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

مشخصه یابی اپتیکی فیلم‌های نازک وانادیم پنتا اکسید آلاییده شده با سریم با استفاده از طیف بازتاب

نجمه کسری، فرهاد اسمعیلی قدسی*، سیده سارا فلاحتگر، بابک اعتمادی

گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه گیلان

چکیده - در پژوهش حاضر، محاسبه ضخامت و ثابت‌های اپتیکی فیلم‌های نازک پنتا اکسید وانادیم آلاییده شده با سریم تهیه شده به روش سل ژل روی بستر شیشه با استفاده از تک طیف بازتاب ارائه شده است. برای دستیابی به برازش مناسب طیف بازتاب از مدل کلاسیکی درود لورنتز برای تابع دی الکتریک پارامتری استفاده شده است. بهترین پارامترهای برازشی جهت شبیه سازی طیف بازتاب با روش بهینه سازی لونبرگ-مارکوارت تعیین شده است. بازتابندگی شبیه سازی شده از ثابت‌های اپتیکی و ضخامت بازیابی شده در توافق خوبی با داده های تجربی هستند.

کلید واژه- بازتابندگی، بهینه سازی، ثابت‌های اپتیکی، فیلم نازک پنتا اکسید وانادیم

Determination of the optical constants for Cerium-doped Vanadium pentoxide thin film from reflectance spectra

N. Kasra, F. E. Ghodsi*, S. S. Falahatgar, B. Etemadi

Department of Physics, Faculty of Science, /University of Guilan

Abstract- in the present work, the calculation of thickness and optical constants of cerium doped vanadium pentoxide thin films prepared by sol-gel method on glass substrates are presented using single reflection spectra. In order to obtain a suitable fitting for reflection spectra, the classical Drude-Lorentz model has been used for the parametrized dielectric functions. The best fitting parameters for simulating of reflection spectra have been determined by Levenberg-Marquardt optimization method. The simulated reflectance from the retrieved optical constants and thickness are in good agreement with experimental data.

Keywords: Thin film V_2O_5, Reflectance, optimization, dielectric function

[Downloaded from opsi.ir on 2025-07-20]

این مقاله در صورتی دارای اعتبار است که در سایت www.opsi.ir قابل دسترسی باشد.

۱- مقدمه

وانادیم پنتااکسید(V_2O_5) یک نیمرسانای نوع n است که تراز 3d آن در حال پر شدن می‌باشد [۱] و متعلق به دسته ای از مواد هوشمند است که با تغییرات دما، میدان الکتریکی یا مغناطیسی و تغییرات فشار واکنش نشان می-دهد. این اکسید توانایی استفاده در قالب فیلم‌های نازک برای طیف گسترده‌ای از کاربردها، شامل ابزارهای سوئیچینگ الکترونیکی و یا اپتیکی حرارتی و پوشش‌های ذخیره‌کننده انرژی را دارند [۲ و۳]. از این رو تعیین ثابت‌های اپتیکی (ضریب شکست n و ضریب خاموشی k) فیلم‌های نازک V_2O_5 برای طراحی ابزارهای اپتوالکترونیک و اپتیکی جهت استفاده در ساختن پوشش های اپتیکی و ابزارهایی مانند پوشش های چند لایه و فیلترها ضروری هستند. کمیت‌های تجربی اندازه‌گیری شده شامل تراگسیلندگی و یا بازتابندگی اپتیکی به عنوان تابعی از طول موج برای تعیین پارامترهای اپتیکی لایه های نازک مورد استفاده قرار می‌گیرند. برای تعیین پارامترهای اپتیکی، مدل‌های فیزیکی مختلفی مانند کوشی، فروهی – بلومر و تاوک - لورنتز برای محاسبه ضریب شکست n و ضریب خاموشی k بوسیله محققان ارائه شده است. برای هر لایه نازک با توجه به فیزیک آن باید مدل اپتیکی مناسب انتخاب و در تخمین توابع دی الکتریک حقیقی و موهومی مورد استفاده قرار گیرد. در این کار، شروع محاسبات به حدس اولیه برای پارامترهای تابع دی الکتریک و ضخامت نیازمند است که با توجه به خصوصیات فیزیکی فیلم نازک و اطلاعات موجود در سایر پژوهش‌هایی که در این زمینه از مقالات مختلف کسب شده است برای هر پارامتر به صورت بازه‌ای به عنوان ورودی الگوریتم تعریف می‌شود. فیلم های نازک V_2O_5 آلاییده شده با سریم روی بستر شیشه در آزمایشگاه سل ژل دانشکده علوم پایه دانشگاه گیلان تحت شرایط یکسان تهیه شده‌اند. اندازه‌گیری فیلم‌های نازک در چهار نمونه اکسید وانادیم به صورت غیر آلاییده، و آلاییده شده با نسبت مولی ۰/۵٪، ۱٪ و ۱/۵٪ سریم انجام شده است. شبیه سازی طیف‌های تجربی با استفاده از تک طیف بازتاب فیلم‌های نازک و با استفاده از مدل فیریکی درود-لورنتز در فرآیند بهینه سازی لونبرگ – مارکوارت انجام شده است. ثابت های اپتیکی از جمله ضریب شکست n، ضریب خاموشی k، ضخامت لایه‌ها به طور همزمان در ناحیه طول موج ۴۰۰nm-۱۱۰۰nm تعیین شده است.

