

بِسْمِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ



دانشگاه ولی عصر (عج) رفسنجان

دانشکده‌ی علوم

گروه فیزیک

پایان‌نامه‌ی کارشناسی‌ارشد

رشته‌ی فیزیک گرایش حالت جامد

سنتز نانوذرات کادمیم تلوراید با تابش امواج میکروویو و بررسی خواص

اپتیکی آن‌ها

استاد راهنما

دکتر مهدی ملایی

استاد مشاور

دکتر مسعود کریمی پور

نگارنده

حلیمه هاشمی نژاد

مهر ۹۳

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



دانشگاه ولی عصر (عج) رفسنجان

دانشکده‌ی علوم پایه

گروه فیزیک

پایان‌نامه‌ی کارشناسی‌ارشد

رشته‌ی فیزیک گرایش حالت جامد

حلیمه هاشمی نژاد

سنتز نانوذرات کادمیم تلوراید با تابش امواج مایکروویو و بررسی خواص  
اپتیکی آن‌ها

در تاریخ ۹۳/۷/۸ توسط هیأت داوران زیر بررسی و با درجه‌ی..... به تصویب نهایی رسید.

- ۱- استاد راهنمای پایان‌نامه دکتر مهدی ملایی با مرتبه‌ی علمی استادیار امضاء
- ۲- استاد مشاور پایان‌نامه دکتر مسعود کریمی‌پور با مرتبه‌ی علمی استادیار امضاء
- ۳- استاد داور داخل گروه محمد خان‌زاده با مرتبه‌ی علمی استادیار امضاء
- ۴- استاد داور داخل گروه دکتر احمدی با مرتبه‌ی علمی استادیار امضاء
- ۵- نماینده‌ی تحصیلات تکمیلی دکتر روح‌ا... صابری با مرتبه‌ی علمی استادیار امضاء

## چکیده

در این پژوهش ویژگی‌های نورتایی نانوذرات CdTe (کادمیم تلوراید) و نانوذرات هسته-پوسته CdTe@CdS بررسی شده است. نانوذرات CdTe و CdTe@CdS با استفاده از یک واکنش فعال شده با تابش مایکروویو سنتز شده‌اند. آنالیز پراش پرتوی ایکس (XRD) برای هر دو نانوذرات سنتز شده، ساختار کریستالی مکعبی را نشان داد، اما قله‌های پراش پرتو ایکس نانوذرات CdTe@CdS به سمت زوایای بزرگتر جابجا شدند. با استفاده از تصاویر میکروسکوپ الکترونی عبوری (TEM)، اندازه نانوذرات CdTe و CdTe@CdS به ترتیب در حدود ۲/۵nm و ۳/۵nm به دست آمد. در این روش، طیف جذبی (UV-Vis) و فوتولومینسانس (PL) نشان داد که لبه جذب و قله گسیل نانوذرات CdTe، از نزدیک آبی به نزدیک قرمز جابجا شده‌اند. با رشد CdS اطراف نانوذرات CdTe، یک جابجایی قرمز در طیف جذب و گسیل مشاهده شد. بازدهی کوانتومی فوتولومینسانس (PL) برای نانوذرات CdTe و نانوذرات هسته-پوسته CdTe@CdS به ترتیب ۲۳٪ و ۳۸٪ به دست آمد. در مرحله رشد پوسته CdS، افزایش ضخامت پوسته CdS تنها با افزایش زمان تابش مایکروویو امکان‌پذیر است، که این تغییرات منجر به جابجایی قرمز لبه باند و جابجایی طیف PL به سمت طول‌موج‌های بلندتر می‌شود.

**واژگان کلیدی:** فوتولومینسانس، CdTe، CdTe@CdS، تابش مایکروویو

فهرست مطالب

صفحه	عنوان
۱	فصل اول
۱	مقدمه
۳	فصل دوم
۳	مبانی نورتابی، روش‌های ساخت و کاربردهای نانومواد
۳	۱-۲-مقدمه
۴	۲-۲-نوارهای انرژی در مواد نیم‌رسانا
۴	۳-۲-نورتابی
۶	۲-۳-۱-فوتولومینسانس (نورتابی با فوتون)
۶	۲-۳-۱-انواع فوتولومینسانس
۶	۲-۳-۱-۱-تابش خود به خودی
۷	۲-۳-۱-۲-فلورسانس
۷	۲-۳-۱-۳-فسفرسانس
۸	۲-۳-۲-الکترولومینسانس (نورتابی الکتریکی)
۹	۲-۳-۳-کاتدولومینسانس (نورتابی کاتدی)
۱۰	۲-۴-۲-نورتابی سیستم‌های نانو ساختار
۱۰	۲-۴-۱-نانوساختارهای دوبعدی
۱۰	۲-۴-۲-نانوساختارهای یک بعدی
۱۰	۲-۴-۳-نانوساختارهای بدون بعد
۱۲	۲-۵-۲-فرایند واهلش اکسیتون‌ها
۱۳	۲-۵-۱-گسیل لبه نواری
۱۵	۲-۵-۳-گسیل فعال ساز
۱۵	۲-۵-۴-تبدیل داخلی
۱۵	۲-۵-۴-تبدیل خارجی
۱۶	۲-۵-۳-باز ترکیب اوژه
۱۶	۲-۶-۲-رشد کلوییدی نانوذرات نیم‌رسانا
۱۶	۲-۷-نقش عامل‌های پوششی در تولید نانوذرات
۱۹	۲-۸-نانوذرات هسته-پوسته (core-shell)

