بیستمین کنفرانس اپتیک و فوتونیک ایران
و ششمین کنفرانس مهندسی و فناوری فوتونیک ایران
۸ تا ۱۰ بهمن ماه۱۳۹۲ - دانشگاه صنعتی شیراز

بررسی تاثیر دمای بازپخت روی خواص ساختاری و اپتیکی لایه های نازک ZnO تهیه شده به روش سل - ژل

مهدی فلاح و سید روح الله عقدایی

دانشگاه علم و صنعت ایران ، دانشکده فیزیک ، نارمک ، تهران

چکیده –در این تحقیق خواص ساختاری و اپتیکی لایه‌های نازک اکسید روی تهیه شده به روش سل-ژل مورد بررسی قرار گرفت. نمونه‌ها بعد از سه بار لایه نشانی در دماهای مختلف بازپخت شدند.با استفاده از خطوط پراش پرتوهای *X* و تحلیل پهن شدگی آنها، اندازه بلورکها و چگالی دررفتگی لایه‌های *ZnO* استخراج شدند. همچنین مورفولوژی نمونه‌ها نیز با استفاده از تصاویر *SEM* مورد بررسی قرار گرفت. گاف انرژی نمونه‌ها از طریق طیف گذار بدست آمد، و ارتباط بین لبه جذب نمونه‌ها در طیف جذبی با نتایج بدست آمده از تحلیل خطوط پراش و مورفولوژی آنها مورد بررسی قرار گرفت.

کلید واژه- اکسید روی ، ساختار و نواقص شبکه بلوری ، لایه های نازک ، دمای بازپخت

Effect of annealing temperature on the structural and optical properties of ZnO thin films prepared by sol - gel.

Mehdi Fallah, Seyed Rohollah Aghdaie

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

Abstract In this study the structural and optical properties of ZnO thin films prepared by sol-gel method were investigated. Samples were annealed at different temperatures after 3 times coating. Crystallite size and the dislocation density of ZnO layers were evaluated by X-ray diffraction line broadening analysis. The morphology of samples was studied using SEM images Band gap transition spectra obtained through samples, and the relationship between the absorption edge in the absorption spectra of the samples with the results obtained from the analysis of the diffraction lines and their morphology was studied.

Keywords: Zinc oxide, Annealing temperature, Thin films, Structure and crystal lattice defects.

[Downloaded from opsi.ir on 2026-02-03]

۱- مقدمه

اکسید روی یک ماده نیمه رسانای نوع n با گاف انرژی مستقیم حدود ۳.۳۷ الکترون ولت در دمای اتاق و انرژی برانگیختگی ۶۰ میلی الکترون ولت است که در نور مرئی یک نیمه رسانای شفاف می باشد. مزایای دیگر اکسید روی عبارتند از فراوانی و قیمت پایین نسبت به مواد مشابه همچون ITO و پاسخ پیزو الکتریک قوی. اکسید روی در صنعت کاربردهای متنوعی از قبیل وسایل گسیل کننده نور، مبدل‌های پیزوالکتریک، سنسورهای گازی، صفحات نمایش پلاسما، سامانه‌های لیزری و الکترودهای رسانایی در سلول های خورشیدی. فیلم نازک اکسید روی از روش های مختلفی از قبیل اسپری پارولیز، لایه‌نشانی به روش تبخیر شیمیایی، و روش سل‌ژل می‌توان تهیه کرد. از میان تمامی روش‌های ذکر شده، روش سل ژل به دلیل پوشش لایه‌هایی با وسعت دلخواه، یکنواختی لایه نشانی و ساده و ارزان بودن از اهمیت خاصی برخوردار است[1,2]. در این مقاله لایه نازک اکسید روی به روش سل ژل تهیه شده و خواص اپتیکی و پارامترهای ساختاری آن بررسی شده است. خواص فیزیکی اکسیدروی به شکل و اندازه نانو ذرات و نقصهای شبکه ای این ماده وابسته است. بنابراین بررسی ریز ساختار آن اجتناب ناپذیر است. از دید بلورشناسان استفاده از فرمول شرر به تنهایی دقت لازم را ندارد. ضمن اینکه نقص‌های شبکه ای چون چگالی دررفتگی در بررسی‌های انجام گرفته به طور جدی مورد توجه قرار نگرفته است.

