



00100

۸۷، ۱، ۱، ۸۳۱۷
۸۸ / ۱۲۶



دانشگاه شهید بهشتی
دانشکده فیزیک

پایان نامه
جهت اخذ درجه کارشناسی ارشد فیزیک

عنوان:

رفتار مغناطیسی و الکتریکی نیمه هادیهای مغناطیسی
 $Zn_{1-x}(TM)_xO$ (TM=Mn, Fe, Co)

دانشجو:

آمنه رضای حق دوست

استاد راهنما:

دکتر محمد مهدی طهرانچی

مهر ۱۳۸۷

اداره اطلاعات وزارت علوم
تهران

۱۳۸۸ / ۱۱ / ۱۸

۱۱۵۲۵۵



دانشگاه شهید بهشتی

تاریخ
شماره
پیوست

بسمه تعالی

« صورتجلسه دفاع پایان نامه دانشجویان دوره کارشناسی ارشد »

تهران ۱۹۸۳۹۶۳۱۱۳ اوین

تلفن: ۲۹۹۰۱

بازگشت به مجوز دفاع شماره ۴۰۹۱/۲۰۰۷ مورخ ۱۳۸۷/۷/۲۷ جلسه هیأت داوران
ارزیابی پایان نامه خانم آمنه رضای حقدوست به شماره شناسنامه ۷۱۱۲۸ صادره
از اصفهان متولد ۱۳۶۰ دانشجوی دوره کارشناسی ارشد ناپیوسته رشته فیزیک - حالت
جامد
با عنوان:

رفتار مغناطیسی و الکتریکی نیمه هادیهای مغناطیسی $M_x O_{1-x}$ ($M = Fe$ و Co و Mn)

به راهنمایی:

دکتر محمد مهدی طهرانچی

طبق دعوت قبلی در تاریخ ۱۳۸۷/۷/۳ تشکیل گردید و براساس رأی هیأت داوری و با
عنایت به ماده ۲۰ آئین نامه کارشناسی ارشد مورخ ۷۵/۱۰/۲۵ پایان نامه مزبور با
نمره ۱۸٫۵ و درجه عالی مورد تصویب قرار گرفت.

۱- استاد راهنما: آقای دکتر محمد مهدی طهرانچی

۲- استاد مشاور: -----

۳- استاد داور: آقای دکتر علیرضا صفارزاده

۴- استاد داور و نماینده تحصیلات تکمیلی: خانم دکتر شرمین خرازی

۵- معاون تحصیلات تکمیلی دانشکده: آقای دکتر خسرو جدیدی

تقدیم به :

پدر و مادر مهربانم،
همسر خوبم شهرام ،
دختر قشنگم نائیریکا،
شیما و محمد عزیزم

تشکر و قدردانی:

از خانواده عزیزم به خاطر حمایت‌های بی‌دریغشان کمال سپاسگزاری را دارم و از استاد راهنمایم جناب آقای دکتر طهرانچی بواسطه زحمات و راهنمایی‌هایشان قدردانی می‌نمایم

از دکتر قناعت شعار به جهت زحمات ایشان سپاسگذاری می‌نمایم.

از دوستان خوبم، خانم شیما نظری و خانم شیده امیریگانه و همچنین آقای حمید افتخاری که در مراحل انجام این پایان‌نامه از راهنمایی‌هایشان بهره برده‌ام، کمال تشکر را دارم.

از آقای علی رسولی که در انجام این پایان‌نامه مرا یاری نموده‌اند سپاسگذارم.

در پایان از تمامی دوستان عزیز و ارجمندم در آزمایشگاه مگنتواپتیک و پژوهشکده لیزر و پلاسما و تمام کسانی که به نحوی در انجام این پروژه با اینجانب همکاری داشته‌اند، کمال تشکر و قدردانی را دارم.

چکیده

نیم رساناهای مغناطیسی رقیق شده اکسید پایه، از نقطه نظر فرومغناطیس ذاتی ناشی از ورود یونهای عناصر انتقالی به شدت مورد توجه قرار گرفته اند. در این پایان نامه بر هم کنش های مغناطیسی در $FeMn$ و Co وارد شده در ZnO بر پایه تئوری تابعی چگالی، DFT ، با تقریب گرادیان تعمیم یافته، GGA ، مورد بررسی قرار گرفته است. محاسبات نشان می دهد ZnO ای که در آن Fe وارد نماییم دارای نظم فرومغناطیسی با خواص فلزی و ZnO که در آن Mn و Co وارد نماییم در حالت نیم رسانای فرومغناطیسی قرار می گیرد.