۲۲	۱-۸-۲-دلایل تشکیل پوسته بر روی هسته: .....
۲۳	۲-۸-۲-مزایای استفاده از پوسته‌ی نانوذره‌ای به جای مولکول‌های آلی: .....
۲۴	۱-۹-۲-رویکرد بالا به پایین .....
۲۴	۲-۹-۲-رویکرد پایین به بالا .....
۲۷	۳-۹-۲-سنتز با تابش میکروویو .....
۲۷	۱-۳-۹-۲-تاریخچه .....
۲۸	۲-۳-۹-۲-تئوری میکروویو .....
۲۸	۳-۳-۹-۲-شرحی بر میکروویو .....
۲۹	۴-۳-۹-۲-فرایند گرمادهی میکروویو به ماده .....
۳۱	۵-۳-۹-۲-علت افزایش سرعت واکنش با میکروویو .....
۳۳	۱۰-۲-کاربردهای نانوذرات نیم‌رسانا .....
۳۳	۱-۱۰-۲-نشان‌گرهای بیولوژیکی .....
۳۴	۲-۱۰-۲-دیودهای نور-گسیل .....
۳۴	۳-۱۰-۲-عناصر مدارهای نوری .....
۳۴	۴-۱۰-۲-مولدهای انرژی خورشیدی .....
۳۵	<b>فصل سوم .....</b>
۳۵	<b>نانوساختارهای کادمیم تلوراید و مروری بر پژوهش‌های انجام شده .....</b>
۳۵	۱-۳-مقدمه .....
۳۶	۲-۳-مروری بر پژوهش‌های انجام شده .....
۵۳	<b>فصل چهارم .....</b>
۵۳	<b>مواد و روش‌ها .....</b>
۵۳	۱-۴-مقدمه .....
۵۳	۲-۴-مواد و دستگاه‌های مورد استفاده برای انجام آزمایش‌ها .....
۵۴	۳-۴-رشد نانوذرات کادمیم تلوراید (CdTe) به روش تابش میکروویو .....
۵۴	۱-۳-۴-مقدمه .....
۵۵	۲-۳-۴-جزئیات آزمایش .....
۵۵	۱-۲-۳-۴-سنتز نانوذرات CdTe .....
۵۸	۲-۲-۳-۴-سنتز نانوذرات هسته-پوسته CdTe@CdS .....

---

۶۱	فصل پنجم
۶۱	نتایج و بحث
۶۱	۱-۵-مقدمه
۶۱	۲-۵-نتایج حاصل از آنالیز نانوذرات CdTe
۶۱	۱-۲-۵-آنالیز XRD
۶۲	۲-۲-۵-آنالیز HR-TEM
۶۳	۳-۲-۵-آنالیز UV و PL
۶۷	۳-۵-نتایج حاصل از آنالیز نانوذرات هسته-پوسته CdTe@CdS
۶۷	۱-۳-۵-آنالیز XRD
۶۸	۲-۳-۵-آنالیز HR-TEM
۶۹	۳-۳-۵-آنالیز UV و PL
۷۰	۴-۳-۵-بازدهی کوانتومی نورتابی (PL QY)
۷۲	۴-۵-نتیجه گیری
۷۲	۵-۵-پیشنهادها
۷۳	منابع



فهرست شکل‌ها

عنوان	صفحه
شکل ۱-۲) نمایش تراز انرژی برای نیم‌رساناهای دارای گاف انرژی (a) مستقیم (b) غیرمستقیم [۴۱]	۵
شکل ۲-۲) نمایش طرحواره از نورتایی با فوتون [۳۸]	۶
شکل ۳-۲) فرایند جذب و تابش خود به خودی یک فوتون	۷
شکل ۴-۲) مقایسه حالت‌های فلورسانس و فسفرسانس [۳۸]	۸
شکل ۵-۲) نمایش طرحواره نورتایی الکتریکی [۴۲]	۹
شکل ۶-۲) نمایش طرحواره از نورتایی کاندی [۴۲]	۹
شکل ۷-۲) (۱) توصیف الگووار سیستم‌های $0D(d)$ , $1D(c)$ , $2D(b)$ , $3D(a)$ (۲) چگالی حالت انرژی برای سیستم‌های $0D(d)$ , $1D(c)$ , $2D(b)$ , $3D(a)$ [۳۸]	۱۲
شکل ۸-۲) نورتایی با فوتون و جابجایی استوکس [۳۸]	۱۳
شکل ۹-۲) عامل‌های پوششی (تیول‌ها) در رشد آبی نانوذرات	۱۷
شکل ۱۰-۲) مراحل رشد و هسته‌سازی نانوذرات	۱۷
شکل ۱۱-۲) الف) بهم‌چسبیدگی خوشه‌های اولیه در مراحل جوانه‌زنی، ب) جدا شدن ذرات و تشکیل نانوذرات اولیه	۱۸
شکل ۱۲-۲) سطح روی نانوذرات CdTe پوشانده شده با عامل پوششی	۱۹
شکل ۱۳-۲) نانوذرات هسته-پوسته نوع اول و دوم	۲۰
شکل ۱۴-۲) نانوذرات هسته-پوسته CdTe/CdS نوع دوم و بازترکیب مستقیم و غیر مستقیم (a)	۲۱
نانوذرات هسته-پوسته CdTe/ZnS نوع اول (b)	۲۱
شکل ۱۵-۲) پوشش آلی نانوذرات (a) پوشش غیر آلی (b) و مقایسه گاف انرژی نانوذرات هسته-پوسته	۲۳
شکل ۱۶-۲) طیف الکترومغناطیسی [۱۱]	۲۸
شکل ۱۷-۲) فیزیک مایکروویو [۱۱]	۲۹
شکل ۱۸-۲) سنتز شیمیایی با گرمادهی [۱۱]	۲۹
شکل ۱۹-۲) طرحواره‌ای از نمونه گرم شده با مایکروویو [۱۱]	۳۰
شکل ۲۰-۲) مشخصات تراز انرژی واکنش [۱۱]	۳۱
شکل ۱-۳) (A) طیف جذب (UV-Vis) و (B) طیف PL نانوذرات هسته-پوسته CdTe@CdS	۳۷
سنتز شده در فاز آبی	۳۷

