

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ



دانشگاه ولی عصر (عج) رفسنجان  
دانشکده علوم پایه  
گروه فیزیک

پایان نامه‌ی کارشناسی ارشد رشته‌ی فیزیک گرایش حالت جامد

مطالعه ساختارهای ZnO رشد یافته با روش کربوترمال: اثر حضور  
اکسید مس و سایر پارامترها

استادان راهنما

دکتر علی رحمتی

دکتر مهدی ملایی

استادان مشاور

محمد خانزاده

دکتر مسعود کریمی پور

دانشجو

فاطمه رحیمی بیاض

اسفند ۱۳۹۱



دانشگاه ولی عصر (عج) رفسنجان

دانشکده‌ی علوم پایه

گروه فیزیک

پایان‌نامه‌ی کارشناسی‌ارشد رشته‌ی فیزیک گرایش حالت جامد

خانم فاطمه رحیمی بیاض با عنوان

مطالعه ساختارهای ZnO رشدیافته با روش کربوترمال: اثر حضور

اکسید مس و سایر پارامترها

در تاریخ ۹۱/۱۲/۱۹ توسط هیأت داوران زیر بررسی و با درجه... عالی... به تصویب نهایی رسید.

	امضاء	با مرتبه‌ی علمی استادیار	دکتر علی رحمتی	۱- استاد راهنمای پایان‌نامه
	امضاء	با مرتبه‌ی علمی استادیار	دکتر مهدی ملایی	۲- استاد راهنمای پایان‌نامه
	امضاء	با مرتبه‌ی علمی مربی	آقای محمد خان زاده	۳- استاد مشاور پایان‌نامه
	امضاء	با مرتبه‌ی علمی استادیار	دکتر مسعود کریمی پور	۴- استاد مشاور پایان‌نامه
	امضاء	با مرتبه‌ی علمی دانشیار	دکتر حسن رنجبر عسگری	۵- استاد داور داخل گروه
	امضاء	با مرتبه‌ی علمی استادیار	دکتر پروانه ایرانمنش	۶- استاد داور داخل گروه
	امضاء	با مرتبه‌ی علمی استادیار	دکتر علی توکلی	۷- نماینده‌ی تحصیلات تکمیلی

تمامی حقوق مادی مترتب بر نتایج مطالعات، ابتکارات و نوآوری‌های  
حاصل از این پژوهش موضوع این پایان‌نامه، متعلق به دانشگاه  
ولی عصر (عج) رفسنجان است.

## سپاس گزاری

بارها، تو را سپاس می گویم که بر این ذره کمترین منت نهادی تا از دریای بیکران آفرینشت قطره ای بر کسرم و گوشه ای از اقیانوس بی انتهای لطفت را به نظاره بنشینم. باشد که بیش از پیش سر بر آستان بندگی ات فرود آورم.

کلبانک سر بلندی بر آستان توان زد

بر آستان جانان که سر توان نهادن

سپاس بی پایان از پدر و مادر بزرگوارم

که هستی ام دیون وجود شیرینشان و دانشم مرهون عشق بی دینشان است،

آنان که دعای خیرشان بدرقه راهم و مطمئن ترین گره کشای مشکلاتم بوده اند

بر خود لازم می دانم از اساتید بزرگوارمی که در این مسیر اصمیانہ یاری نمودند تشکر و قدردانی نمایم؛ از اساتید محترم راهنا

جناب آقای دکتر علی رحمتی و آقای دکتر مهدی ملایی و اساتید مشاور جناب آقای دکتر مسعود کریمی پور و آقای محمد

خان زاده به خاطر رهنمودهای ارزنده و مساعدت های بی دینشان و همچنین از جناب آقای دکتر حسن رنجبر عسکری و خانم

دکتر پروانه ایرانش به خاطر قبول زحمت داوری این پایان نامه، پاسکزارم و توفیق روز افزون این بزرگواران را از خداوند

منان مسلت دارم.

