بیست و هشتمین کنفرانس اپتیک و فوتونیک ایران و چها ردهمین
کنفرانس مهندسی و فناوری فوتونیک ایران ،
دانشگاه شهید چمران اهوا ز،
خوزستان، ایران .
12-14 بهمن 1400

تعیین گاف انرژی و خواص نوری شیشه‌های MoO_3-V_2O_5-TeO_2

حسینی، سیده فاطمه؛ سوری، داریوش

گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه ملایر، ملایر

چکیده

در این پژوهش، نمونه‌های توده‌ای $xMoO_3$-$(60-x)V_2O_5$-$40TeO_2$ با درصدهای مولی متفاوت $0\leq x\leq 60$ به روش فرونشانی سریع مذاب تهیه شده‌اند. جهت ارزیابی خواص اپتیکی، طیف جذب نوری نمونه‌ها در محدوده طول موج ۱۱۰۰-۱۹۰ نانومتر گرفته شد. سپس، از روش مشتق انطباق طیف جذب (به طوراختصار DASF) به عنوان رویکردی دقیق برای تعیین گاف انرژی و همچنین ماهیت دقیق گذار حامل‌های بار استفاده شد. نتایج نشان می‌دهد که کمترین گاف انرژی نوری مقداری برابر با ۲/۳۸ eV برای $x = 10$ است. همچنین برخی از کمیت‌های اپتیکی مانند پهنای دنباله‌ای نوار انرژی (انرژی Urbach)، ضریب شکست (n) و ثابت دی الکتریک (ε) برای شیشه‌های مورد مطالعه بدست آمد. نتایج حاکی از آن است که نمونه TVM10، نمونه بهینه برای کاربردهای نوری مانند فیبرهای نوری است.

کلید واژه: مشتق انطباق طیف جذب، گاف انرژی نوری، انرژی اورباخ، ضریب شکست.

Determination of the optical band gap and optical properties of MoO_3-V_2O_5-TeO_2 glasses

Hosseini, Seyyedeh Fatemeh; Souri, Dariush

Department of Physics, Faculty of Science, Malayer University, Malayer

Abstract

In this research, the bulk samples of $xMoO_3$-$(60-x)V_2O_5$-$40TeO_2$ compositions with different molar contents of $0\leq x\leq 60$ were prepared by rapid melt-quenching method. To investigate the optical properties, the optical absorption spectra of samples were taken within the wavelength range of 190-1100 nm. Then, derivation of absorption spectrum fitting method (shortened as DASF) was used as precise approach to determine the band gap and the exact nature of charge carriers transition. Results show that the minimum optical band gap is equal to 2.38 eV for x = 10. In addition, some optical quantities such as the width of the band tails (Urbach energy), refractive index (n) and dielectric constant (ε) were obtained for the under studied glasses. Results imply that the TVM10 sample is the optimal sample for optical applications such as optical fibres.

Keywords: derivation of absorption spectrum fitting, optical band gap, Urbach energy, refractive index.

PACS :78,81

[Downloaded from opsi.ir on 2026-11-05]