- شکل ۳-۲) تغییر رنگ آبی قله گسیل نانوذرات هسته-پوسته CdTe@CdS (a) و نانوذرات CdTe پوشیده شده با تیوگلیکولیک اسید (b) در طی زمانهای مختلف حرارت‌دهی..... ۳۸
- شکل ۳-۳) طیف PL نانوذرات CdTe پس از مدت زمان‌های مشخص شده..... ۴۰
- شکل ۳-۴) مقادیر توده‌ای موقعیت لبه نواری و شکاف‌های نواری نانوذرات هسته-پوسته نوع II CdTe@CdS و CdTe@CdS..... ۴۱
- شکل ۳-۵) مقایسه طیف PL نانوذرات CdTe@CdSe (A) و CdTe@CdS (B) با طیف PL نانوذرات CdTe(a)..... ۴۱
- شکل ۳-۶) تصویر HRTEM و نمودار هیستوگرام توزیع اندازه نانوذرات CdTe (A), (B) و CdTe@CdSe (C)..... ۴۲
- شکل ۳-۷) الگوهای پراش پرتو ایکس برای نانوذرات CdTe, CdTe@CdS, CdTe@CdSe..... ۴۳
- شکل ۳-۸) طیف فوتولومینسانس نانوذرات هسته-پوسته CdTe@CdS با نسبت‌های مولی متفاوت..... ۴۴
- شکل ۳-۹) طیف (PL) نمونه با نسبت‌های مولی متفاوت هسته-پوسته CdTe@CdS..... ۴۵
- شکل ۳-۱۰) طیف جذبی نانوذرات هسته-پوسته CdTe@CdS با نسبت‌های مولی مختلف..... ۴۶
- شکل ۳-۱۱) اختلاف میان قله PL و اولین اکسیتون نمونه‌های آزمایش شده..... ۴۷
- شکل ۳-۱۲) طیف جذبی و PL برای نانوذرات تهیه شده با میکروویو برای دمای ۱۰۰ درجه سانتیگراد (a) و ۱۲۰ درجه سانتیگراد (b)..... ۴۸
- شکل ۳-۱۳) طیف PL، بازدهی کوانتومی، FWHM(nm) نانوذرات هسته-پوسته CdTe@CdS تولید شده با میکروویو..... ۴۹
- شکل ۳-۱۴) نمایی از تابش نانوذرات هسته-پوسته CdTe@CdS که در معرض تابش نور UV قرار گرفته‌اند..... ۵۰
- شکل ۳-۱۵) طیف XRD نانوذرات CdTe و نانوذرات CdTe@CdS با ساختار مکعبی..... ۵۱
- شکل ۳-۱۶) تصاویر TEM (a)، HRTEM (b) و توزیع اندازه نانوذرات CdTe@CdS هسته-پوسته (c)..... ۵۱
- شکل ۴-۱) نمایی از پوشاندن سطح نانوذره با مولکول‌های آلی [۹]..... ۵۵
- شکل ۴-۲) نمایی از تولید محلول NaHTe<sup>-</sup> درون سرنگ..... ۵۶
- شکل ۴-۳) نمایی از تولید نانوذرات CdTe..... ۵۷
- شکل ۴-۴) یک سیستم میکروویو..... ۵۷