تقدیم

بہ پیشگاہ بانوی بی نشان

حضرت فاطمہ زہرا (سلام اللہ علیہا)

## چکیده

در سال‌های اخیر توجه بسیاری به ساختارهای اکسید روی به علت تنوع در ریخت‌سطحی و قابلیت رشد ارزان شده است. در کار حاضر ساختارهای اکسید روی با روش کربوترمال در حضور اکسید مس (II)، روی دو بستر (۱۰۰) Si و کوارتز رشد داده شده است. ویژگی‌های ساختاری و ریخت‌سطحی نمونه‌های رشدیافته به ترتیب با پراش پرتو X و طیف‌سنجی رامان، و میکروسکوپ الکترونی روبشی مشخصه‌یابی شده است. طیف جذب و فوتولومینسانس مرئی (دمای اتاق) برای مطالعه ویژگی‌های اپتیکی به کار برده شده است. نمونه‌ها پس‌بلوری با ساختار شش‌گوشی (ورتزایت) و جهت‌گیری مخلوط هستند. ساختارهای تنکی روی بسترها نهشته شده‌اند. ریخت‌سطحی به شدت از بستر و فاصله مواد اولیه - بستر متأثر می‌شود. افزودن مس، منجر به انبساط شبکه و کاهش گاف‌نواری شده است. فوتولومینسانس سبز نمونه‌ها به حضور مس در ساختار اکسید روی و نوع بستر بستگی دارد.

**واژگان کلیدی:** اکسید روی، روش کربوترمال، ریخت‌سطحی، نورتابی

## فهرست مطالب

صفحه	عنوان
۱.....	فصل اول: مقدمه
۴.....	فصل دوم: بررسی منابع و پیشینه پژوهش
۴.....	۱-۲ مقدمه
۴.....	۲-۲ اکسید روی، ویژگی و کاربرد
۹.....	۳-۲ روش‌های ساخت
۱۰.....	۱-۳-۲ سازوکارهای رشد
۱۰.....	۱-۱-۳-۲ سازوکار بخار-مایع-جامد
۱۱.....	۲-۱-۳-۲ سازوکار بخار-جامد
۱۱.....	۳-۱-۳-۲ سازوکار رشد از فاز محلول
۱۲.....	۴-۱-۳-۲ سازوکار خود هسته‌سازی
۱۲.....	۲-۳-۲ تکنیک‌های رشد
۱۳.....	۱-۲-۳-۲ نهشت بخار شیمیایی آلی-فلزی
۱۳.....	۲-۲-۳-۲ انتقال فاز بخار
۱۴.....	۴-۲ روش رشد کربوترمال
۱۵.....	۱-۴-۲ عوامل مؤثر بر ریخت سطحی
۱۶.....	۱-۱-۴-۲ نوع مواد اولیه
۱۶.....	۲-۱-۴-۲ دمای کوره
۱۷.....	۳-۱-۴-۲ فاصله بستر از مرکز
۱۸.....	۴-۱-۴-۲ مدت زمان فرآیند
۱۹.....	فصل سوم: مواد و روش‌ها
۱۹.....	۱-۳ مقدمه
۱۹.....	۲-۳ روش تهیه مواد و پوشش‌دهی بسترها
۱۹.....	۱-۲-۳ مواد اولیه
۲۰.....	۲-۲-۳ بسترها و آماده‌سازی



۲۰	..... دستگاه مورد استفاده	۳-۲-۳
۲۰	..... شرایط تهیه نمونه‌ها	۴-۲-۳
۲۲	..... روش‌های تحلیل نمونه‌ها	۳-۳
۲۲	..... ویژگی‌های ساختاری و سطحی	۱-۳-۳
۲۲	..... پراش پرتو X (XRD)	۱-۱-۳-۳
۲۳	..... میکروسکوپ الکترونی روبشی (SEM)	۲-۱-۳-۳
۲۴	..... طیف‌سنجی رامان	۳-۱-۳-۳
۲۶	..... ویژگی‌های اپتیکی	۲-۳-۳
۲۶	..... ویژگی جذب اپتیکی	۱-۲-۳-۳
۲۷	..... ویژگی نورتایی	۲-۲-۳-۳
<b>۲۸</b>	<b>..... فصل چهارم: نتایج و بحث</b>	
۲۸	..... مقدمه	۱-۴
۲۸	..... نقش پارامترهای گوناگون در طول فرآیند رشد	۲-۴
۲۹	..... توزیع دمایی کوره	۱-۲-۴
۲۹	..... توزیع شار بخار	۲-۲-۴
۳۰	..... ویژگی ساختاری	۳-۴
۳۰	..... مواد اولیه غیرآمیخته با پودر اکسید مس (II)	۱-۳-۴
۳۰	..... بررسی نقش مقادیر متفاوت پودر اکسید مس (II) در مواد اولیه	۱-۱-۳-۴
۳۳	..... بررسی فاصله بستر از بوته در ریخت‌سطحی یک نمونه رشد	۲-۱-۳-۴
۳۵	..... بررسی ریخت‌سطحی نمونه‌ها در یک سری رشد	۳-۱-۳-۴
۳۷	..... مواد اولیه آمیخته با پودر اکسید مس (II)	۲-۳-۴
۳۷	..... بررسی ریخت‌سطحی نمونه‌ها در یک سری رشد	۱-۲-۳-۴
۴۰	..... ویژگی اپتیکی	۴-۴
۴۰	..... مواد اولیه غیرآمیخته با پودر اکسید مس (II)	۱-۴-۴
۴۰	..... بررسی نقش مقادیر متفاوت پودر اکسید مس (II) در مواد اولیه	۱-۱-۴-۴
۴۳	..... بررسی نوع بستر	۲-۱-۴-۴
۴۵	..... مواد اولیه آمیخته با پودر اکسید مس (II)	۲-۴-۴