مقدمه

شیشه‌های اکسیدی شامل اکسیدهای فلزات واسطه در سال‌های اخیر از جنبه‌های گوناگونی از قبیل خواص نوری، ترموالکتریکی، ساختاری و الکتریکی بطور گسترده‌ای مورد مطالعه قرار گرفته‌اند[۱-۴]. برخی از ویژگی های منحصر به فرد شیشه‌های تلوریومی عبارتند از: ضریب شکست بالا، ثابت های دی‌الکتریک بالا، توانایی تشکیل شیشه بالا، پایداری شیمیایی و محیطی بالا، استحکام مکانیکی خوب، دمای ذوب پایین، خاصیت غیر نمگیری، گذار فروسرخ و ساختار مقاوم در برابر شوک‌های گرمایی[۳و۵و۶]. در نیمرساناهای آمورف، گاف نواری (که به دلیل وجود دنباله نواری و لبه های متحرک به آن شبه گاف می‌گویند) را می‌توان با روش‌های شناخته شده‌ای که برای نیمه رساناهای بلوری و نانو بلوری نیز استفاده می‌شود، تعیین کرد. به دلیل عدم مطالعه گسترده و دقیق در مورد خواص نوری شیشه‌های سه‌تایی تلورو وانادیومی حاوی مولیبدن، در پژوهش حاضر از رویکرد DASF برای تعیین گاف نوری، ماهیت گذار حامل‌های بار نوری شیشه‌های مورد مطالعه استفاده شده است. در روش قدیمی تاک و روش بهبود یافته انطباق طیف جذبی (ASF) که تاکنون از آن بهره گرفته شده است، علاوه بر وقت گیر بودن می‌تواند با خطا در تعیین گاف انرژی نوری همراه باشد؛ چرا که شاخص نوع گذار نوری (m) باید ابتدا مشخص گردد. روش DASF با گسترش تئوری روش ASF ، به روشی بسیار دقیق و سریع در تعیین گاف انرژی نوری نیمرساناها بدون نیاز به پیش داوری در زمینه نوع گذار صورت گرفته، و همچنین پرهیز از استفاده از روش مجموع کمترین مربعات تبدیل شده است[۷-۹].

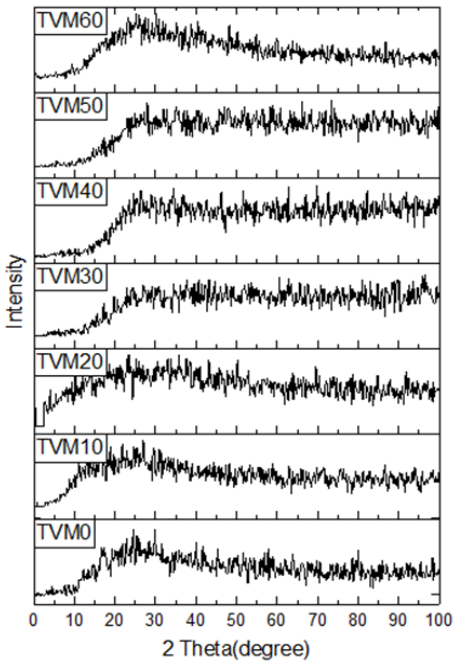
روش ساخت نمونه

در این پژوهش، شیشه‌های اکسیدی سه مولفه‌ای $xMoO_3$-$(60-x)V_2O_5$-$40TeO_2$ (که به اختصار TVMx نامگذاری می‌شوند و x درصد مولی مؤلفه‌ی MoO_3 دارای مقادیر x=0, 10, 20, 30, 40, 50, 60 mol% می‌باشد)، از ذوب مخلوط مناسب مؤلفه‌های تشکیل دهنده با درصد خلوص بالا به روش سرمایش سریع مذاب ساخته شده‌اند که جزییات مربوطه در مرجع شماره (۱) آمده است. علاوه بر ساخت نمونه های توده‌ای، لایه های آمورف جهت اندازه گیری‌های نوری با دمش در مذاب با ویسکوزیته بالا از طریق لوله‌ی باریک بور- سیلیکا حاصل شدند. تحلیل‌های ساختاری اپتیکی این نمونه‌ها، به ترتیب به وسیله پراش پرتو X توسط دستگاه (Diffractometer: SEIFERT3003, CuK_α) و دستگاه طیف سنج فرابنفش- مرئی (PerkinElmer, UV/VIS Spectrometer Lambda25, USA) انجام شده‌است.

نتایج و بحث

الف: مشخصه یابی پرتو X

مشخصه یابی پرتو ایکس روی نمونه‌های توده‌ای TVMx به روش پودری انجام شده است (شکل (۱)). عدم وجود قله-های بلوری در این الگوها طبیعت آمورف و غیر بلوری نمونه‌ها را تایید می‌کند[۱].



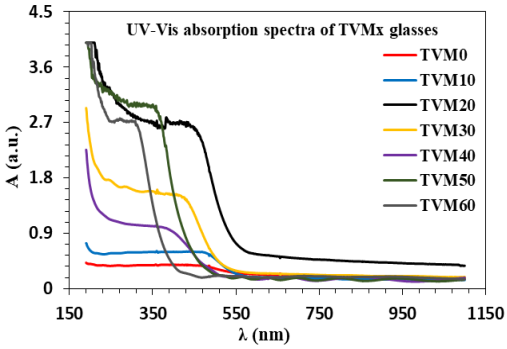
شکل(۱): الگوی XRD نمونه‌های TVMx [۱].

