bonds are formed on the surface of the 50 nm sized silicon carbide (SiC) nanostructures using thermal annealing and chemical etching. Fourier transform infrared spectroscopy (FTIR) confirmed the surface bond formations on the SiC nanostructures. UV-visible absorption spectroscopy shows an increase in the optical band gap of the nanostructures about 0.58 eV due to C-O bond. The increase in the optical band gap about 0.87 eV is achieved when the nanostructures surface is modified by the both Si-O and C-O bonds. The observed optical properties corroborate the potential of the silicon carbide nanostructures in UV light emitting diodes and lasers.

Keywords: silicon carbide nanostructures, surface modification, C-O bond, Si-O bond, band gap enhancement.

۱- مقدمه

در سال های اخیر گزارش های متعددی در ارتباط با تغییر گاف انرژی نانو ساختارهای سیلیکون با افزودن پیوندهای سطحی از قبیل اکسیژن، هیدروژن، گروه عاملی هیدروکسیلی و غیره داده شده است [۱]. نیمه هادی سیلیکون کاربرد باتوجه به پایداری حرارتی بالا، گزینه خوبی برای ساخت وسایل اپتوالکترونیکی و فوتونیکی می باشد. از طرفی افزایش گاف انرژی این نانو ساختار ها برای ساخت وسایل دیودهای گسیلنده نوری در ناحیه نور آبی مورد توجه خاصی قرار گرفته است. افزایش گاف انرژی توسط پیوندهای سطحی بر روی نانو ساختار سیلیکون کاربرد روش مناسبی برای انجام این کار است.

در این گزارش، تغییراتی بر سطح نانو ساختار های سیلیکون کاربرد به روش حکاکی شیمیایی و باز پخت اعمال شده است. تشکیل پیوندهای C-O و Si-O روی سطح نانو ساختار ها ی سیلیکون کاربرد مورد مطالعه قرار گرفته و تغییر گاف انرژی پس از تشکیل این پیوند ها بررسی شده است.

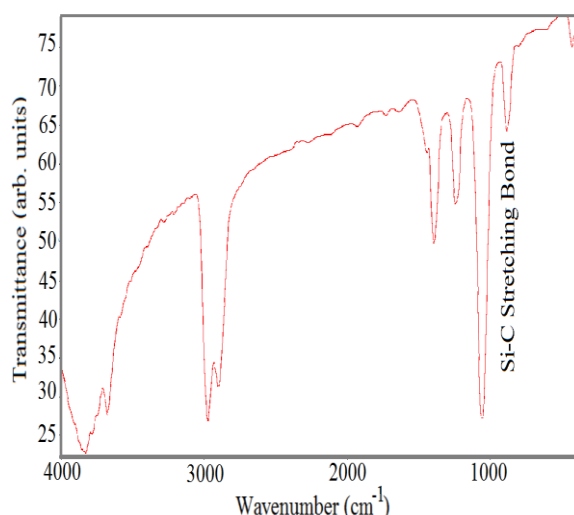
۲- روش ایجاد تغییرات سطحی بر روی

نانو ساختارهای سیلیکون کاربرد

نانوپودر سیلیکون کاربرد با ابعاد حدود ۵۰ نانومتر به طور تجاری خریداری شده است. برای تغییرات سطحی روش بازپخت و حکاکی شیمیایی به کار گرفته شده است. حکاکی شیمیایی در محلول اتانول و اسید هیدروفلوریک به نسبت ۱ به ۳ صورت گرفته است. پس از پراکنده نمودن نانوذرات در این ترکیب، نمونه را به مدت ۲ ساعت در حمام فراصوتی قرار داده و سپس با استفاده از سانتریفیوژ نانوذرات موجود در آن جدا شده است. پس از شستن نانوذرات با آب ۲ بار تقطیر و خشک نمودن آن، نانوذرات در اتانول پراکنده شده است. فرایند بازپخت بر روی نانو ذرات در دمای ۹۰۰ درجه در کوره ی دیجیتالی در حضور گاز اکسیژن به مدت ۲ ساعت انجام شده است. تشکیل پیوندهای سطحی توسط طیف سنج تبدیل فوریه مادون قرمز مورد بررسی قرار گرفته و طیف جذبی کلئوئید توسط طیف سنج فرابنفش- مرئی اندازه گیری شده و تغییر گاف انرژی مشاهده شده است.