۴-۲-۱ بررسی نقش مقادیر متفاوت پودر اکسید مس (II) در مواد اولیه..... ۴۵

فصل پنجم: نتیجه گیری و پیشنهادات..... ۴۶

پیوست: برخی تصاویر ریخت سطحی بدست آمده در این پژوهش..... ۴۸

منابع..... ۵۱

## فهرست شکل‌ها

عنوان	صفحه
شکل ۱-۲: ساختارهای سه‌گانه الف) ورتزایت، ب) زینک بلند، ج) نمکی اکسید روی	۶
شکل ۲-۲: الف) هندسه چهاروجهی، ب) عدم تقارن ساختار ورتزایت اکسید روی	۶
شکل ۲-۳: طیف فوتولومینسانس اکسید روی	۸
شکل ۲-۴: طرحواره‌ای از سطوح DLEs در نمونه اکسید روی آلائیده شده با مس	۹
شکل ۲-۵: طرحواره سازوکار VLS	۱۱
شکل ۲-۶: سازوکارهای رشد الف) بخار- مایع- جامد، ب) خود هسته‌سازی	۱۲
شکل ۲-۷: تصاویر میکروسکوپ الکترونی روبشی گسیل میدانی ساختارهای رشدیافته در دمای منبع $850^{\circ}C$	۱۶
الف) پودر گرافیت، ب) پودر کربن سیاه	۱۶
شکل ۲-۸: تصاویر میکروسکوپ الکترونی روبشی گسیل میدانی ساختارهای رشدیافته روی بستر $Si(100)$ در دمای کوره الف) $1100^{\circ}C$ ، ب) $1150^{\circ}C$ ، ج) $1200^{\circ}C$	۱۷
شکل ۲-۹: تصاویر میکروسکوپ الکترونی روبشی گسیل میدانی ساختارهای رشدیافته روی بستر سیلیکن جای داده شده در الف) $6\text{ cm}$ ، ب) $1\text{ cm}$ ، ج) $15\text{ cm}$ از مرکز	۱۷
شکل ۲-۱۰: تصاویر میکروسکوپ الکترونی روبشی گسیل میدانی ساختارهای رشدیافته روی بستر سیلیکن در مدت زمان الف) $15\text{ min}$ ، ب) $30\text{ min}$ ، ج) $45\text{ min}$ ، د) $60\text{ min}$	۱۸
شکل ۱-۳: کوره سه منطقه‌ای	۲۰
شکل ۲-۳: طرحواره فرآیند رشد	۲۱
شکل ۳-۳: طرحواره‌ای از روش کار سیستم XRD	۲۳
شکل ۳-۴: طرحواره‌ای از روش کار دستگاه SEM	۲۴
شکل ۳-۵: الگوی سطوح انرژی گذارهای اساسی در پراکندگی رامان خودبه‌خودی	۲۵
شکل ۳-۶: جابه‌جایی یونی مدهای فونونی اپتیکی در اکسید روی	۲۶
شکل ۱-۴: نمودار توزیع دمایی کوره	۲۹
شکل ۲-۴: توزیع هوای ورودی و بخارهای مواد اولیه در محیط آزمایش	۳۰
شکل ۳-۴: الگوی پراش نمونه‌های رشدیافته روی بستر سیلیکن با مقادیر متفاوت پودر اکسید مس (II) در مواد اولیه غیرآمیخته	۳۱

