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 کاربايد 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 نانوساختارهای سیلیکون کاربايد 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 نانوساختارهای سیلیکون کاربايد را نشان می دهد. پیوند C-O باندازه ۰،۵۸ الکترون ولت گاف اپتیکی نانوساختارهای سیلیکون کاربايد را افزایش داده است. پیوندهای C-O و Si-O نیز گاف اپتیکی این نانوساختارها را ۰،۸۷ الکترون ولت افزایش داده اند. خواص اپتیکی مشاهده شده در نانوساختارهای سیلیکون کاربايد، این مواد را گزینه با ارزشی برای ساختن دیود های گسیل نوری و لیزرها می نماید.

کلید واژه- نانوکریستال های سیلیکون کاربايد، 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.

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

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

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 کاربایدباتوجه به پایداری حرارتی بالا، گزینه خوبی برای ساخت وسایل اپتوالکترونیکی و فوتونیکی می باشد. از طرفی افزایش گاف انرژی این نانوساختار 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 نانوساختار سیلیکون کاربایدروش مناسبی برای انجام این کار است.

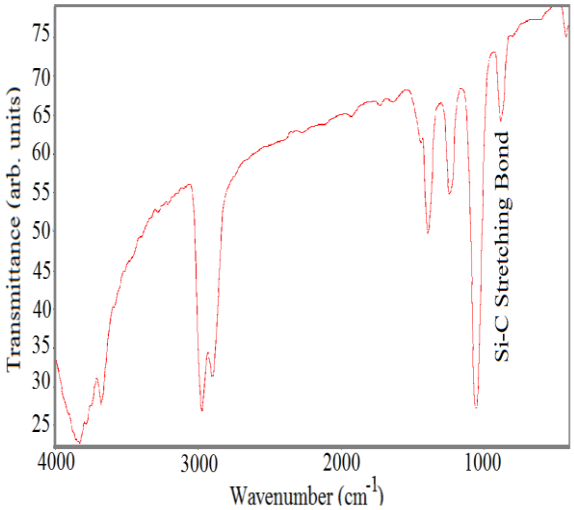
در این گزارش، تغییراتی بر سطح نانوساختار های سیلیکون کاربایدبه روش حکاکی شیمیایی و باز پخت اعمال شده است. تشکیل پیوندهای C-O و Si-O روی سطح نانوساختار ها ی سیلیکون کاربایدمورد مطالعه قرار گرفته و تغییر گاف انرژی پس از تشکیل این پیوند ها بررسی شده است.

۲- روش ایجاد تغییرات سطحی بر روی نانوساختارهای سیلیکون کاربایدد

نانوپودر سیلیکون کاربایدبا 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 کلوئید 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 نانوساختارهای سیلیکون کاربایدد در محیط اتانول را نشان می دهد. مطابق این شکل، بیشینه جذبی درفرکانس $۸۸۸\ cm^{-1}$ برای نانوساختارهای سیلیکون کاربایدد مشاهده شده است که مربوط به باند ارتعاشی خطی Si-C می باشد [۲].

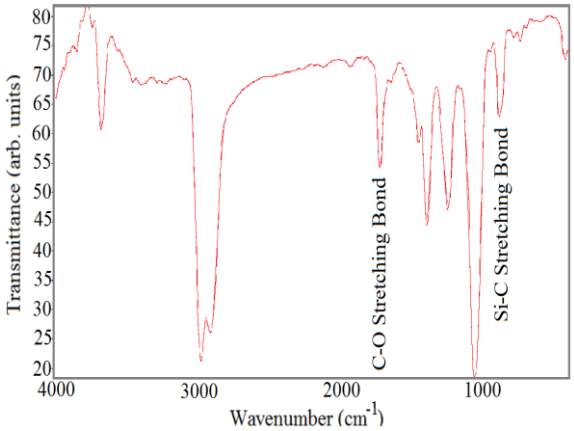


شکل۱: نمودار طیف تبدیل فوریه مادون قرمز نانوساختارهای سیلیکون کاربایدد در محیط اتانول.