۲- مدل سازی و روش انجام محاسبات

یک روش معمول برای توصیف ثابت‌های اپتیکی فیلم‌های نازک استفاده از روابط پاشندگی کلاسیکی بر مبنای تابع دی‌الکتریک است. یکی از قدیمی‌ترین و پر کاربردترین رابطه پاشندگی، رابطه تابع دی الکتریک درود - لورنتز است که بر اساس تعامل بین نور و ماده است.. این رابطه در معادله (۱) نشان داده شده است.

$$\varepsilon = \varepsilon_\infty + \sum_{j=1}^{n} \frac{f_j E_{0j}^2}{E_{0j}^2 - E^2 + i\Gamma_j E} + \frac{E_P^2}{E^2 + iE_\tau E} \qquad (۱)$$

پارامترهای ε_∞، f_j ، E_0، Γ_j به ترتیب ثابت تابع دی-الکتریک در فرکانس‌های بالا، دامنه نوسانگر، قدرت و پهنای باند نوسانگراست که به عنوان عامل میرایی شناخته شده است. علت اثر میرایی به دلیل فرآیند جذب که شامل گذار بین دو حالت است. جمله سوم مربوط یه مدل درود است E_p پارامتر چگالی حامل مربوط به انرژی پلاسما و E_τ انرژی برخورد است [۴]. تابع دی‌الکتریک مختلط به صورت $\varepsilon = \varepsilon_1 + i\varepsilon_2$ که واکنش ماده با امواج الکترومغناطیسی را به صورت تابعی از انرژی فوتون E یا طول موج λ توصیف می‌کند شامل دو بخش حقیقی ε_1 و موهومی ε_2 است. قسمتهای حقیقی و موهومی ضریب شکست مختلط یعنی $n(\lambda)$ و $k(\lambda)$ با رابطه (۲) به تابع دی الکتریک مرتبط می‌شوند[۵].

$$n(\lambda) = \left(\frac{\varepsilon_{1+}\left(\varepsilon_1^2 + \varepsilon_2^2\right)^{1/2}}{2} \right)^{1/2}$$
$$k(\lambda) = \left(\frac{-\varepsilon_1 + \left(\varepsilon_1^2 + \varepsilon_2^2\right)^{1/2}}{2} \right)^{1/2} \qquad (۲)$$

طیف بازتاب(R) در فرود نرمال برای نمونه ها بر طبق [۶] به صورت تابعی از ضخامت فیلم d، ضریب شکست بستر S، طول موج نور فرودی (λ)، ضریب شکست $n(\lambda)$ و ضریب خاموشی $k(\lambda)$ است.