واژه های کلیدی: گاف نواری، تئوری تابعی چگالی، تقریب گرادیان تعمیم یافته، نرم افزار Wien2k

۱۱ پیشگفتار

فصل اول - مقدمه

۱۴ ۱-۱ اکسیدهای رسانای شفاف

۱۷ ۱-۱-۱ اکسید رسانای شفاف با ترکیبات دوتایی

۱۸ ۲-۱ اکسید روی (ZnO)

۱۸ ۱-۲-۱ کاربردهای اکسید روی

۲۰ ۲-۲-۱ خواص شیمیایی اکسید روی

۲۱ ۳-۲-۱ ویژگی های عمومی اکسید روی

۲۵ ۴-۲-۱ وضعیت جهانی اکسید روی

۲۶ ۵-۲-۱ خواص الکتریکی فیلم های اکسید روی

۲۷ ۶-۲-۱ خواص الکتریکی فیلم های اکسید روی آلیش شده

۲۷ ۷-۲-۱ خواص نوری اکسید روی

۲۹ ۸-۲-۱ خواص نوری غیر خطی اکسید روی

۲۹ ۳-۱ نیم رساناهای مغناطیسی رقیق (DMS)

فصل دوم- مروری بر رهیافتهای نظری در فیزیک ماده چگال

۳۳ ۱-۲ واحد اتمی

۳۴ ۲-۲ روش های حل مسائل بس ذره ای

۳۵ ۱-۲-۲ تقریب بورن-اپنهاইمر

۳۶ ۲-۲-۲ نظریه هارتري-فوك

۴۰ ۳-۲-۲ گاز الکترونی همگن

۴۲ ۴-۲-۲ نظریه تابعی چگالی

۵۰ ۳-۲ پذیرفتاری فلزات، پارامغناطیس یانولی

فصل سوم- بکارگیری نرم افزار Wien2k

۱-۳ اطلاعات مورد نیاز در مورد ساختارها ۵۴

۲-۳ بکارگیری تقریب ۵۶

۳-۳ بهینه سازی مقدار R_{mt} k_{max} و تعداد k های انتخابی ۵۶

۴-۳ افزودن ناخالصی در اکسید روی ۶۱

فصل چهارم- محاسبات و نتایج

۱-۴ ساختار بلور، نمودار نوار انرژی و چگالی حالات اکسید روی خالص ۶۶

۲-۴ ساختار بلور، نمودارهای نوار انرژی و چگالی حالات اکسید روی با حضور ناخالصی ۶۹

نتیجه‌گیری و ارائه پیشنهادات ۹۰

مراجع ۹۲

فهرست شکل‌ها و جداول

- جدول ۱-۱- خصوصیات اکسید روی ۲۰
- شکل ۱-۱- ساختار بلور ورتزایت اکسید روی ۲۲
- شکل ۱-۲- ساختار نواری ZnO ۲۳
- جدول ۲-۱- مقایسه خواص ZnO و GaN ۲۵
- جدول ۳-۱- قیمت برخی از گونه های اکسید روی ۲۵
- جدول ۴-۱- قیمت اکسید روی با استاندارد ACS ۲۶
- شکل ۳-۱- دمای کوری پیش بینی شده از تنوری برای مواد مختلف ۳۰
- شکل ۱-۳- اطلاعات ساختاری ZnO ۵۶
- شکل ۲-۳- گرا دیان میدان الکتریکی EFG؛ به صورت تابعی از تعداد نقاط k ۵۷
- شکل ۳-۳- انرژی کل ENE؛ به صورت تابعی از تعداد نقاط k ۵۸
- شکل ۴-۳- گرا دیان میدان الکتریکی EFG، به صورت تابعی از $R_{mt} k_{max}$ ۵۸
- شکل ۵-۳- فاصله بار بین دو تا چرخه آخر DIS، به صورت تابعی از $R_{mt} k_{max}$ ۵۹
- شکل ۶-۳- انرژی کل ENE، به صورت تابعی از $R_{mt} k_{max}$ ۵۹
- شکل ۷-۳- انرژی فرمی FER، به صورت تابعی از $R_{mt} k_{max}$ ۶۰
- شکل ۸-۳- اطلاعات ساختاری ZnO:TM ۶۳
- شکل ۱-۴- ساختار بلور ZnO خالص ۶۷
- شکل ۲-۴- نمودار نوار انرژی ZnO خالص ۶۷
- شکل ۳-۴- الف- نمودار چگالی حالات کل ZnO ۶۸
- شکل ۳-۴- ب- نمودار چگالی حالات برای عنصر اکسیژن در ZnO ۶۸
- شکل ۳-۴- ج- نمودار چگالی حالات برای عنصر روی در ZnO ۶۹
- شکل ۴-۴- ساختار بلور ZnO با حضور ناخالصی ۷۰
- شکل ۵-۴- ساختار باند اسپین بالا و پایین (Co(ج), Fe(ب), Mn(الف)) $Zn_{1-x}(TM)_xO$ ۷۱
- شکل ۶-۴- الف- نمودارهای چگالی حالات کل برای اسپین بالا و پایین ZnO:Mn ۷۳