ب: تحلیل اپتیکی، تعیین گاف انرژی و پهنای حالت-های دنباله‌ای نواری

شکل(۲) طیف جذب نمونه‌های TVMx را در گستره فرابنفش- مرئی نشان می‌دهد که می‌توان از این نمودار

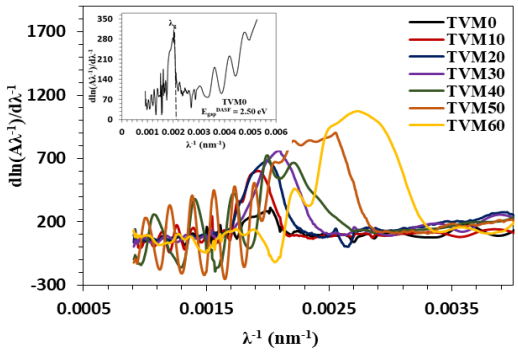
[Downloaded from opsi.ir on 2026-11-05]

اطلاعاتی از قبیل گاف نوری، پهنای انرژی حالت های دنباله ای در گاف انرژی و نوع گذار القایی نوری انجام شـــده برای حامل های بار را بدست آورد. همانطور که مشاهده می‌کنید، تیز نبودن لبه جذب نوری در نمونه‌های مورد پژوهش، مبین ماهیت غیربلوری نمونه‌ها و نتایج حاصـــل از پراش پرتو X می‌باشد. برای محاسبه گاف انرژی نوری نمونه‌های مورد نظر از روش DASF استفاده شده است که مراحل آن در مرجع شماره (۷) ذکر شده است.

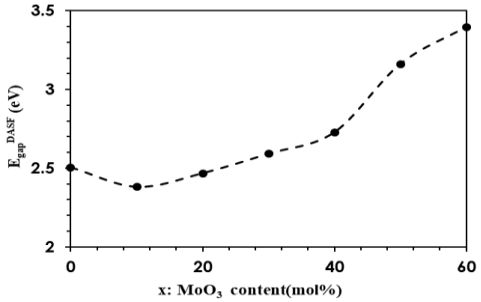


شکل(۲): طیف جذب نوری نمونه‌های TVMx.

شـــکل (۳)نمودارهای DASF (نمودار $d\{\ln[A(\lambda)/\lambda]\}/d(1/\lambda)$ برحسب $(1/\lambda)$) را برای نمونه‌های مورد بررسی نشان می‌دهد که به صـورت نوعی برای نمونه‌ی TVM0 در تصـویر درونی شـکل (۳) نشـان داده شـده‌اسـت و نتایج بدسـت آمده در جدول (۱) آمده اســـت. مطابق شـــکل (۴)، نمونه TVM10 دارای کمترین گاف انرژی اسـت که مبین افزایش بی نظمی ســـاختاری و گســـترش حالات جایگزیده درون گاف انرژی نوری بر طبق مدل نواری دیویس- مات می‌باشـــد و ممکن است گزینه‌ی خوبی برای فیبرهای نوری (به دلیل پذیرفتاری نوری غیرخطی بالاتر) باشـــد. از طرفی، افزایش گاف در TVM50 و TVM60، می‌تواند ناشـی از تغییرات سـاختاری ناشـــی از افزایش مولیبدن و در نتیجه کاهش چگالی اکســـیژن‌های غیرپیوندی می‌باشـــد. با توجه به رابطه (۲) از شیب بخش خطی نمودار $\ln\left(\frac{A}{\lambda}\right)$ برحسب $\ln(\frac{1}{\lambda}-\frac{1}{\lambda_g})$ ، مقدار m (شاخص نوع گذار نوری) در محدوده ۰/۶۲۹۴- ۰/۲۹۰۸ (نزدیک به ۰/۵) می‌باشد که مبین گذار نوری مجاز مستقیم برای نمونه های مورد پژوهش اســـت. شـــکل (۵) نمودار تغییرات $ln\left(\frac{A}{\lambda}\right)$ را بر حســـب $\ln(\frac{1}{\lambda}-\frac{1}{\lambda_g})$ برای نمونه‌های TVMx نشـــان می‌دهد. انرژی اورباخ (E_{tail}) را بعنوان معیاری از بی نظمی اتمی و انحراف از وجود لبه های تیز نوارهای ظرفیت و رسـانش (گذار نوری بین حالات دنباله‌ای نوار ظرفیت و حالات گسترده در نوار رسانش) می‌توان طبق آنچه در شـــکل (۶) آمده اســـت، از قرار دادن شـــیب ناحیه خطی نمودار $ln(A)$ برحســـب λ^{-1} در رابطه $E_{tail}(eV) = 1239.83/slope$ محاســـبه کرد؛ که نتایج در جدول (۱) آمده اســـت. مقادیر انرژی اورباخ بدســـت آمده در محدوده ۰/۹۱۸ – ۰/۳۰۸ الکترون ولت می‌باشد.