شبیه‌سازی داده‌های بازتاب اندازه‌گیری شده با استفاده از کمینه‌سازی تابع هدف، که بصورت مربع تفاضل بین طیف

[Downloaded from opsi.ir on 2025-07-20]

بازتاب اندازه‌گیری شده و مقدار محاسبه شده است بصورت رابطه (۳) تعریف میشود.

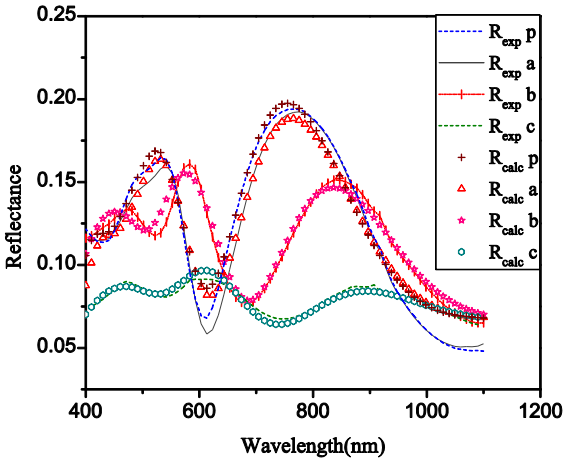
$$O(\varepsilon_\infty, f, \Gamma, E_0, E_P, E_\tau, d) = \sum (R_{meas} - R_{calc})^2 \qquad (۳)$$

در رابطه فوق R_{meas} و R_{calc} به ترتیب طیف بازتاب اندازه‌گیری شده و تئوری می‌باشد. با استفاده از پارامترهای برازشی بدست آمده از کمینه سازی تابع هدف، منحنی پاشندگی ضرایب شکست و خاموشی تخمین زده می شود.

۲-۱- بحث و نتایج

طیف بازتاب اندازه‌گیری شده و شبیه سازی شده با پارامترهای برازشی برای فیلم‌های نازک اکسید وانادیم آلاییده شده با سریم در غلظتهای مختلف۰/۵٪، ۱ ٪ و ۱/۵٪ که به ترتیب c, b, a و برای نمونه غیرآلاییده p نامگذاری شده‌اند، در شکل (۱) در محدوده طول موج ۴۰۰nm-۱۱۰۰nm (نواحی مرئی و نزدیک فروسرخ) با استفاده از مدل درود- لورنتز برای سیستم هوا، فیلم، بستر، هوا نشان داده شده است.

مقایسه نتایج نشان داد که نمونه حاوی ۰/۵٪ از Ce (نمونه a) بازتاب بیشتری را در مقایسه با نمونه های حاوی ۱٪ و ۱/۵٪ سریم (نمونه های b و c) به نمایش می‌گذارد. همانطور که در شکل (۱) دیده شده است بازتاب فیلم‌های نازک با افزایش غلظت مولی Ce به وانادیم کاهش می‌یابد. دلیل این کاهش را به عواملی مختلفی مانند افزایش زبری، افزایش ضخامت و افزایش غلظت ماده آلاینده مرتبط است. بطوریکه نتایج بررسی زبری سطح با روش AFM، افزایش پارامتر زبری با افزایش غلظت آلاینده سریم را تأیید کرده است. در نتیجه پراکندگی نور فرودی در فیلم‌های نازک افزایش یافته است. تغییر ضخامت فیلم نازک با افزایش درصد Ce نیز عاملی در تغییر بازتابندگی فیلم‌های نازک است که ناشی از تغییر ویسکوزیته سل است. تغییر ساختار کریستالی و ترکیب شیمیایی فیلم‌های نازک ناشی از نفوذ یون‌های سریم به داخل شبکه کریستالی V_2O_5 عامل دیگری است که سبب تغییر در طیف بازتاب شده است. نتایج آنالیز ساختاری XRD تمایل به آمورف شدن با افزایش غلظت آلاینده را تأیید کرده است.