شکل ۴-۴: تصاویر ریخت‌سطحی نمونه‌های رشدیافته روی بستر سیلیکن در ناحیه یکسان، با مقادیر متفاوت، الف) ۰ گرم، ب) ۰/۱ گرم، ج) ۰/۱۵ گرم پودر اکسید مس (II) در مواد اولیه ..... ۳۲

شکل ۴-۵: ناحیه‌های متفاوت دمایی در طول فرآیند رشد ..... ۳۳

شکل ۴-۶: تصاویر ریخت‌سطحی نمونه رشدیافته در ناحیه ۳ روی بستر سیلیکن، بدون حضور پودر اکسید مس (II) در مواد اولیه ..... ۳۴

شکل ۴-۷: تصاویر ریخت‌سطحی نمونه‌های رشدیافته روی بستر سیلیکن با حضور ۰/۱ گرم پودر اکسید مس (II) در مواد اولیه، الف) ناحیه ۳، ب) ناحیه ۴، ج) ناحیه ۵ ..... ۳۵

شکل ۴-۸: تصاویر ریخت‌سطحی نمونه‌های رشدیافته روی بستر کوارتز، با حضور ۰/۱ گرم پودر اکسید مس (II) در مواد اولیه، الف) ناحیه ۱، ب و ج) ناحیه ۳، د) ناحیه ۵ ..... ۳۶

شکل ۴-۹: حضور ناخالصی مس در انتهای ساختار ..... ۳۷

شکل ۴-۱۰: تصاویر ریخت‌سطحی نمونه‌های رشدیافته با حضور ۰/۱ گرم پودر اکسید مس (II) در مواد اولیه روی بسترهای الف) سیلیکن ناحیه ۳، ب) سیلیکن ناحیه ۵، ج) کوارتز ناحیه ۶ ..... ۳۸

شکل ۴-۱۱: طیف رامان نمونه‌های رشدیافته با مقادیر متفاوت پودر اکسید مس (II) در مواد اولیه غیرآمیخته و نمونه ۰/۱ گرم پودر اکسید مس (II) در مواد اولیه آمیخته ..... ۳۹

شکل ۴-۱۲: طیف جذب اپتیکی نمونه‌های رشدیافته با مقادیر متفاوت پودر اکسید مس (II) در مواد اولیه غیرآمیخته ..... ۴۰

شکل ۴-۱۳: گاف نواری نمونه‌های با مقادیر متفاوت پودر اکسید مس (II) در مواد اولیه غیرآمیخته ..... ۴۱

شکل ۴-۱۴: طیف نورتایی نمونه‌های با مقادیر متفاوت پودر اکسید مس (II) در مواد اولیه غیرآمیخته ..... ۴۳

شکل ۴-۱۵: طیف نورتایی نمونه‌های رشدیافته بر بسترهای متفاوت در مواد اولیه غیرآمیخته با پودر اکسید مس (II) ..... ۴۴

شکل ۴-۱۶: طیف نورتایی نمونه‌های رشدیافته بر بسترهای متفاوت با ۰/۱ گرم پودر اکسید مس (II) در مواد اولیه آمیخته و نمونه‌های بدون حضور آن ..... ۴۵

## فهرست جدول‌ها

صفحه	عنوان
۲۱	جدول ۱-۳: ابعاد اجزای مورد استفاده در کوره
۲۷	جدول ۲-۳: ضرایب جذب
	جدول ۱-۴: پارامترهای شبکه محاسبه شده برای نمونه‌های رشدیافته با مقادیر متفاوت پودر اکسید مس (II)
۳۲	در مواد اولیه
۴۲	جدول ۲-۴: مقادیر بدست آمده برای گاف نواری