- شکل ۴-۶-ب- نمودار های چگالی حالات اسپین بالا و پایین برای عنصر اکسیژن در ZnO:Mn ۷۴
- شکل ۴-۶-ج- نمودار های چگالی حالات اسپین بالا و پایین برای عنصر روی در ZnO:Mn ۷۶
- شکل ۴-۶-د- نمودار های چگالی حالات اسپین بالا و پایین برای عنصر منگنز در ZnO:Mn ۷۸
- شکل ۴-۷-الف- نمودار های چگالی حالات کل برای اسپین بالا و پایین ZnO:Fe ۸۰
- شکل ۴-۷-ب- نمودار های چگالی حالات اسپین بالا و پایین برای عنصر اکسیژن در ZnO:Fe ۸۱
- شکل ۴-۷-ج- نمودار های چگالی حالات اسپین بالا و پایین برای عنصر روی در ZnO:Fe ۸۲
- شکل ۴-۷-د- نمودار های چگالی حالات اسپین بالا و پایین برای عنصر آهن در ZnO:Fe ۸۳
- شکل ۴-۸-الف- نمودار های چگالی حالات کل برای اسپین بالا و پایین ZnO:Co ۸۵
- شکل ۴-۸-ب- نمودار های چگالی حالات اسپین بالا و پایین برای عنصر اکسیژن در ZnO:Co ۸۶
- شکل ۴-۸-ج- نمودار های چگالی حالات اسپین بالا و پایین برای عنصر روی در ZnO:Co ۸۷
- شکل ۴-۸-د- نمودار های چگالی حالات اسپین بالا و پایین برای عنصر کبالت در ZnO:Co ۸۸
- جدول ۴-۱- مقادیر ممانهای مغناطیسی محاسبه شده ۸۹

پیشگفتار

پیشگفتار

سطح زمین تقریباً به طور کلی پوشیده از اکسیدها می باشد. قرن‌ها کوشش شده است تا فلزاتی همانند مس، آلومینیوم و آهن را از احیا کردن این اکسیدها بدست آورند. فلزات می توانند جریان الکتریکی را انتقال دهند و چکش خوار هستند، در حالیکه اکسیدها به طور کلی عایق اند و ترد و شکننده می باشند. اما در واقع هنگامی که خواص الکتریکی آنها مورد توجه قرار گرفت، دریافته شد که آنها رساناهای بسیار خوبی هستند، تا آنجا که اکسید مس-تالیوم در دمای 125 K خاصیت ابر رسانایی از خود نشان می دهد. بنابراین اکسیدها یک محدوده رسانندگی از عایق ها تا رساناهای فلزی و حتی ابررساناها را پوشش می دهند. با وجود این آنها را از نظر فن آوری همانند سیلیسیوم، مس و مواد دیگر استفاده نکرده اند و کاربرد آنها به میزان زیادی محدود به استفاده همانند ماده عایق شده است.

نیم رساناهای مغناطیسی رقیق، نقش بسیار مهمی در علم اسپینترونیک دارند. در این علم توجه اصلی به ساخت موادی کاربردی، مبتنی بر جهت دهی فرومغناطیس ها به وسیله میدان الکتریکی است. در علم اسپینترونیک، سعی می شود از بار الکتریکی و اسپین الکترون ها، هم زمان استفاده شود.

طول زیاد همدوسی اسپین الکترون ها، این امکان را به ما می دهد که از حرکت اسپین همانند بار الکتریکی برای انتقال اطلاعات استفاده شود. ادواتی که از قطبش الکترون استفاده می کنند اندازه کوچک تر و مصرف توان کمتر

دارند و برای برخی سیستم های پردازش و محاسبه، از ادواتی که فقط از بار الکتریکی استفاده می کنند مؤثرترند.