۳- نتایج و بحث

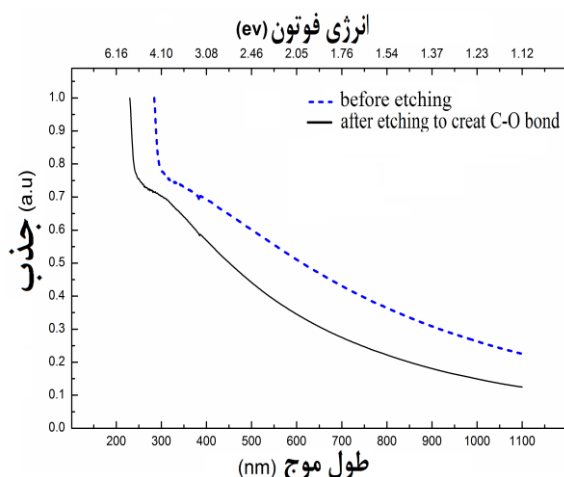
شکل ۱ طیف تبدیل فوریه مادون قرمز نانو ساختارهای سیلیکون کاربرد در محیط اتانول را نشان می دهد. مطابق این شکل، بیشینه جذبی در فرکانس 888 cm^{-1} برای نانو ساختارهای سیلیکون کاربرد مشاهده شده است که مربوط به باند ارتعاشی خطی Si-C می باشد [۲].



شکل ۱: نمودار طیف تبدیل فوریه مادون قرمز نانو ساختارهای سیلیکون کاربرد در محیط اتانول.

تشکیل پیوند C-O پس از انجام حکاکی شیمیایی توسط طیف تبدیل فوریه مادون قرمز مورد تایید قرار گرفته است (شکل ۲). بیشینه جذبی در فرکانس 1726 cm^{-1} به پیوند C-O نسبت داده شده است [۲]. بیشینه های موجود در 1070 ، 1252 ، 1397 ، 2900 ، 2968 cm^{-1} و 3670 cm^{-1} که در هر دو شکل ۱ و ۲ مشترک هستند مربوط به پیوند اتم های اتانول خالص هستند و به ترتیب مربوط به پیوند C-O (بیشینه های 1070 ، 1252 و 1397 cm^{-1})، پیوند C-H (بیشینه های 2900 و 2968 cm^{-1}) و پیوند O-H در اتانول خالص است.

شکل ۳ طیف تبدیل فوریه مادون قرمز نانو ساختارهای سیلیکون کاربرد در حالت پودری و بدون پراکنده شدن در اتانول را پس از بازپخت نشان می دهد. با توجه به شکل، بیشینه های جذبی در فرکانس های 1107 cm^{-1} و 473 cm^{-1} مشاهده شده اند که به ترتیب مربوط به پیوندهای ارتعاشی^۱ و جنبشی^۲ Si-O هستند [۳]. تفاوت بارز این طیف با طیف نانوذرات قبل از بازپخت که تنها یک بیشینه در حدود 880 cm^{-1} دارد، قابل درک است.



شکل ۴: طیف جذبی فرابنفش- مرئی کلئوئید نانوساختارهای سیلیکون کارباید قبل و پس از حکاکی شیمیایی.

جذب ماده است؛ که بصورت زیر تعریف می‌شود:

$$A = abc \quad (2)$$

در این رابطه α ضریب جذب ماده، b طول نمونه (ظرف نمونه) و c غلظت آن است. با توجه به بازپخت حرارتی نانوساختارها در دمای ۹۰۰ درجه سانتیگراد که دارای ساختار آمورف می‌باشند فرمول تاوک به صورت ذیل بدست آمده است:

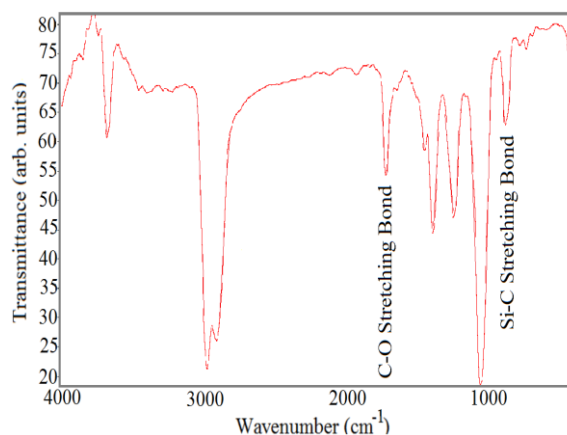
$$(\alpha \hbar \omega) = B(\hbar \omega - E_g)^2 \quad (3)$$

که B یک ضریب ثابت و E_g معرف گاف اپتیکی است. رابطه فوق را می‌توان به صورت زیر نیز نشان داد.