## فصل اول

### مقدمه

تمرکز پژوهشگران روی اکسید روی به چندین دهه قبل برمی‌گردد. مطالعه پارامترهای شبکه در سال ۱۹۳۵ [۱]، ویژگی‌های اپتیکی در سال ۱۹۵۴ [۲]، ویژگی‌های نوسانی با پراکندگی رامان در سال ۱۹۶۶ [۳] و رشد با روش انتقال بخار شیمیایی در سال ۱۹۷۰ بدست آمده است [۴]. توجه جدید با گسترش تکنولوژی‌های رشد برای ساخت تک‌بلورها و لایه‌های برآرایی<sup>۱</sup> با کیفیت بالا، میزان دسترسی به بسترهای با کیفیت بالا، گزارش‌های رسانش نوع p که درک ابزارهای الکترونیک و الکترونیک نوری را ممکن می‌سازد، رفتار فرومغناطیسی اکسید روی وقتی با فلزهای واسطه آلاینده می‌شود و ساختارهای جدید اکسید روی در مقیاس نانو که با افزایش نسبت سطح به حجم ویژگی‌های بی‌نظیری به نمایش می‌گذارد، تقویت شده است [۵]. انواع گوناگون نانو ساختارهای اکسید روی از قبیل نانوسیم، نانومیله، نانونوار، نانوشانه، نانوحلقه، نانوفنر، نانومیخ، نانوپروانه، نانوجل با روش‌های بی‌شماری ساخته شده است [۶-۱۰].

اکسید روی یک ماده صنعتی مهم از خانواده ترکیب‌های گروه II-VI است. به دلیل ویژگی‌های منحصر به فرد در ساختار نوار انرژی و انرژی بستگی اکسایتونی، در متن پژوهش‌های

---

<sup>1</sup> Epitaxial

علمی پیشرفته قرار گرفته است. این ماده یک نیمرسانا با انرژی گاف نواری مستقیم پهن است که نسبت به نور مرئی شفاف است و انرژی بستگی اکسایتونی بزرگی دارد که بازده نورتایی گسیل نور را افزایش می‌دهد. بنابراین اکسید روی دارای کاربردهای بالقوه در حوزه دیودهای لیزری، حسگرهای گازی، ابزارهای الکترونیک نوری و تبدیل انرژی خورشیدی است. به علت ویژگی‌های رسانای شفاف، رسانندگی الکتریکی بالا و عبور اپتیکی در ناحیه مرئی و از طرفی هزینه پایین، فراوانی و غیرسمی بودن برای کاربردهایی مثل الکترودهای رسانای شفاف در نمایشگرهای صفحه تخت، سلول‌های خورشیدی بسیار ایده‌آل است. اکسید روی می‌تواند روی بسترهای ارزان مثل شیشه در دمای نسبتاً پایین رشد داده شود. به علت بزرگی مساحت سطح در شکل نانوساختاری، ویژگی حسگری‌اش افزایش می‌یابد. در نهایت اکسید روی زیست‌سازگار و ایمن می‌باشد و می‌تواند در کاربردهای پزشکی به راحتی و بدون روکش به کار رود. با این ویژگی‌های جالب، اکسید روی می‌تواند زمینه‌های پژوهشی گوناگونی در آینده ایجاد کند. لازمه استفاده از کاربردهای مختلف این ماده، کنترل کامل ساختارها و ویژگی‌های آن از روش کنترل دقیق فرآیندهای رشد است [۱۱-۱۳]. اکسید روی یک ماده جالب و پیچیده با تنوعی از ساختارهای متفاوت است که هر کدام از این ساختارها می‌تواند با سازوکارهای رشد متفاوت، در یک محدوده گسترده‌ای از شرایط ترمودینامیکی بدست آید [۱۲-۱۵]. از این رو مطالعه روش رشد و مشخصه‌یابی ساختارهای اکسید روی، توجه زیادی را به خود جلب کرده است.

هدف از این پژوهش رشد ساختارهای اکسید روی به روش کربوترمال<sup>۱</sup> در حضور اکسید مس (II) و بررسی نقش پارامترهایی مانند گرادیان دمایی، نوع بستر و فاصله بستر از بوتله در ویژگی‌های آن است. به بررسی تغییر در ساختار بلوری و بازآرایی فازی، ریخت‌شناسی سطحی، امکان‌های نورتایی ساختارهای اکسید روی در حضور ساختار اکسید مس و مقایسه نسبت به نمونه‌های بدون حضور آن پرداخته می‌شود.