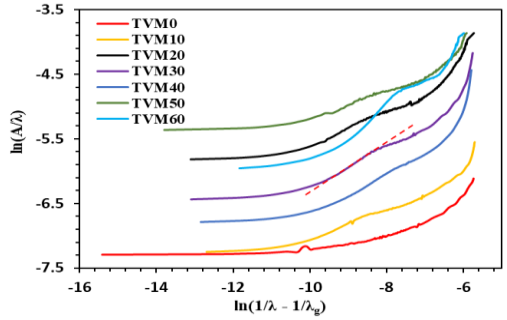
شکل(۳): نمودار $d\{\ln(A/\lambda)\}/d(1/\lambda)$ برحسب $(1/\lambda)$ برای نمونه‌های TVMx (منحنی‌های DASF).



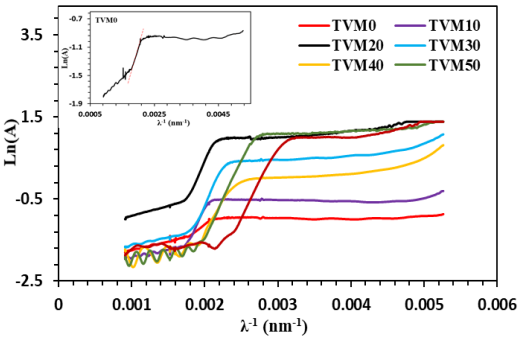
شکل(۴): روند تغییرات مقادیر گاف انرژی نوری DASF (E_{gap}^{DASF}) برای شیشه‌های TVMx.

کوچک بودن مقادیر انرژی اورباخ در مقایســـه با مقادیر متناظر گاف انرژی نمونه ها، بیانگر احتمال بیشـــتر گذار حامل بار بین حالات جایگزیده در برانگیزشـــهای الکتریکی است. ضریب شکست بالاتر و کمترین مقدار گاف انرژی برای نمونه TVM10 مبین بالاترین پذیرفتاری نوری غیر خطی مرتبه ســـوم در بین نمونه هاســـت و آن را بعنوان گزینه مناسبی جهت استفاده در فیبرهای نوری معرفی می کند.

[Downloaded from opsi.ir on 2026-11-05]



شکل (۵): نمودار تغییرات $ln\left(\frac{A}{\lambda}\right)$ برحسب $ln(\frac{1}{\lambda}-\frac{1}{\lambda_g})$ برای نمونه‌های TVMx به همراه برازش بخش خطی نمودار برای نمونه نوعی TVM30.



شکل (۶): نمودار $\ln(A/\lambda)$ برحسب $(1/\lambda)$ برای شیشه‌های TVMx. تصویر درونی با خط چین ناحیه‌ی خطی نمودار اورباخ نمونه TVM0 را نشان می‌دهد.