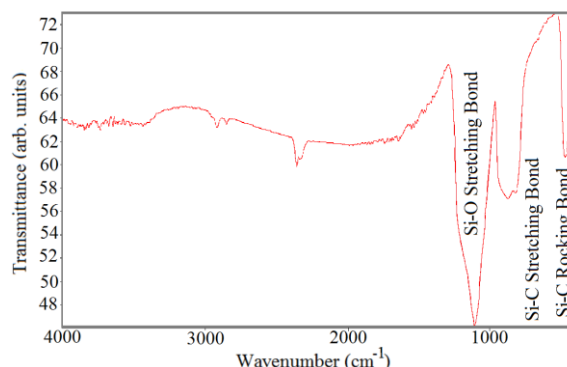
$$(\alpha h\nu)^{1/2} = c(h\nu - E_g) \quad (4)$$

نمودار تاوک دارای یک ناحیه خطی متمایز است که شروع جذب را بیان می‌کند، از برون یابی این ناحیه روی محور طولی، انرژی گاف اپتیکی نانوساختارهای سیلیکون کارباید قبل و پس از حکاکی شیمیایی را می‌توان بدست آورد [۵].

همان طور که در شکل ۵ دیده می‌شود گاف انرژی نانوساختارها قبل از حکاکی شیمیایی ۳٫۲۳ eV و پس از آن ۳٫۸۱ eV بدست آمده است. با توجه به نتایج، گاف انرژی نانوساختارها پس از حکاکی شیمیایی باندازه ۰٫۵۸ eV افزایش یافته است. این افزایش گاف مربوط



شکل ۲: نمودار طیف تبدیل فوریه مادون قرمز نانوساختارهای سیلیکون کارباید پس از حکاکی شیمیایی در محیط اتانول.



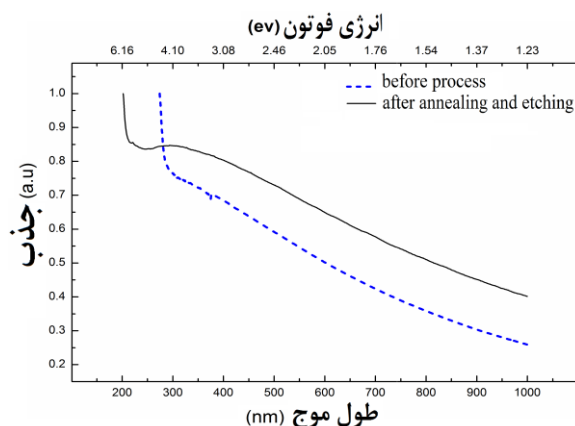
شکل ۳: نمودار طیف تبدیل فوریه مادون قرمز نانوساختارهای سیلیکون کارباید پس از بازپخت برای ایجاد پیوند Si-O.

شکل ۴ طیف جذبی فرابنفش- مرئی کلئوئید نانوساختارهای سیلیکون کارباید را قبل و پس از حکاکی شیمیایی نشان می‌دهد. منحنی نقطه چین مربوط به طیف جذبی کلئوئید پیش از حکاکی شیمیایی و منحنی مشکی مربوط به طیف جذبی کلئوئید پس از حکاکی شیمیایی است.

در شکل ۵ نمودار تاوک^۳ با استفاده از طیف جذبی فرابنفش- مرئی کلئوئید نانوساختارهای سیلیکون کارباید رسم شده است. بدین منظور از قانون بیر- لامبرت (۱) و فرمول تاوک (۳) برای بدست آوردن گاف انرژی استفاده شده است [۴]:

$$A = -\log\left(\frac{I}{I_0}\right) \quad (1)$$

که در آن I_0 شدت نور اولیه، I شدت نور عبوری و A مقدار



شکل ۶: طیف جذبی فرابنفش- مرئی کلونید نانوساختارها قبل و پس از فرایند دو مرحله ای حکاکی شیمیایی و بازپخت.