۲- روش تهیه لایه های اکسید روی

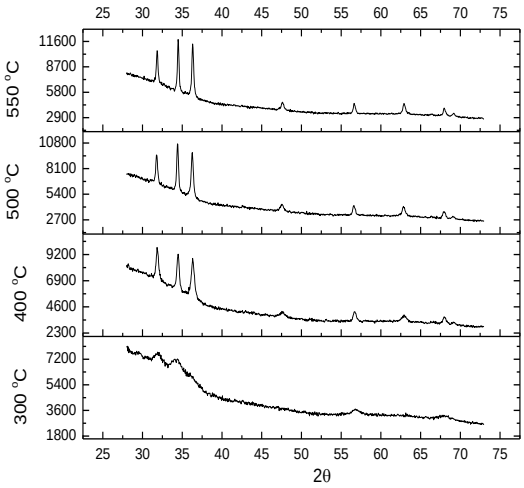
فیلم های نازک اکسید روی به وسیله دستگاه اسپین کوتینگ با استفاده از سل مناسب بدست می آید. برای تهیه سل با غلظت ۰.۷۵ مولار ابتدا ۱.۳۱۶ گرم استات روی دو آبه (ZAD) را در ۸ سی‌سی از محلول ایزوپروپانول با کمک همزن مغناطیسی در حمام آب ۵۵ درجه سانتیگراد به مدت ۱ ساعت همزده شد. درحین همزدن ۰.۳۶ سی‌سی محلول مونو اتانول آمین (MEA) به تدریج اضافه شد. محلول شفاف بدست آمده به مدت ۷۲ ساعت در دمای اتاق به منظور کهنه شدن نگهداری شده است. زیر لایه ها از جنس شیشه های میکروسکوپ با ابعاد ۳*۲۵*۲۵ میلی متر می باشند. برای تمیز کردن زیر لایه ها از استون، ایزوپروپانول و آب دی یونیزه استفاده شده است. لایه نشانی با استفاده از دستگاه اسپین کوتینگ با سرعت ۳۵۰۰ دور بر دقیقه به مدت ۳۰ ثانیه در دمای اتاق انجام گرفت. در ادامه لایه ها در کوره با دمای ۲۲۰ درجه سانتیگراد به مدت ۱۰ دقیقه قرار گرفتند. لایه ها بعد از ۳ بار لایه نشانی به منظور مطالعه خواص اپتیکی و ریزساختارها،در کوره با دماهای ۳۰۰ ، ۴۰۰ ، ۵۰۰ ، ۵۵۰ هرکدام به مدت ۱ ساعت بازپخت شدند.

۲-۲- مشخصه یابی فیلم نازک

برای تعیین طیف گذار و جذب ، دستگاه اسپکتروفتومتر (UV-visشیمادزو، مدل MPC-2200) مورد استفاده قرار گرفت. برای تعیین طیف XRD نیز از دستگاه XRD آزمایشگاه کفا استفاده شده است، و برای بررسی ریز ساختارها از نرم افزار PM2K استفاده شده است. مورفولوژی نمونه ها نیز بوسیله دستگاه SEM مدل هیتاچی S4160 تعیین گردید.

۳- یافته ها و بحث

شکل (۱) نقش پراشXRD نمونه های اکسید روی بازپخت شده در دماهای مختلف را نشان می دهد.



شکل ۱ نقش پراش XRD نمونه‌های اکسید روی بازپخت شده در دماهای مختلف

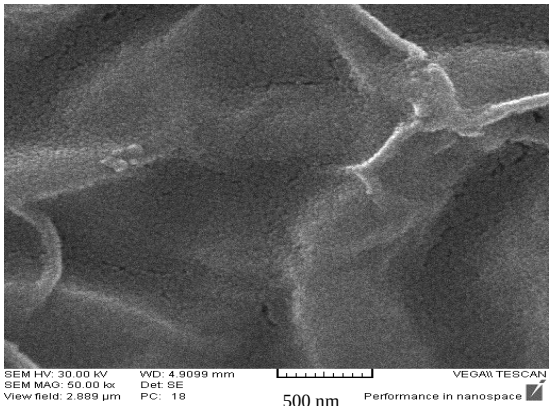
بررسی دقیق نقش پراش نمونه‌ها نشان داد که تمام نمونه‌ها در سامانه شش گوشه‌ای با ساختار ورتسایت متبلور شده و سازگاری خوبی با کارتICDD 36-1451

[Downloaded from opsi.ir on 2026-02-03]

جدول ۱ کمیت های پالایش شده از تحلیل نقش پراش نمونه های بازپخت شده در دماهای مختلف

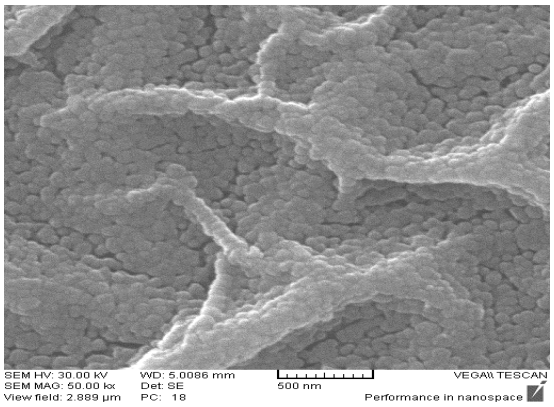
دمای بازپخت (°C)	c(nm)	a (nm)	L_v (nm)	L_s (nm)	$\rho.10^{14}$ (m^{-2})	R_e(nm)
300	0.5485(1)	0.3414(1)	4.5	3.5	238	8.24
400	0.52020(1)	0.3242(1)	17.6	9.0	99	1.42
500	0.5208(1)	0.3246(5)	29.6	17.3	17	1.34
550	0.51892(1)	0.323883(2)	35.4	27.0	2	1.25