شکل ۴-۵) نمایی از نانوذرات CdTe تولید شده با زمان‌های مختلف تابش مایکروویو	۵۸
شکل ۵-۱) الگوی پراش پرتوی ایکس نانوذرات سنتز شده CdTe با تابش مایکروویو به مدت Min	۷۰
شکل ۵-۲) (a) تصویر HRTEM و (b) نمودار هیستوگرام توزیع اندازه نانوذرات CdTe با تابش مایکروویو به مدت Min ۷۰	۶۲
شکل ۵-۳) طیف جذبی و طیف فوتولومینسانس (PL) نانوذرات CdTe با تابش مایکروویو به مدت Min ۷۰	۶۳
شکل ۵-۴) (a) طیف جذبی و (b) نمودار اندازه شکاف انرژی نانوذرات CdTe با زمان‌های مختلف تابش مایکروویو	۶۴
شکل ۵-۵) طیف فوتولومینسانس (PL) نانوذرات CdTe با زمان‌های مختلف تابش مایکروویو	۶۵
شکل ۵-۶) نور گسیلی نانوذرات سنتز شده CdTe در زمان‌های مختلف تابش مایکروویو (طول موج نور UV تحریک کننده، ۳۶۵ nm)	۶۶
شکل ۵-۷) الگوی پراش پرتو ایکس نانوذرات CdTe و نانوذرات هسته-پوسته CdTe@CdS	۶۷
شکل ۵-۸) (a) تصویر HRTEM و (b) نمودار هیستوگرام توزیع اندازه نانوذرات هسته-پوسته CdTe@CdS	۶۸
شکل ۵-۹) (a) طیف جذبی و (b) طیف PL نانوذرات CdTe و نانوذرات هسته-پوسته CdTe@CdS	۶۹
شکل ۵-۱۰) (a) طیف جذبی و (b) طیف PL نانوذرات هسته-پوسته CdTe@CdS با زمان‌های مختلف تابش مایکروویو	۷۰
شکل ۵-۱۱) نور گسیلی نانوذرات هسته-پوسته CdTe@CdS در زمان‌های مختلف تابش مایکروویو	۷۱

## فصل اول

### مقدمه

در سالهای اخیر فعالیت‌های پژوهشی در زمینه نانونیوسانها به علت کاربرد این مواد در قطعات الکترونیکی و اپتیکی مورد توجه بسیار قرار گرفته است [۳۸]. به دلیل بازدهی کوانتومی زیاد و چند منظوره بودن، نانوذراتی مانند کادمیم تلوراید (CdTe) کاربردهای گسترده‌ای پیدا کرده‌اند. از آنجاکه مواد نانوساختار ابعاد ۱-۱۰۰nm را دارند، بررسی رفتار این نانوساختارها بر اساس تئوری مکانیک کوانتومی استوار می‌باشد [۳۹]. نانوساختارها به علت محدودیت ابعاد به سه دسته تقسیم می‌شوند:

۱- نانوساختارهای صفر بعدی مانند نانوذرات، نانوپودرها و نانوخوشه‌ها

۲- نانوساختارهای یک بعدی مانند نانوسیم‌ها، نانوتیوپ‌ها و نانومیله‌ها

۳- نانوساختارهای دو بعدی مانند نانوفیلم‌ها یا صفحات نانویی

نانونیوسانها ویژگی‌های نورتایی غیرمعمولی را به دلیل اثر محدودیت کوانتومی<sup>۱</sup> از خود نشان می‌دهند [۳۸]. کادمیم تلوراید یکی از مهم‌ترین نیم‌رساناهای کشف شده است. این ماده یک نیم‌رسانا از گروه II-VI با ویژگی فیزیکی قابل توجه و شکاف انرژی ۱/۴۴eV در دمای اتاق است. ترکیبات II-VI به طور کلی دارای شکاف نواری پهن، جرم مؤثر و انرژی اکسیتون بزرگتری هستند [۱]. نانوبلورهای ZnS و CdTe و CdS به خاطر کاربردشان در دستگاه‌های الکترونیکی، اپتیکی و سلول‌های خورشیدی توجه زیادی را به خود جلب کرده‌اند [۴-۲].

---

<sup>۱</sup>Quantum confinement

روش‌های متعددی برای تهیه و ساخت مواد نانو وجود دارد که برخی از آنها عبارتند از: روش قوس الکتریکی<sup>۱</sup>، سل-ژل<sup>۲</sup>، سونو شیمی<sup>۳</sup>، احیاء شیمیایی<sup>۴</sup>، هیدروترمال<sup>۵</sup> یا سولوترمال<sup>۶</sup> و... [۶-۵]. اخیراً تابش مایکروویو به عنوان یک روش جدید و مورد علاقه، توجه زیادی را به خود جلب کرده است.

اگرچه سنتز نانونیم‌رساناهای گروه II-VI پوشیده شده با تیول‌ها<sup>۷</sup> در محیط آبی جایگزین مناسبی برای واکنش‌های آلی-فلزی محسوب می‌شود اما دسترسی گسترده به این نانوذرات دشوار است. از این‌رو رشد پوسته‌های پلیمری روی سطح نانوذرات هسته می‌تواند راهکار مناسبی برای بهبود سازگاری زیستی این نانوذرات به‌شمار رود [۷]. رشد این پوسته‌ها موجب افزایش اندازه نانوذرات می‌گردد و باعث افزایش خاصیت نورتابی آنها می‌شود.