در فصل دوم با عنوان بررسی منابع و پیشینه پژوهش، به معرفی ویژگی‌های اکسید روی و کاربردهای آن، سازوکارهای رشد و تکنیک‌های مورد استفاده از این سازوکارها و در پایان به

---

<sup>1</sup> Carbothermal

بررسی روش رشد کربوترمال از زیرشاخه‌ی تکنیک انتقال فاز بخار که در این پایان‌نامه به کار برده شده است، پرداخته می‌شود. در فصل سوم به شرح کار آزمایشگاهی در دو بخش تهیه نمونه‌ها و روش‌های مشخصه‌یابی آن پرداخته می‌شود. در فصل چهارم ویژگی‌های ساختاری و اپتیکی پوشش‌ها در دو حالتی که مواد اولیه غیرآمیخته با پودر اکسید مس (II) و مواد اولیه آمیخته با پودر اکسید مس (II) هستند، بررسی می‌شود. تأثیر پارامترهایی مانند مقادیر متفاوت پودر اکسید مس (II) در مواد اولیه، نوع بستر و فاصله بستر از بوته در تغییر ویژگی‌های ساختاری و اپتیکی نمونه‌ها در دو حالت بیان شده بررسی می‌شود. در پایان داده‌ها و نتایج مربوط به ویژگی‌های نمونه‌های رشدیافته تجزیه و تحلیل می‌شود.



## فصل دوم

### بررسی منابع و پیشینه پژوهش

#### ۱-۲ مقدمه

در این فصل ابتدا معرفی کوتاهی از ویژگی‌های اکسید روی و کاربردهای مختلف آن آورده شده است. در ادامه به‌طور خلاصه تکنیک‌های ساخت و سازوکارهای متفاوت رشد بررسی شده است. در پایان تکنیک انتقال فاز بخار و روش کربوترمال که در این پژوهش استفاده شده، معرفی شده است.

#### ۲-۲ اکسید روی، ویژگی و کاربرد

در سال‌های اخیر اکسید روی توجه بسیاری را در نشست‌های علمی به‌عنوان یک "ماده آینده" جلب کرده است، هر چند که مطالعه آن به‌طور گسترده از سال ۱۹۳۵ آغاز شده است [۱۶]. اکسید روی یک ترکیب نیمرسانا از خانواده گروه II-VI، با گاف‌نوری پهن و مستقیم  $3.37 eV$  در دمای اتاق است که برای کاربردهای الکترونیک نوری با طول‌موج کوتاه مناسب می‌باشد [۱۷]. این ماده نسبت به نور مرئی شفاف است و رسانایی الکتریکی بالایی دارد. اکسید روی دارای انرژی بستگی اکسایتونی<sup>۱</sup>  $60 meV$  است [۱۷]. بزرگ‌ترین مقدار انرژی اکسایتونی

---

<sup>1</sup> Excitonic binding energy

در بین ترکیب‌های نیمرسانای II-VI، که راه را برای گسیلنده‌ی اکسایتونی لبه‌نواری قوی حتی در دمای اتاق هموار می‌کند. این مقدار انرژی بستگی اکسایتونی ۲/۴ برابر انرژی گرمایی در دمای اتاق است. مقاومت تابشی بالای آن در برابر انرژی مگاالکترونی تابش پروتون، زمینه را برای کاربرد در ابزارهای فضایی و کاربردهای هسته‌ای فراهم کرده است [۱۹، ۱۸]. برای فراهم‌آوردن زمینه کاربرد یک نیمرسانا در ابزارهای الکترونیک نوری، مهندسی گاف‌نواری یک گام مهم در توسعه ابزار است. آلیاژی کردن<sup>۱</sup> اکسید روی با  $MgO$  و  $CdO$ ، به ترتیب باعث افزایش و کاهش انرژی گاف‌نواری می‌شود [۲۰، ۱۸].

در سال‌های اخیر توجه زیادی به نیمرساناهای مغناطیسی رقیق<sup>۲</sup> به علت امکان کاربرد از درجه آزادی اسپین شده است. این مواد انتخاب مناسبی برای کاربردهای صنعتی شامل اسپین+الکترون هستند (الکترونیک مبتنی بر اساس انتقال الکترون به همراه اسپین آن). در بین مواد نیمرسانای اکسیدی گروه II-VI، اکسید روی آلیاژ شده با فلزهای واسط توجه جدیدی را به عنوان یک ماده فرومغناطیسی امیدبخش با دمای کوری بالاتر از دمای اتاق به خود جلب کرده است [۱۸].