نشان می‌دهد با استفاده از تحلیل پهن‌شدگی خطوط پراش و بکارگیری برنامه PM2K، ثابت‌های شبکه، میانگین حجمی و سطحی اندازه بلورک‌ها (L_v، L_s)، چگالی دررفتگی و شعاع قطع دررفتگی (ρ ، R_e) برای سامانه لغزشی Edge<$\bar{2}$110>{0001} محاسبه شدند که نتایج آن در جدول (۱) خلاصه شده است. همانطور که در این جدول مشاهده می‌کنیم با افزایش دمای بازپخت چگالی و شعاع دررفتگی کمتر می‌شود که نشان دهنده تشکیل بلورهایی با کیفیت بهتر است. در ضمن میانگین اندازه سطحی و حجمی بلورک‌ها نیز با افزایش دما، افزایش می‌یابد. از تصاویر SEM (شکل‌های(۲)و(۳)) پیداست ذرات به صورت کروی شکل می‌باشند که با افزایش دمای بازپخت ذرات روی هم انباشته شده و اندازه بلورک‌ها نیز افزایش می‌یابد و و لذا انتظار افزایش ضریب جذب در نمونه بازپخت شده در دماهای بالاتر را داریم.

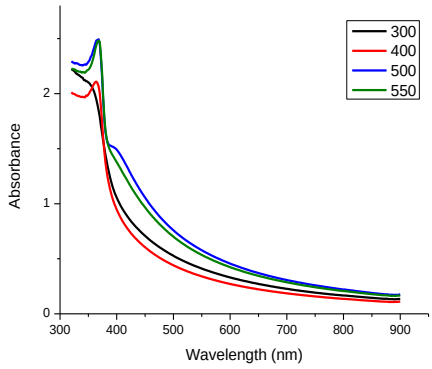


شکل ۲ تصویر SEM تهیه شده از نمونه بازپخت شده در ۴۰۰°C

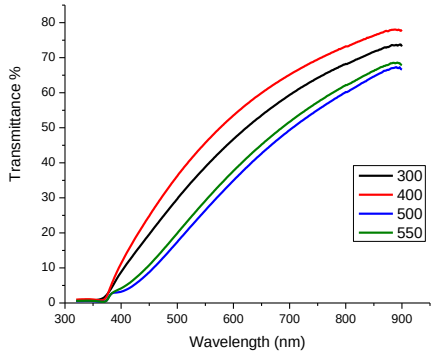
شکل‌های (۴) و (۵) به ترتیب طیف جذب و عبور نمونه‌های اکسید روی را نشان می دهد. در طیف جذبی، لبه جذب در طول موج حدود ۳۶۸ نانومتر رخ می‌دهد که معادل گاف انرژی ۳.۳ الکترون ولت است. لبه جذب برای نمونه بازپخت شده در ۵۵۰ درجه سانتیگراد از بقیه نمونه‌ها تیزتر می‌باشد که نشان‌دهنده بهبود کیفیت کریستالی بالا (جدول ۱) و تخلخل سطحی بالاتر (شکل ۳) نسبت به بقیه نمونه‌ها می‌باشد.



شکل ۳ تصویر SEM تهیه شده از نمونه بازپخت شده در ۵۵۰°C



شکل ۴ طیف جذبی نمونه‌های ZnO بازپخت شده در دماهای مختلف



شکل ۵ طیف جذبی نمونه‌های ZnO بازپخت شده در دماهای مختلف

[Downloaded from opsi.ir on 2026-02-03]