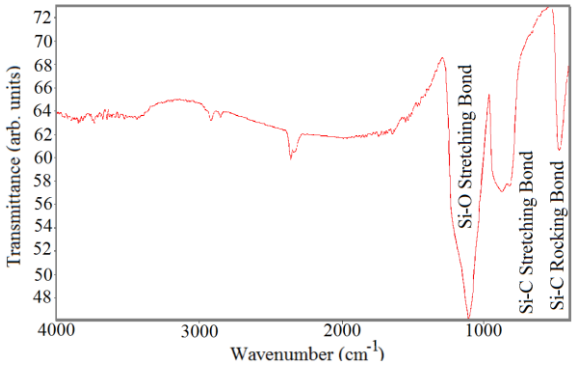
تشکیل پیوند C-O پس از انجام حکاکی شیمیایی توسط طیف تبدیل فوریه مادون قرمز مورد تایید قرار گرفته است (شکل ۲). بیشینه جذبی در فرکانس $۱۷۲۶\ cm^{-1}$ به پیوند C-O نسبت داده شده است [۲]. بیشینه های موجود در ۱۰۷۰، ۱۲۵۲ ، ۱۳۹۷، ۲۹۰۰، ۲۹۶۸ و cm^{-1} ۳۶۷۰ که در هر دو شکل ۱و۲ مشترک هستند مربوط به پیوند اتم های اتانول خالص هستند و به ترتیب مربوط به پیوند C-O (بیشینه های ۱۰۷۰، ۱۲۵۲وcm^{-1}۱۳۹۷)، پیوند C-H (بیشینه های ۲۹۰۰وcm^{-1} ۲۹۶۸) و پیوند O-H در اتانول خالص است.

شکل ۳ طیف تبدیل فوریه مادون قرمز نانوساختارهای سیلیکون کاربایدد 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 $۱۱۰۷\ cm^{-1}$ و $۴۷۳\ cm^{-1}$ 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 $۸۸۰\ cm^{-1}$ دارد، قابل درک است.

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



شکل۲: نمودار طیف تبدیل فوریه مادون قرمز نانوساختارهای سیلیکون کارباید پس از حکاکی شیمیایی در محیط اتانول.



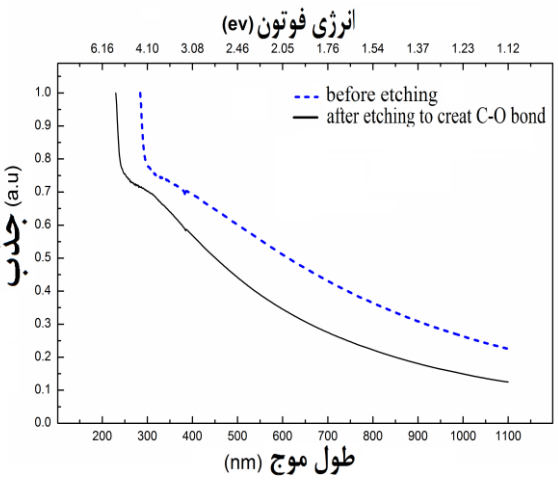
شکل۳: نمودار طیف تبدیل فوریه مادون قرمز نانوساختارهای سیلیکون کارباید پس از بازپخت برای ایجاد پیوند Si-O .

شکل ۴ طیف جذبی فرابنفش– مرئی کلوئید نانوساختارهای سیلیکون کارباید را قبل و پس از حکاکی شیمیایی نشان می دهد. منحنی نقطه چین مربوط به طیف جذبی کلوئید پیش از حکاکی شیمیایی و منحنی مشکی مربوط به طیف جذبی کلوئید پس از حکاکی شیمیایی است.