روش سنتز نانوذرات در این پژوهش، جزو روش‌های پایین به بالای تابش امواج مایکروویو است. در این روش از یک ماده به عنوان منبع تولید کننده یون Te و از دو ماده دیگر به عنوان منبع تولید کننده یون‌های Cd و S استفاده می‌شود. از یک مولکول آلی برای پوشیدن سطح نانوذرات و ممانعت از رشد بی‌رویه آنها استفاده می‌شود که این مولکول با ایجاد بار منفی دور ذرات منجر به دافعه بین آنها و لذا جلوگیری از رشد بی‌رویه و رفتن به حالت توده می‌شود.

در فصل دوم مبانی نورتابی، روش‌های ساخت و کاربردهای نانومواد مورد بحث قرار می‌گیرد. در فصل سوم به مروری بر پژوهش‌های انجام شده در زمینه نانو ساختارهای کادمیم تلوراید و نانوذرات هسته-پوسته CdTe@CdS پرداخته می‌شود. در فصل چهارم مواد و روش‌ها و در فصل پنجم نتایج و بحث و در آخر هم نتیجه‌گیری کلی گرفته می‌شود.

---

<sup>۱</sup> Arc Discharge

<sup>۲</sup> Sol-gel

<sup>۳</sup> Sonochemical

<sup>۴</sup> Chemical Reduction

<sup>۵</sup> Hydrothermal

<sup>۶</sup> solvothermal

<sup>۷</sup> Thiol

## فصل دوم

### مبانی نورتابی، روش‌های ساخت و کاربردهای نانومواد

#### ۲-۱- مقدمه

نانوساختارها موادی هستند که ساختار آن‌ها در یک یا چند بعد از ماده، در بازه  $1-100\text{nm}$  می‌باشد. با کاهش اندازه در حدود نانومتری از محدوده مکانیک کلاسیک به مکانیک کوانتومی وارد می‌شویم و در نتیجه در این محدوده مواد رفتارهای کوانتومی دارند. خواص فیزیکی و شیمیایی این مواد نسبت به حالت توده تغییرات چشمگیری پیدا می‌کند [۳۸]. به علت محدودیت کوانتومی، کاهش ابعاد یک نیم‌رسانا در مقایسه با، یا کمتر از شعاع بوهر به صورت خیلی مؤثر بر روی گاف انرژی تأثیرگذار است. بنابراین یک روش برای تنظیم گاف، اندازه نانوکریستال است. این مشخصات به صورت قابل توجهی که متفاوت با مشخصات حالت توده است، زمینه‌های کاربردی نانونیم‌رساناها را افزایش داده است که شامل اپتوالکترونیک، کاتالیست، فتوولتایی [۴۰]، نمایشگرهای LED، برچسب‌های زیستی، حسگرها، سلول‌های خورشیدی، لیزرهای نقاط کوانتومی، آشکارسازهای IR و تصویربرداری بیولوژیکی می‌باشد [۳۸]. نانوذرات یا نانوبلورها دسته‌ی مهمی از نانوساختارها هستند که چنانچه دارای قطر  $1-30\text{nm}$  باشند نقاط کوانتومی نامیده می‌شوند.

### ۲-۲- نوارهای انرژی در مواد نیم‌رسانا

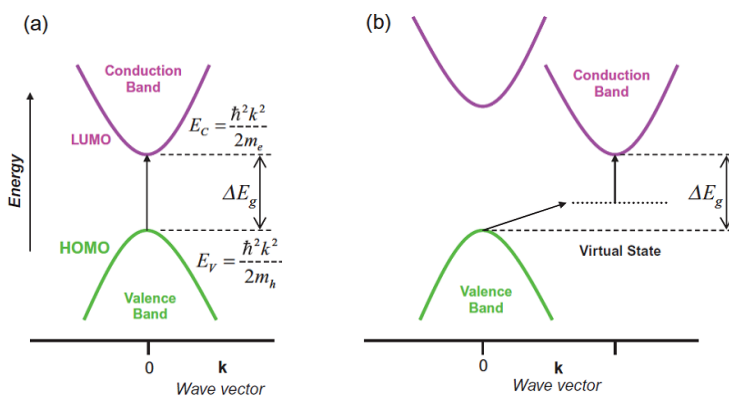
در مواد جامد توده، به دلیل هم‌پوشانی توابع موج الکترون با توابع موج الکترون‌های اتم‌های همسایه، به جای آن که الکترون منحصر به یک اتم باشد در نواری از انرژی‌های قابل دسترس است. در نیم‌رساناها و نارساناها حالت پایه الکترون به الکترون‌ها در نوار ظرفیت اطلاق می‌شود که با این الکترون‌ها به طور کامل پر شده است. در فلزات نوارهای ظرفیت و رسانش یا هم‌پوشانی کرده و یا فقط به طور نسبی پر هستند [۳۸].

مواد نیم‌رسانا در صفر کلوین ساختار مواد نارسانا را دارند، یعنی یک نوار ظرفیت پر که با یک گاف انرژی که خالی از تراز انرژی مجاز می‌باشد از نوار رسانش جدا شده است. حالت کوانتومی برانگیخته اغلب در نوار رسانش قرار دارد که خالی است و با یک گاف انرژی از نوار ظرفیت جدا شده است. گاف انرژی یک ماده نیم‌رسانا به‌گونه‌ای است که در دمای اتاق تعداد کمی الکترون از نوار ظرفیت برانگیخته می‌شوند و به نوار رسانش می‌روند و حفره‌ای را در نوار ظرفیت برجای می‌گذارند [۳۸].