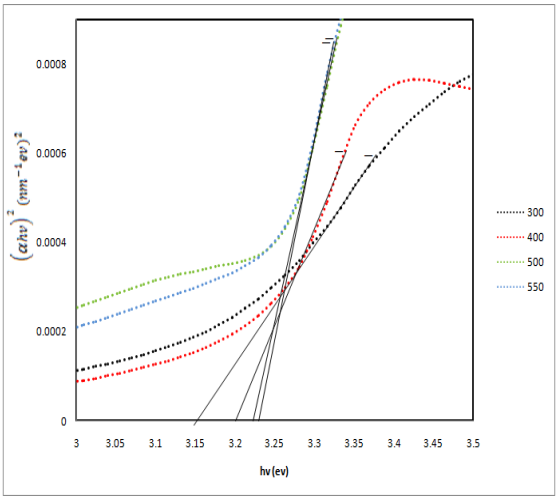
برای تعیین گاف انرژی نمونه‌ها، می‌توان از وابستگی ضریب جذب اپتیکی[3] به انرژی فوتون hv استفاده کرد،

$$\alpha hv = k(hv - E_g)^n \quad (۱)$$

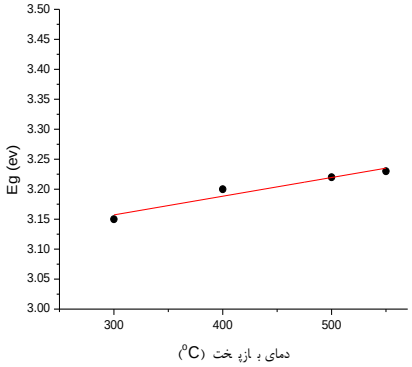
ضریب جذب نور (α) برای لایه‌ای با ضخامت d و ضریب عبور T با رابطه زیر بیان می‌شود:

$$\alpha = -\frac{Ln(T)}{d} \quad (۲)$$

از طرفی مقدار n نیز برای نیمه رسانا در حالت کپه‌ای و با گاف انرژی مستقیم حدود ۰.۵ می باشد. با رسم نمودار تغییرات $(\alpha hv)^2$ بر حسب hv و با رسم خط مماس در محدوده‌ای که این تغییرات خطی است و با امتداد آن به محور hv، گاف انرژی نمونه‌ها بدست می‌آید.

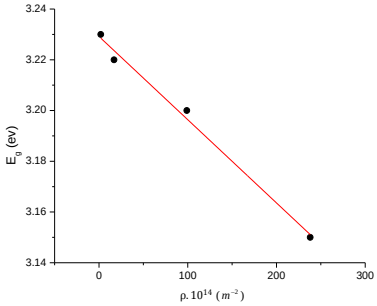


شکل ۶ نمودار تغییرات $(\alpha hv)^2$ بر حسب hv نمونه‌های اکسید روی



شکل ۷ نمودار دمای بازپخت نمونه ها بر حسب گاف انرژی

طبق شکل (۸)، مشاهده می‌شود که افزایش کیفیت شبکه بلوری تاثیر مستقیمی بر افزایش گاف انرژی دارد.



شکل ۸ نمودار گاف انرژی نوری نمونه‌ها بر حسب چگالی دررفتگی

۴- نتیجه گیری

در این مقاله به منظور مطالعه خواص ساختاری و اپتیکی لایه‌های اکسید روی بعد از لایه نشانی، در کوره تحت دمای بازپخت مختلف قرار گرفتند. با استفاده از تحلیل پهن‌شدگی خطوط پراش و بکارگیری برنامه PM2K طیف XRD نمونه‌ها مورد بررسی قرار گرفت، و به این نتیجه رسیدیم که با افزایش دمای بازپخت، اندازه بلورک‌ها بزرگتر شده و چگالی دررفتگی بلورک‌ها کاهش می‌یابد، بررسی تصاویر SEM نیز نشان داد اندازه بلورک‌ها در اثر افزایش دمای بازپخت بزرگتر می‌شود. همچنین با این روند ، پیک لبه جذب نمونه ها در شکل (۴) حالت تیزتری به خود می گیرد و همانطور که از شکل (۷) پیداست با این روند، گاف انرژی نمونه ها نیز افزایش می‌یابد. و در نهایت در شکل (۸) ارتباط کمیت ریزساختار (چگالی دررفتگی) با گاف انرژی نوری نمونه‌ها نشان داده شد. بنابراین افزایش کیفیت شبکه بلوری و اندازه بلورک‌ها تاثیر مستقیمی بر خواص اپتیکی دارد.

سپاسگزاری

در این مقاله بر خود لازم می دانم از آقای دکتر سلیمانیان به خاطر یاری رساندن در استفاده از برنامه PM2K تقدیر و تشکر به عمل آورم.

مراجع

[1] Linhua Xu, Gaige Zhenga, Juhong Miao, Fenglin Xian, *Dependence of structural and optical properties of sol–gel derived ZnO thin films on sol concentration*, Applied Surface Science 258 (2012) 7760– 7765

[2] Nitul Kakati, Seung Hyun Jee, Su Hyun Kim, Jun Young Oh, Young Soo Yoon, *Thickness dependency of sol-gel derived ZnO thin films on gas sensing behaviors*, Thin Solid Films 519 (2010) 494–498

[3] M.W. Charles, H. Nick Jr., E.S. Gregory, *Physical Properties of Semiconductors*, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, NJ, 1989

[Downloaded from opsi.ir on 2026-02-03]