ج: تعیین ضریب شکست و ثابت دی الکتریک در لبه جذب

ضریب شکست در تعیین تناسب مواد شیشه‌ای برای استفاده در دستگاه های نوری استفاده می شود و رابطه معکوسی با گاف انرژی دارد، که در لبه‌ی جذب با استفاده از رابطه زیر معرفی می شود[۱۰]:

$$\left(\frac{n^2-1}{n^2+2}\right)=1-\sqrt{\frac{E_{gap}^{DASF}}{20}} \qquad (۴)$$

مقادیر ضریب شکست نمونه‌ها در جدول (۱) آمده است. بیشترین ضریب شکست مربوط به نمونه‌ی TVM10 است که کمترین مقدار E_{gap}^{DASF} را دارد. همچنین با استفاده از مجذور ضریب شکست، می‌توان ثابت دی‌الکتریک(ε) در لبه جذب را بدست آورد که نتایج در جدول (۱) آمده است.

نتیجه‌گیری

الگوهای XRD و تیز نبودن لبه جذب نوری نمونه‌ها مبین ماهیت آمورف نمونه ها می باشد. نتایج به دست آمده از روش DASF نشان می‌دهد که گاف انرژی نوری از ۲/۵۰ به ۲/۳۸ الکترون ولت برای ۰ ≤x ≤۱۰ کاهش می‌یابد و سپس به ۳/۴۰ eV برای ۱۰≤x≤۶۰ افزایش می‌یابد. مقادیر m بدست آمده در محدوده ۰/۶۲۹۴- – ۰/۲۹۰۸ نشان‌دهنده گذار نوری مجاز مستقیم برای نمونه‌های مورد پژوهش است. همچنین، بیشترین ضریب شکست مربوط به نمونه‌ی TVM10 است که کمترین مقدار E_{gap}^{DASF} را دارد.

جدول(۱): مقادیر گاف انرژی به دست آمده از روش DASF (E_{gap}^{DASF})، انرژی اورباخ(E_{tail}) ، شاخص گذار (m)، ضریب شکست (n) ، ثابت دی الکتریک (ε)، برای شیشه‌های TVMx.

sample	$\lambda_g^{-1}(nm^{-1})$	n	m	$E_{gap\text{-}DASF}$ (eV)	E_{tail} (eV)	ε
TVM0	0.00202	2.5449	0.3017	2.50445	0.9185	6.4769
TVM10	0.00192	2.5875	0.2908	2.38047	0.32046	6.6956
TVM20	0.00199	2.5572	0.333	2.46726	0.3144	6.5397
TVM30	0.00209	2.5166	0.3967	2.59124	0.3080	6.3332
TVM40	0.00220	2.4745	0.3665	2.7276	0.40488	6.1234
TVM50	0.00255	2.3548	0.3031	3.16156	0.32817	5.5452
TVM60	0.00274	2.2973	0.6294	3.39713	0.34337	5.2780

مراجع

[1] D. Souri, M. Elahi; Phys. Script. 75 (2007) 219-222.
[2] D. Souri; J. Phys. D: Appl. Phys. 41 (2008) 105102.
[3] G. Turky, M. Dawy; Mater. Chem. Phys. 77 (2002) 48-59.
[4] K. Sega, H. Kasai, H. Sakata; Mater. Chem. Phys. 53 (1998) 28-33.
[5] A.H. Khafagy, A.A. El-Adawy, A.A. Higazy, S. El-Rabaie, A.S. Eid; J. Non-Cryst. Solids 354 (2008) 3152.
[6] M. M. Ahmad, E. S. Yousef, E. S. Moustafa; Physica B: Cond. Matt. 371 (2006) 74-80.
[7] D. Souri, Z.E.Tahan; Appl. Phys. B 119 (2015) 273–279.
[8] D. Souri, K. Shomalian, J. Non-Cryst. Solids 355 (2009) 1597–1601.
[9] L.E. Alarcon, A. Arrieta, E. Camps, S. Muhl, S. Rudil, E.V. Santiago, Appl. Surf. Sci. 254 (2007) 412–415.
[10] N. Chopra, A. Mansingh, G.K. Chadha; J. Non-Cryst. Solids 126 (1990) 194–201.

[Downloaded from opsi.ir on 2026-11-05]