### ۲-۳- نورتابی

وقتی الکترونی در یک نیم‌رسانا برانگیخته شود، سپس فرایند واهلش صورت گرفته و نوری را گسیل می‌کند که به این فرآیند نورتابی می‌گویند. برانگیختن الکترون در یک نیم‌رسانا، به سبب جذب انرژی از یک منبع خارجی مثل الکترون دیگر، فوتون و یا میدان الکتریکی رخ می‌دهد. الکترون برانگیخته، حالت کوانتومی که انرژی بالاتری از حالت پایه انرژی مینیمم را دارد، اشغال می‌کند. در یک نیم‌رسانا حالت پایه الکترونی معمولاً به الکترون‌ها در تراز ظرفیت که به طور کامل با الکترون‌ها پر شده است اشاره دارد. حالت کوانتومی برانگیخته در تراز رسانش قرار می‌گیرد که خالی است و توسط گاف انرژی از نوار ظرفیت جدا می‌شود بنابراین مینیمم انرژی برابر با گاف انرژی، برای تحریک یک الکترون درون نیم‌رسانا لازم است.

شکل (۱-۲) (a) نمودار تراز انرژی برای یک نیم‌رسانا با گاف انرژی مستقیم را نشان می‌دهد. در نیم‌رساناهای با گاف انرژی مستقیم، مکان‌های بالاترین حالت انرژی تراز ظرفیت (بالاترین اوربیتال مولکولی اشغال شده HOMO) و پایین‌ترین حالت انرژی تراز رسانش تا حد زیادی اشغال نشده (پایین‌ترین اوربیتال مولکولی غیر اشغال LUMO) در یک مقدار  $K$  از محور بزرگی بردار موج، قرار دارند و در نتیجه دارای احتمال بالای گسیل نور می‌باشند.



شکل ۲-۱) نمایش تراز انرژی برای نیم‌رساناهای دارای گاف انرژی (a) مستقیم (b) غیرمستقیم [۴۱]

برای یک نیم‌رسانای با گاف انرژی غیرمستقیم نشان داده شده در شکل (۲-۱)(b)، ماکزیمم تراز ظرفیت و مینیمم تراز رسانش مقدار متفاوت  $K$  را دارا می‌باشند. بنابراین، الکترون‌ها علاوه بر تغییر انرژی، احتیاج به تغییر در مقدار  $K$  را دارند. از این‌رو انتقال، احتیاج به تغییر در تکانه و انرژی دارد. به عبارت دیگر یک انتقال غیرمستقیم احتیاج به تحریک انرژی از یک الکترون، هم‌زمان با یک برهم‌کنش الکترون-فونون برای به‌دست آوردن تغییر تکانه دارد بدین علت، بازدهی جذب و باز ترکیب مواد با گاف انرژی مستقیم، تقریباً چهار برابر بزرگ‌تر از مواد با گاف انرژی غیرمستقیم است [۴۱].

همانطور که ذکر شد، نورتایی از نیم‌رساناها توسط تحریک الکترون به حالات انرژی بالاتر مشاهده می‌شود. چندین راه برای رسیدن به این برانگیزش وجود دارد [۴۱]. از جمله آن‌ها، می‌توان به موارد زیر اشاره کرد:

- فوتولومینسانس (PL)<sup>۱</sup>
- مکانولومینسانس<sup>۲</sup>
- الکترو لومینسانس (EL)<sup>۳</sup>
- ترمولومینسانس<sup>۴</sup>
- کاندولومینسانس (CL)<sup>۱</sup>
- کمی لومینسانس<sup>۲</sup>

<sup>۱</sup>Photoluminescence

<sup>۲</sup>Mechanoluminescence

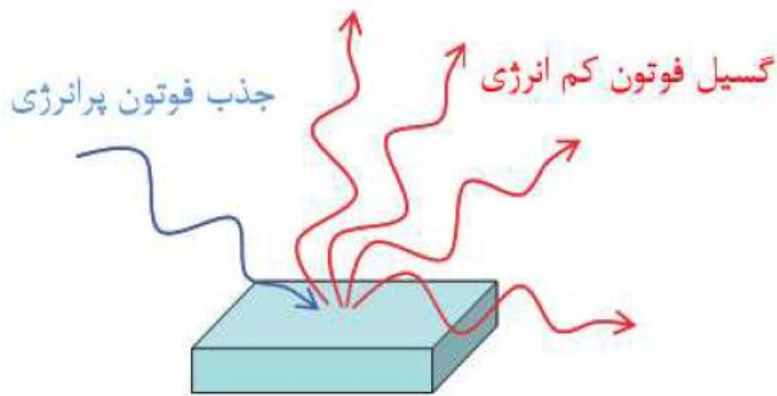
<sup>۳</sup>Electroluminescence

<sup>۴</sup>Thermoluminescence



## ۲-۳-۱- فوتولومينسانس (نورتابی با فوتون)

فوتولومينسانس (PL) فرآيندی است که فوتون‌های فرودی (تابش الکترومغناطيس) توسط ماده جذب می‌شود و پس از زمان کوتاه، فوتون تابش می‌شود. از دید مکانیک کوانتومی این فرآیند، برانگیختگی به انرژی بالا و سپس برگشت به انرژی پایین با تابش فوتون توصیف می‌شود. این پدیده یکی از شکل‌های نورتابی است که بصورت فوتوالقايدگی (برانگیختگی توسط نور) بیان می‌شود. شدت (PL) بستگی به دمای اندازه‌گیری نمونه و انرژی نور برانگیختگی دارد.