بسیاری از مصارف مغناطیسی مانند هد ادوات ذخیره اطلاعات، به فلزات فرومغناطیس وابسته اند. توسعه نیمه

رساناهای فرومغناطیسی که با فرآیندهای رشد استاندارد سازگار باشند، فضای بسیار وسیعی را پیش روی محققان باز می کند. در ساختار DMS تبادل بین الکترون های d قرار گرفته بر یون های مغناطیسی، و الکترون های sp تراز

رسانش، اتفاق می افتد. به همین دلیل ماده خواص غیر معمول مغناطیسی، نوری و مغناطیسی-نوری پیدا می کند.

نوع p نیم رساناهای مغناطیسی رقیق بر پایه ZnO و GaN، در صورت آلیش با Mn می‌توانند به خاصیت مغناطیسی در دمایی بالایی دمای اتاق برسند و در صورت آلییده شدن با Co، نوع n آنها می‌تواند خاصیت مغناطیسی بزرگی در دمایی بالاتر از دمای اتاق بدهد.

در سال ۱۹۹۹ فلدرلینگ و اونو از DMS به عنوان قطبی کننده های اسپین برای کنترل قطبش نور در یک پیوند p-i-n استفاده کردند ولی چنین موادی فقط در دماهای پایین کار می‌کنند زیرا دمای کوری، T_c پایینی دارند. علاقه زیادی به اکسید روی برای این کاربرد به وجود آمده است زیرا بر اساس پژوهش های نظری انتظار می‌رود اکسید روی در صورت آلیش با عناصر واسطه بتواند خاصیت مغناطیسی با T_c بالا در حد دمای اتاق پیدا کند و بتواند با مدارات الکترونیکی امروزی سازگار شود. در شکل ۱-۳ این نتایج برای مواد مختلف آمده و نشان می‌دهد اکسید روی و GaN قابلیت زیادی برای استفاده در DMS دارند.

اکسید روی می‌تواند برای ترکیب با عناصر وابسته بسیار مناسب باشد زیرا ظرفیت $Zn(2+)$ سازگاری خوبی در ترکیب با این عناصر دارد. این عامل باعث می‌شود بتوان به چگالی ناخالصی بیشتری رسید.

در این پایان نامه،

در فصل اول به معرفی اکسیدهای رسانای شفاف، به ویژه اکسید روی و همچنین نیم رساناهای مغناطیسی رقیق می‌پردازیم و تاریخچه ای از آنها را بیان می‌کنیم.

در فصل دوم مروری بر رهیافتهای نظری در فیزیک ماده چگال داریم.

در فصل سوم چگونگی بکارگیری نرم افزار Wien2k را در این رساله شرح می‌دهیم.

و در فصل چهارم به محاسبات انجام شده و نتایج بدست آمده می‌پردازیم.

نتایج بدست آمده از این رساله تا کنون در کنفرانس فیزیک ایران ۱۳۸۷ پذیرفته شده است.

فصل اول

فصل اول: مقدمه

سطح زمین تقریباً به طور کلی پوشیده از اکسیدها می باشد. قرن‌ها کوشش شده است تا فلزاتی همانند مس، آلومینیوم و آهن را از احیا کردن این اکسیدها بدست آورند. فلزات می توانند جریان الکتریکی را انتقال دهند و چکش خوار هستند، در حالیکه اکسیدها به طور کلی عایق اند و ترد و شکننده می باشند. اما در واقع هنگامی که خواص الکتریکی آنها مورد توجه قرار گرفت، دریافتند که آنها رساناهای بسیار خوبی هستند، تا آنجا که اکسید مس - تالیوم در دمای 125 K خاصیت ابررسانایی از خود نشان می دهد. بنابراین اکسیدها یک محدوده رسانندگی از عایق‌ها تا رساناهای فلزی و حتی ابررساناها را پوشش می دهند. با وجود این آنها را از نظر فن آوری همانند سیلیسیوم، مس و مواد دیگر استفاده نکرده اند و کاربرد آنها به میزان زیادی محدود به استفاده همانند ماده عایق شده است.