اکسید روی در هر سه ساختار شش‌گوشی ورتزایت<sup>۳</sup> و مکعبی زینک بلند<sup>۴</sup> (سولفید روی) و به ندرت نمکی<sup>۵</sup> بلوری می‌شود (شکل ۲-۱). پیوندها در شبکه‌ی بلوری، یک حالت هیبرید شده‌ی  $sp^3$  دارند که به هندسه‌ی چهاروجهی منجر می‌شود. هر یون روی، چهار یون اکسیژن در آرایش فضایی چهار وجهی دارد و برعکس، که پیوند کووالان تشکیل می‌دهند (شکل ۲-۲ الف). پیوند اکسید روی، قطبش‌پذیری قابل توجهی نیز دارد که به تفاوت الکترونگاتیوی عناصر روی و اکسیژن مرتبط است. بنابراین اکسید روی، در مرز بین نیمرساناهای یونی و کووالان است. هندسه‌ی پیوند هماهنگ چهاروجهی، ساختار بلوری اکسید روی را تعیین می‌کند.

---

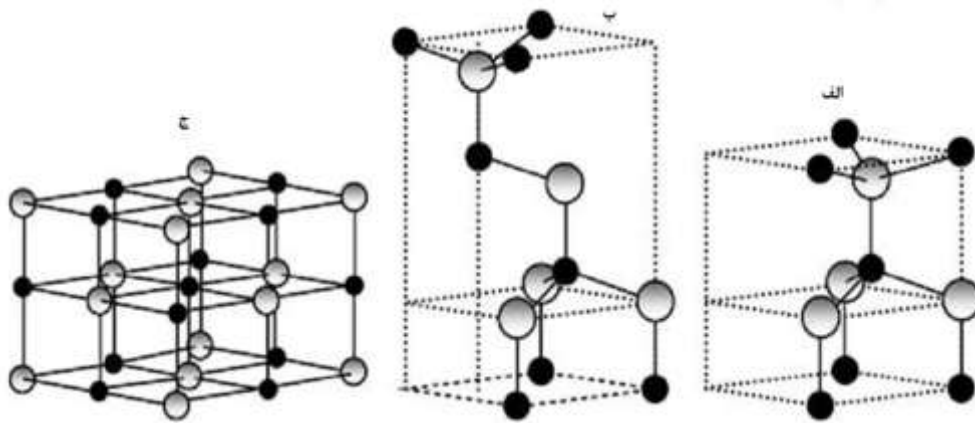
<sup>1</sup> Alloying

<sup>2</sup> Dilute magnetic semiconductor

<sup>3</sup> Wurtzite

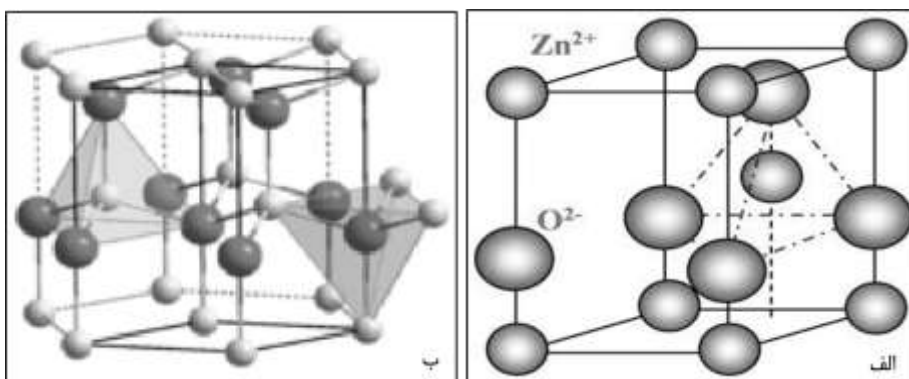
<sup>4</sup> Zinc-blende

<sup>5</sup> Rocksalt



شکل ۱-۲: ساختارهای سه‌گانه الف) ورتزایت، ب) زینک بلند، ج) نمکی اکسید روی [۵].

در یک شبکه‌ی بلوری، چهاروجهی‌های مجاور، لایه‌های دوتایی که هر کدام شامل یک لایه روی و یک لایه اکسیژن است و در طول محور C انباشته شده‌اند، تشکیل می‌دهند (شکل ۲-۲). این آرایش چهاروجهی به هر دو ساختار ورتزایت و مکعبی زینک بلند منجر می‌شود، که به توالی دسته‌های دوتایی بستگی دارد.