شکل ۲-۲) نمایش طر حواره از نورتابی با فوتون [۳۸]

حالت‌های انرژی موجود و گذارهای مجاز بین حالت‌ها (و بنابراین طول موج‌های نوری که جذب و تابش می‌شود) توسط قوانین مکانیک کوانتومی تعیین می‌شود. فهم دقیق از این فرآیند نیازمند مطالعه پیکربندی‌های الکترون‌ها و اوربیتال‌های مولکولی اتم‌های ساده و مولکول‌ها است [۴۰].

## ۲-۳-۱-۱- انواع فوتولومينسانس

با توجه به طول عمر ترازهای برانگیختگی سه نوع فوتولومينسانس خواهیم داشت.

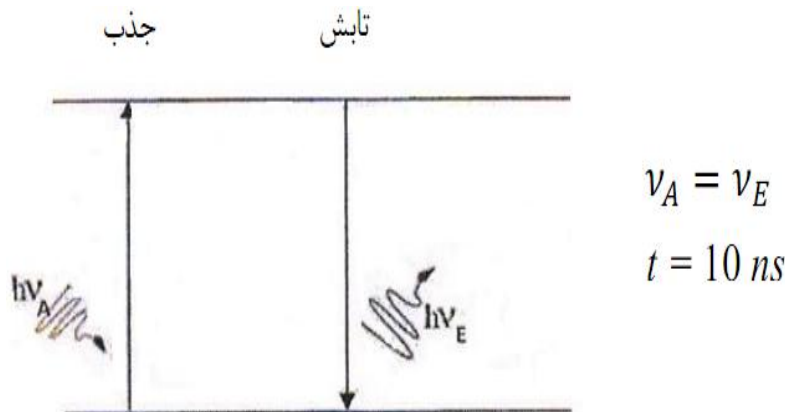
## ۲-۳-۱-۱-۱- تابش خود به خودی

تابش خود به خودی ساده‌ترین نوع فوتولومينسانس است که پس از جذب فوتونی خاص درست همان فوتون به صورت خیلی سریع تابش می‌شود. این فرآیند شامل هیچ گذار انرژی داخلی قابل

<sup>۵</sup>Cathodoluminescence

<sup>۶</sup>Chemiluminescence

توجهی نمی‌باشد و زمان بین جذب و تابش از مرتبه  $10\text{ ns}$  است. در شکل (۳-۲) این فرایند به صورت طرح‌وار نمایش داده شده است [۴۰].



شکل (۳-۲) فرایند جذب و تابش خود به خودی یک فوتون

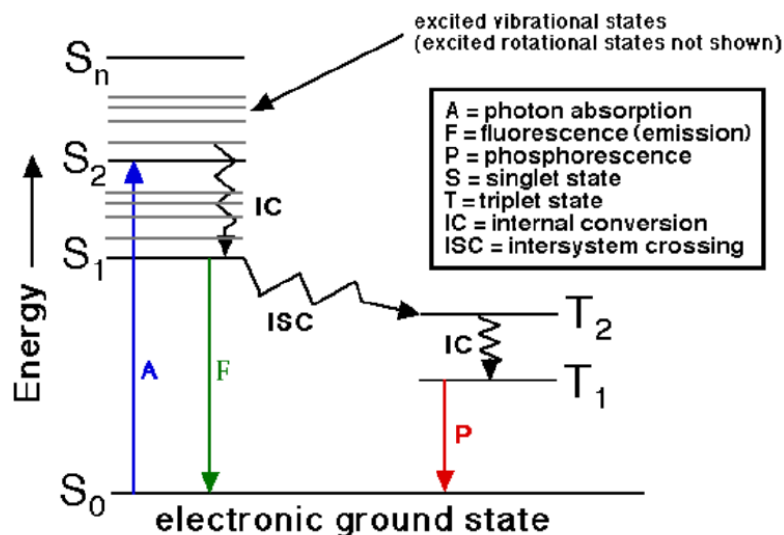
### ۲-۳-۱-۱-۲-فلورسانس

برای اولین بار جورج استوکس در اوایل سال ۱۸۰۰ میلادی دریافت که فلوریت (نوعی سنگ) در نتیجه قرار گرفتن در معرض تابش نور فرابنفش خورشید، رنگ فلورسنت آبی از خود نشان می‌دهد. پس از مطالعات جامع نام فلورسانس از کانی فلوریت الهام گرفت. بر این اساس کانی‌ها و موادی که این ویژگی را به نمایش می‌گذارند فلورسنت نامیده می‌شوند. در این فرایند وقتی که ماده تحت تابش قرار می‌گیرد درست قبل از گسیل، تحت گذارهای داخلی قرار می‌گیرد. آشناترین این اثر، فلورسانس است که یک فرایند سریع است. در این فرایند انرژی اتلاف می‌شود و طول موج فوتون‌های گسیل شده از طول موج فوتون‌های جذب شده بزرگتر است. این فوتون‌های تولید شده دچار انتقال قرمز می‌شوند. در این اثر گذار با حالت‌هایی با اسپین صفر صورت می‌پذیرد. طول عمر در اینجا از مرتبه نانو ثانیه است [۳۸].