۱-۱- اکسیدهای رسانای شفاف

یک نوع از ترکیبات اکسیدی، اکسیدهای رسانای شفاف^۱ می باشند. با توجه به دامنه گسترده کاربردهای آنها در صنعت و تحقیقات، مطالعه لایه های این ترکیبات اکسیدی مورد توجه بسیاری از محققین می باشد. همانطور که از نام آنها برمی آید، اکسیدهای رسانای شفاف ضمن شفافیت نسبت به یک محدوده خاص از طیف نوری باید رسانای الکتریکی نیز باشند. با توجه به کاربردهای فراوان آنها در ادوات مختلف، بهینه سازی عملکرد آنها مهم می باشد. اغلب این مواد، رسانای نوع n هستند که دارای یک گاف نواری عریض ($>3\text{ eV}$) می باشند و استعداد و قابلیت آلیش شدن تا تبهگنی را دارند. البته اخیراً اکسیدهای رسانای شفاف نوع p نیز ساخته و مطالعه شده اند [۱]، اما اغلب این مواد نوع n هستند.

¹ Transparent Conducting Oxide(TCO)

لایه های شفاف و رسانا از برخی اکسیدهای فلزی همانند اکسید کادمیوم، اکسید قلع و اکسید ایندیوم از مدتها قبل شناخته شده اند. لایه های نازک از اکسید کادمیوم (CaO) اولین بار در سال ۱۹۰۷ میلادی توسط بدکر^۱ شناخته شد.

فیلمهای نازک ($\approx 100-200 \text{ \AA}$) از فلزاتی همانند Fe, Cu, Ag, Au و... نیز دارای خواص مشابهی هستند، اما این فیلم ها به طور کلی خیلی پایا نمی باشند و خواص آنها با زمان تغییر می کند. پوشش هایی بر پایه مواد نیمه هادی دارای کاربردهای بیشتری می باشند، چون پایداری و سختی آنها بهتر و بیشتر از این لایه های نازک است. استفاده از یک لایه اکسید رسانای شفاف روی سطح شیشه ها و عبور یک جریان الکتریکی از آنها مانع از یخ زدن و مه گرفتگی سطح شیشه می شود. استفاده از این شیشه ها در پنجره هواپیما اولین کاربرد این مواد می باشد، که در طول جنگ جهانی دوم امکان بمباران از ارتفاع بالا را فراهم می کرد. کشف این مواد تا بعد از جنگ جهانی به صورت راز باقی ماند و توسعه اساسی در چنین موادی فقط بعد از ۱۹۴۰ صورت گرفت.

اکسید رسانای شفاف یک نیمه هادی با گاف نواری پهن ($>3\text{eV}$) می باشد که دارای یک غلظت نسبتاً بالایی از الکترونهاي آزاد در نوار رسانش خود می باشد. این غلظت بالایی حاملها یا از نقایض در ماده یا از آلایندگی های غیر ذاتی ناشی می شود، که تراز های ناخالصی آنها نزدیک لبه باند رسانش قرار می گیرد. این غلظت بالایی الکترون حامل سبب جذب تابش الکترومغناطیس در ناحیه مرئی و ناحیه فرو سرخ طیف الکترومغناطیس می شود. چون یک لایه اکسید رسانای شفاف باید ضرورتاً یک سازگاری را بین رسانندگی الکتریکی و تراکسیدنگی اپتیکی نشان دهد، یک تعادل دقیق بین خواص آن مورد نیاز است. افزایش غلظت حاملها و یا تحرك پذیری آنها هر دو سبب افزایش رسانندگی می شود. اما افزایش اولی موجب افزایش در جذب نور مرئی می شود. لیکن افزایش تحرك پذیری اثرات زیان آوری ندارد و نسبتاً بهترین عامل برای بهینه سازی عملکرد آنها می باشد. به منظور افزایش تحرك پذیری می توان عوامل پراکندگی را از بین برد که در این مورد محدودیت وجود دارد، یا اینکه باید مواد جدیدی کشف کرد که این محدودیتها در آنها کمتر وجود داشته باشد.

سه مکانیسم پراکندگی در این مواد مهم می باشند. پراکندگی الکترونها توسط ارتعاشات شبکه (فونونها)، که عاملی است که در دماهای بالا بیشتر باعث کاهش رسانندگی می شود. مکانیسم بعدی، پراکندگی توسط اتمهای ناخالصی است. به منظور افزایش رسانندگی می توان غلظت حاملها را افزایش داد و در واقع در این مواد همانطور که قبلاً توضیح داده شد، غلظت حاملها زیاد است. وجود اتمهای ناخالصی در شبکه باعث پراکندگی شدن حاملها می شود و تحرك پذیری حاملها را کاهش می دهد. اما در واقع غلظت بالایی الکترونها سبب پوشش یونهای ناخالصی می شود و

¹ Badeker

این یونهای به طور مثبت باردار شده یک ابري از الکترونها را اطراف خودشان جمع می کنند ، بنابراین میدان الکتریکی آنها در نزدیکی این ابر محدود می شود. مکانیسم پراکنندگی دیگر نیز مربوط به مرز دانه ها می باشد.