شکل ۲-۲: هندسه چهاروجهی، ب) عدم تقارن ساختار ورتزایت اکسید روی [۲۱].

ساختار ورتزایت فاز پایدار ترمودینامیکی اکسید روی است که قطبش‌پذیری بالای پیوند، دلیلی بر برگزیده بودن این ساختار است [۵]. ساختار زینک بلند شبه پایدار است و با رشد روی بسترهای مکعبی پایدار می‌شود. ساختار نمکی این ماده در فشارهای نسبتاً بالایی بدست می‌آید. ساختار ورتزایت از دو زیرشبکه شش‌گوشی در هم فرو رفته تشکیل شده که هر یک شامل یک نوع اتم است. پارامترهای شبکه در شرایط محیطی  $a = b = 0.3249 \text{ nm}$  و  $c = 0.52042 \text{ nm}$ ، با نسبت  $c/a = 1.633$  است و چگالی جرمی اکسید روی برابر

را شامل می‌شود. نبود یک مرکز تقارن در ساختار ورتزایت، منجر به ویژگی پیزوالکتریکی و پیروالکتریکی قوی می‌شود.

از لحاظ مکانیکی اکسید روی یک ماده نسبتاً نرم است. ظرفیت گرمایی و رسانندگی گرمایی بالا، انبساط گرمایی کم و دمای ذوب بالای آن، برای صنعت سرامیک مفید است [۲۴،۲۳]. در بین نیمرساناهای چهاروجهی، بزرگ‌ترین تانسور پیزوالکتریکی را در مقایسه با آلومینیوم نیتريد<sup>۱</sup> و گالیم نیتريد<sup>۲</sup> دارد که این ویژگی آن را یک ماده مهم صنعتی برای بسیاری از کاربردهای پیزوالکتریکی که به جفت‌شدگی الکترومکانیکی بزرگ نیاز دارد، تبدیل کرده است [۲۵].

اکسید روی آلائیده نشده به علت حضور نقص‌های درون‌شبکه‌ای و تهی‌جاها [۲۶،۲۲] و ناخالصی هیدروژن [۲۷] به طور ذاتی نیمرسانای نوع n است. دستیابی به اکسید روی نوع p پایا و قابل بازتولید، یکی از مشکلات شناخته‌شده اکسید روی برای پیشرفت کاربردهای گسترده در صنعت الکترونیک و فوتونیک است [۲۸،۲۲،۱۷]. اکسید روی به علت ولتاژ آستانه پایین، در وریستورها<sup>۳</sup> و به علت گاف‌نواری پهن و مقاومت خوب به دما، ولتاژ بالا و تابش، در ناحیه فعال ترانزیستورها کاربرد دارد [۲۲].

در طیف فوتولومینسانس<sup>۴</sup> دمای اتاق ساختارهای اکسید روی دو نوار، مشخصه‌یابی شده است. یکی در حوالی طول‌موج  $380\text{ nm}$  در ناحیه فرابنفش و دیگری بین  $450\text{--}600\text{ nm}$  در ناحیه مرئی طیف الکترومغناطیسی مرکزیت دارد (شکل ۲-۳). گسیل فرابنفش، که گسیل نزدیک لبه‌نواری<sup>۵</sup> نیز نامیده می‌شود از بازترکیب اکسایتون‌های آزاد در فرآیند برخورد اکسایتون-اکسایتون ناشی می‌شود [۲۹]. ولی گسیل مرئی که گسیل سطح عمیق<sup>۶</sup> نامیده می‌شود، از گسیل نقص‌ها ناشی می‌شود [۳۰] و به شرایط و روش رشد بستگی دارد [۳۱]. در اینجا به توضیح باند گسیل سبز که در ساختارهای نهشته‌شده در فاز بخار مشاهده می‌شود، در

<sup>1</sup> Aluminum Nitrid (AlN)

<sup>2</sup> Gallium Nitride (GaN)

<sup>3</sup> Varistor

<sup>4</sup> Photoluminescence (PL)

<sup>5</sup> Near Band edge Emission (NBE)

<sup>6</sup> Deep Level Emissions (DLEs)