شکل (۱): نتایج شبیه‌سازی طیف بازتاب برای فیلم‌های نازک اکسید وانادیم آلاییده شده با سریم در غلظت ۰/۵٪ (a)، ۱ ٪ (b)، ۱/۵٪ (c) و غیر آلاییده(p).

بهترین پارامترهای برازشی بدست آمده از فرآیند بهینه سازی و برازش داده‌های تجربی در جدول (۱) نشان داده شده است.

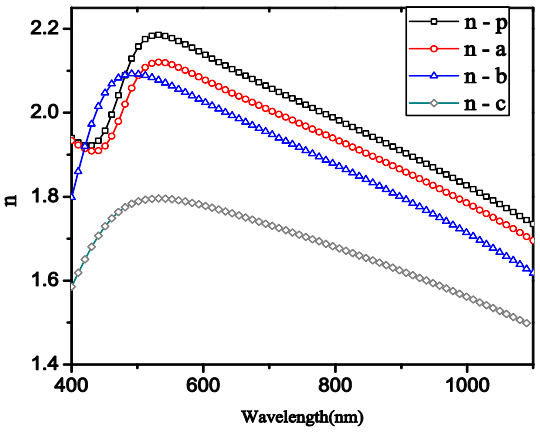
جدول(۱) پارامترهای برازش تابع دی‌الکتریک مدلDL

پارامتر	pure	%0.5 Ce	%1 Ce	%1.5 Ce
ε_∞	۴/۵	۴/۳	۳/۶	۲/۷
E_P	۱/۶	۱/۵	۱/۵	۱/۲
E_τ	۰/۴۲	۰/۲۰	۰/۰۵	۰/۰۱
f	۰/۳۱	۰/۲۳	۰/۶۷	۰/۶۲
E_0	۲/۶	۲/۶	۲/۹	۲/۹
Γ	۰/۶	۰/۶	۱/۱	۱/۵
$d(nm)$	۲۸۵	۳۰۲	۳۴۶	۴۲۵

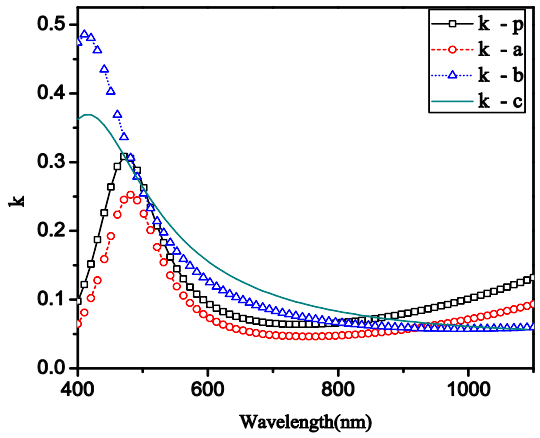
همانطور که از جدول (۱) مشاهده می‌شود افزایش بیشتر Ce با تغییر در ساختار کریستالی و فاصله بین اتمی در شبکه فیلم نازک اکسید وانادیم باعث افزایش در مقدار Γ ، f ، E_0 ، d و کاهش در سایر پارامترها گردیده است. بر طبق [۷] پارامتر E_0 با مقادیر حدود ۳/۱ eV -۲/۹ گذار اپتیکی از نوار ظرفیت به حالت جایگزیده نوار رسانش را نشان می‌دهد که در توافق با داده های جدول ۱ در کار حاضر می توان نتیجه گرفت انرژی گذار اپتیکی (گاف انرژی) با افزایش غلظت سریم افزایش یافته است. نتایج محاسبه ثابت‌های اپتیکی شامل ضریب شکست و خاموشی با استفاده از پارامترهای تابع دی

[Downloaded from opsi.ir on 2025-07-20]

الکتریک بدست آمده از فر آیند کمینه سازی فیلم‌های نازک در غلظتهای مختلف ۰/۵٪ (نمونه a)، ۱٪ (نمونه b) و ۱/۵٪ (نمونه c) از سریم به ترتیب در شکل‌های (۲) و (۳) نشان داده شده است.