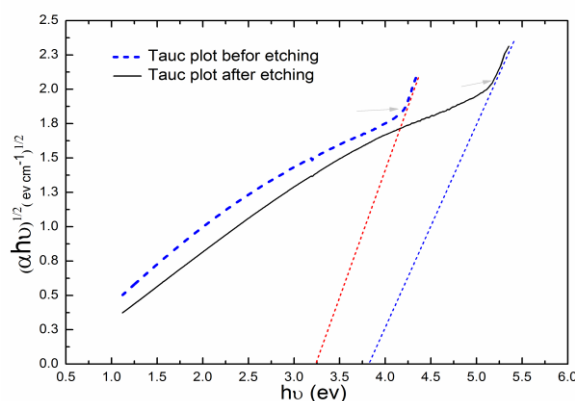
۴- نتیجه گیری

در این تحقیق، سطح نانوساختارهای سیلیکون کارباید به روش بازپخت و حکاکی شیمیایی تغییر یافته است. طیف تبدیل فوریه مادون قرمز، تشکیل پیوند های C-O و Si-O را بر روی سطح نانوساختارها تایید می کند. نمودار تاوک طیف جذبی فرابنفش-مرئی نانوساختارهای سیلیکون کارباید، افزایش گاف انرژی این نانوساختارها را پس از تشکیل پیوند های سطحی نشان می دهد. این ویژگی، نانوساختارهای سیلیکون کارباید را گزینه مناسبی برای ساخت دیودهای گسیلنده نوری در ناحیه نور آبی معرفی می نماید.

مراجع

- [1] Umezu I., Matsumoto K., Inada M., Makino T. and Sugimura A., Correlation between surface oxide and photoluminescence properties of Si nanoparticles prepared by pulsed laser ablation, **Applied Physics A: Materials Science & Processing**, 79 (2004) 1545–1547.
- [2] Guevara-Lora I., Czosnek C., Smycz A., Janik Jerzy F. and Kozik A., SiC nanoparticles as potential carriers for biologically active substances, **Journal of Physics: Conference Series** 146 (2009) 012022.
- [3] Luna-López J. A. and Carrillo-López J., FTIR and photoluminescence of annealed silicon rich oxide films, **Superficies y Vacío** 22(1) (2009) 11-14.
- [4] Tauc J., *Amorphous and liquid semiconductors*, Springer US (1974).
- [5] Tauc J., Optical properties and electronic structure of amorphous Ge and Si, **Materials Research Bulletin** 3 (1968) 37-46.
- [6] Vörös M., Deák P., Frauenheim T. and Gali A., The absorption of oxygenated silicon carbide nanoparticles, **The journal of chemical physics** 133 (2010) 064705.

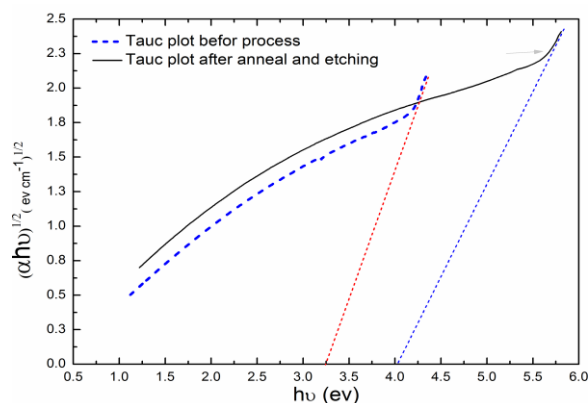
- 1- Stretching bond
- 2- Rocking bond
- 3- Tauc plot



شکل ۵: نمودار تاوک برای کلونید نانوساختارهای سیلیکون کارباید قبل و پس از حکاکی شیمیایی.

به تشکیل پیوند C-O بر روی سطح نانوساختارهای سیلیکون کارباید است [۶]. همچنین طیف جذبی فرابنفش-مرئی کلونید نانوساختارهای سیلیکون کارباید قبل و پس از فرایند دو مرحله ای حکاکی شیمیایی و بازپخت نشان داده شده است (شکل ۶). منحنی آبی مربوط به طیف جذبی کلونید پیش از این فرایند و منحنی مشکی مربوط به طیف جذبی کلونید پس از آن است.

در شکل ۷ نمودار تاوک با استفاده از طیف جذبی فرابنفش-مرئی کلونید نانوساختارهای سیلیکون کارباید رسم شده است. همان طور که در شکل ۷ دیده می شود گاف انرژی نانوساختارها قبل از فرایند ۳.۲۳ eV و پس از فرایند بازپخت و حکاکی شیمیایی ۴.۱ eV بدست آمده که نشان می دهد گاف انرژی باندازه ۰.۸۷ eV افزایش یافته است. این افزایش گاف انرژی مربوط به تشکیل پیوند C-O و Si-O بر روی سطح نانوساختارهای سیلیکون کارباید است [۶].



شکل ۷: نمودار تاوک برای کلونید نانوساختارهای کارباید قبل و پس از فرایند دو مرحله ای حکاکی شیمیایی و بازپخت.