در شکل ۵ نمودار تاوک[۳] با استفاده از طیف جذبی فرابنفش- مرئی کلوئید 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]:

$$A = -\log(\frac{I}{I_0}) \qquad (۱)$$

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



شکل۴: طیف جذبی فرابنفش– مرئی کلوئید نانوساختارهای سیلیکون کارباید قبل و پس از حکاکی شیمیایی.

جذب ماده است؛ که بصورت زیر تعریف می‌شود:

$$A = \alpha bc \qquad (۲)$$

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:

$$(\alpha\hbar\omega) = B(\hbar\omega - E_g)^2 \qquad (۳)$$

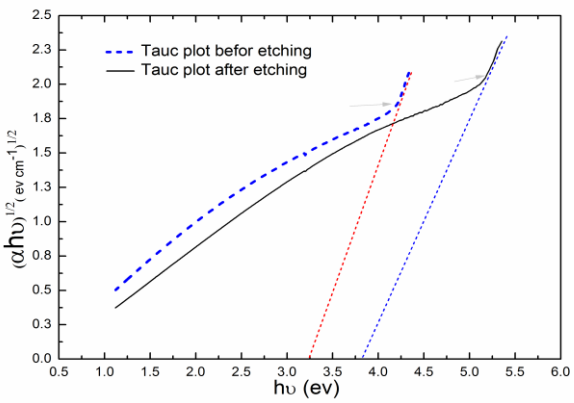
که B یک ضریب ثابت و E_g معرف گاف اپتیکی است. رابطه فوق را می توان به صورت زیر نیز نشان داد.

$$(\alpha h\upsilon)^{1/2} = c(h\upsilon - E_g) \qquad (۴)$$

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

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

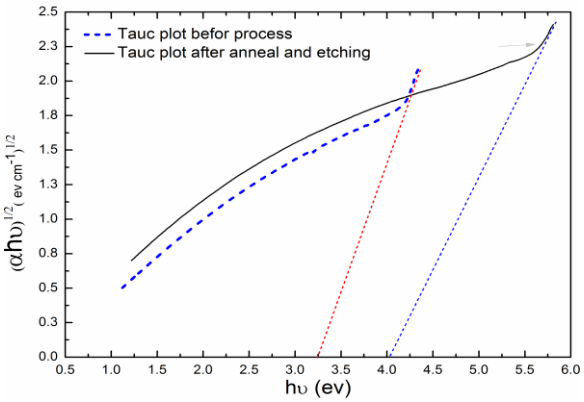
[Downloaded from opsi.ir on 2026-02-02]



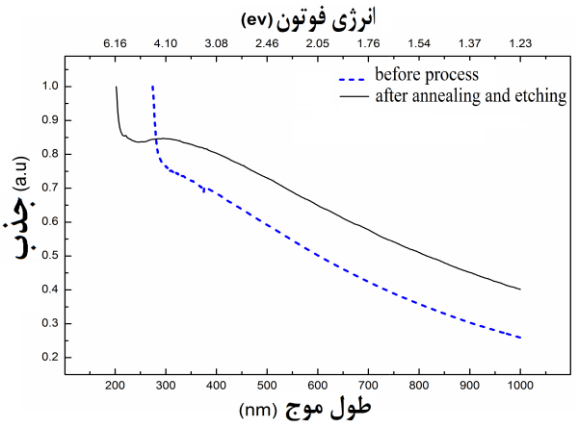
شکل۵: نمودار تاوک برای کلوئید نانوساختارهای سیلیکون کارباید قبل و پس از حکاکی شیمیایی.

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

در شکل ۷ نمودار تاوک با استفاده از طیف جذبی فرابنفش- مرئی کلوئید 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 می‌دهد 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].



شکل۷: نمودار تاوک برای کلوئید نانوساختارهای کارباید قبل و پس از فرایند دو مرحله ای حکاکی شیمیایی و بازپخت.



شکل۶: طیف جذبی فرابنفش– مرئی کلوئید نانوساختارها قبل و پس از فرایند دو مرحله ای حکاکی شیمیایی و بازپخت.

۴- نتیجه‌گیری

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

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