شکل (۲): ضریب شکست فیلم‌های نازک وانادیم با غلظت‌های ۰/۵٪ (a)، ۱ ٪ (b)، ۱/۵ ٪ (c) از Ce و نمونه خالص(p).



شکل۳: ضریب خاموشی ضریب شکست فیلم‌های نازک وانادیم با غلظت‌های ۰/۵٪ (a)، ۱ ٪ (b)، ۱/۵٪ (c) از Ce و نمونه خالص(p).

همانگونه که از شکل (۲) مشاهده می‌شود ضریب شکست نمونه‌ها از ۵۰۰ تا ۱۱۰۰رفتاری مشابه دارند، و با افزایش طول موج در حال کاهش هستند. با افزایش غلظت Ce ضریب شکست در مجموع کاهش یافته است که با نتایج مربوط به تغییرات بازتابندگی در شکل (۱) در توافق است که با افزایش زبری میزان پراکندگی افزایش و درنتیجه مقدار طیف بازتاب کم شده است. از شکل (۳) مشاهده می‌شود، $k(\lambda)$ برای دو نمونه p و a در محدوده طول موج ۴۰۰ تا ۵۰۰ در حال افزایش است. همچنین تمام نمونه‌ها در ناحیه ۵۰۰ تا اطراف ۸۰۰ در حال کاهش هستند. در مجموع $k(\lambda)$با افزایش غلظت Ce کاهش یافته است. به عبارتی جذب اپتیکی نیز در این ناحیه کاهش یافته است. و نیز قله‌های ظاهر شده در ضریب خاموشی با پارامترهای درود - لورنتز بدست آمده از الگوریتم بهینه سازی در توافق است.

۳- نتیجه‌گیری

نتایج بهینه سازی الگوریتم لونبرگ - مارکوارت با مدل فیزیکی درود – لورنتز جهت تعیین ثابت های اپتیکی فیلم‌های نازک وانادیم آلاییده شده با سریم به روش سل ژل با استفاده از تک طیف بازتاب نشان می‌دهد، افزایش مقدار آلایش، بازتابندگی و ضریب شکست را کاهش می-دهد و همچنین باعث افزایش ضخامت لایه نازک گردیده است.

مراجع

[1] Bondarenka V, Kaciulis S, Martunas Z, Reza A, Babonas G J, Pa.i.kevicius A *XPS* and *optical properties of sol-gel processed vanadium pentoxide films*.**Lithuanian Journal of Physics** 48 (2008). 341.348

[2] Paone A, Joly M, Sanjines R, Romanyuk A, J.-L Scartezzini, Schüler A, *"Thermochromic films of VO2: for "smart" solar energy applications*, **Proceedings of SPIE** 20097410-74100F (2009) 29-34

[3] Elizabeth E. Chain, *Optical properties of vanadium dioxide and vanadium pentoxide thin films*, **Applied** 30, (1991) 2782-2787.

[4] Kadi, M, Assia Smaali, Ratiba, *Analysis of optical and related properties of tin oxide thin films determined by Drude-Lorentz model* **Surface & Coatings Technology** 211 (2012) 45–49.

[5] Fujiwara H, Spectroscopic Ellipsometry Principles and Applications (2007)

[6] Gungora T, Saka B, Calculation of the optical constants of a thin layer upon a transparent substrate from the reflection spectrum using a genetic algorithm, **Thin Solid Films** 467 (2004) 319– 325

[7] Atuchin V V, Kochubey V A, Pokrovsky L D, Kruchinin V N , Ramana C V, *Effects of Process Parameters on the Optical Constants of Highly Textured V_2O_5 Thin Films*, **Optics and Spectroscopy,** 117 (2014) 423-427.

[Downloaded from opsi.ir on 2025-07-20]