### ۲-۳-۱-۳-فسفرسانس

یک اتم برانگیخته می‌تواند در حالت سه‌تایی، انرژی برانگیختگی الکترونی خود را از طریق گسیل خود به خودی فوتون از دست بدهد و در نتیجه به یک حالت یکتایی پایه سقوط کند که این

قاعده گزینش  $\Delta S=0$  را نقض می‌کند و احتمال وقوع بسیار کمی دارد. طول عمر حالت‌های فسفرسانسی در مرتبه‌ی میکروثانیه است و حتی گاهی به دقیقه و ساعت هم می‌رسد.

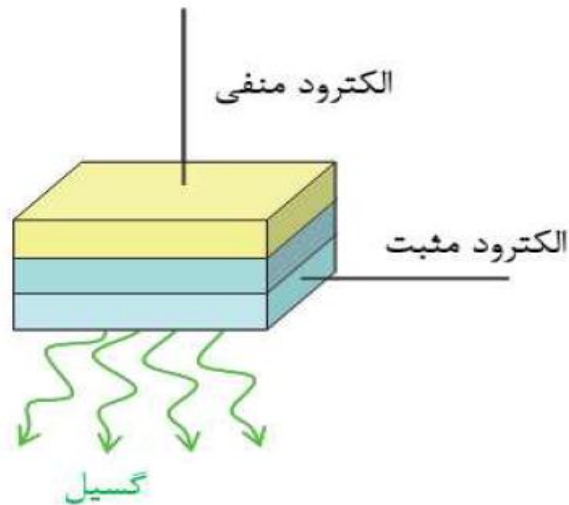


شکل ۲-۴) مقایسه حالت‌های فلورسانس و فسفرسانس [۳۸]

### ۲-۳-۲- الکترو لومینسانس (نورتابی الکتریکی)

وقتی که ماده‌ای در نتیجه اعمال میدان الکتریکی، تابش الکترومغناطیسی گسیل می‌کند، فرایند را نورتابی الکتریکی یا EL می‌نامند. فوتون گسیل شده از بازترکیب تابشی الکترون‌ها و حفره‌های ایجاد شده در ماده نورتاب به وسیله اعمال ولتاژ بین دو الکترود ناشی می‌شود. یکی از الکترودها طول موج نور گسیل شده به وسیله دستگاه را عبور می‌دهد و نسبت به آن شفاف است. استفاده از این روش برای مواد نورتاب به شکل لایه نازک مناسب است [۴۲].

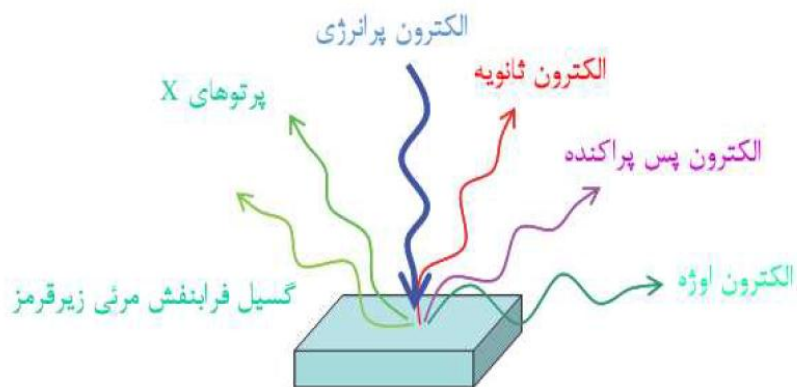
اولین گزارش از وسایل نورتاب الکتریکی در سال ۱۹۰۷ توسط هنری جوزف ارسال شد که نوری را از سیلیکون کاربرد تحت ولتاژ بالا مشاهده کرد.



شکل ۲-۵) نمایش طرحواره نورتابی الکتريکی [۴۲]

### ۲-۳-۳- کاتدولومینسانس (نورتابی کاتدی)

در نورتابی کاتدی گسیل نور از ماده‌ای صورت می‌گیرد که به وسیله الکترون‌های پرنرژی برانگیخته می‌شود. الکترون‌های برانگیخته کننده اولیه را می‌توان در یک پرتو متمرکز و به این وسیله سطح ماده را روبش کرد. در نتیجه در این فرایند، گسیل‌های دیگری مانند اشعه X، الکترون‌های اوژه، ثانویه و پس‌پراکنده نیز رخ می‌دهد.



شکل ۲-۶) نمایش طرحواره از نورتابی کاتدی [۴۲]