جایگذاری یک کاتیون با ظرفیت بالاتر توسط یک ناخالصی در مواد اکسیدی، رسانندگی نوع n را افزایش می دهد ، در حالیکه قرار دادن یک کاتیون با ظرفیت پایین تر یک حفره را ایجاد می کند که همانند یک تله در نیمه هادی نوع n عمل می کند و رسانندگی را کاهش می دهد. اثرات مشابهی نیز می تواند توسط آلایش با آنیونهای با ظرفیت بالاتر و پایین تر رخ دهد. مینامی¹ نشان داده است که آلایش اکسید روی توسط عناصری همانند ایتیم (Y)، زیرکونیوم (Zr) ،

تیتانیوم (Ti) ، و هافنیوم (Hf) یک الکترون ظرفیت همانند آلایش های معمولتر ، بور (B) ، آلومینیوم (Al) ، گالیوم (Ga) یا ایندیوم (In) را ایجاد نمی کنند. با وجود این مقاومت ویژه ای در محدوده $10^{-2} \Omega \text{cm}$ را بدست آورده است [۲]. این مشاهده با توجه به در نظر گرفتن شرح معمول از آلایش های غیر ذاتی تا اندازه ای معما گونه است.

ولیکن با در نظر گرفتن اینکه این اکسید های اضافی شکل گرفته می توانند اکسیژن را از شبکه اکسید روی جذب کنند ، بنابراین جاهای خالی اکسیژن را ایجاد می کنند ، توجه پذیر است و در واقع آلایش کردن سبب ایجاد جاهای خالی اکسیژن می شود. به عنوان مثال اضافه کردن ناخالصی Sb به اکسید قلع سبب تشکیل ماده ای می شود که می توان آن

را در نماد یونی به صورت $\text{Sn}^{+4}_{1-x}\text{Sb}^{+5}_x\text{O}^{-2}_{2x}$ نشان داد، که الکترونهاي اضافی مسئول رسانایی می باشند. با

افزایش غلظت ناخالصی ، ترازهای ناخالصی اضافه شده به زیر باند رسانش تشکیل باند می دهند و با باند رسانش همپوشانی کرده و نیمه هادی تبهگن را تشکیل می دهند. این اثر در مورد جاهای خالی اکسیژن مربوط به انحراف از

استوکیومتری نیز رخ می دهد، اما عمق ترازهای ناخالصی بیشتر از اینها می باشند. در مورد اضافه کردن ناخالصی

آنیونی باید به مساله جذب اپتیکی میان ترازهای آنها و کمینه باند رسانش توجه داشت. انرژی یونیزاسیون دهنده ها با

افزایش غلظت دهنده ها کاهش می یابد. پیرسون^۲ و باردین^۳ مدلی را برای کاهش انرژی یونیزاسیون با افزایش غلظت

دهنده با در نظر گرفتن بر هم کنش الکتروستاتیک بین الکترونها و دهنده های یونیزه شده، که با افزایش غلظت دهنده

ها افزایش می یابد، پیشنهاد کرده اند [۳].

اغلب کارهایی که تا کنون محققین مختلف انجام داده اند، بهتر کردن کیفیت این فیلمها می باشد تا اثرات مکانیسم های پراکنندگی را کاهش دهند و با کنترل کردن فرآیند های لایه نشانی میزان انحراف از استوکیومتری را تحت کنترل خود در آورند و یا با آلایش با مواد مختلف غلظت حاملها را تغییر دهند ، که در همه این موارد به تحرك پذیری بالایی نرسیده اند.

Minami¹
Pearson²
Bardeen³

دو روش انتخاب برای رسیدن به عملکرد بهتر وجود دارد: یا باید مواد جدیدی کشف و اصلاح شوند و یا راه‌های بهتری برای ساختن اکسیدهای رسانای شفاف استفاده تا کنون پیدا کرد. با توجه به اینکه تعداد زیادی از مقالات به بهینه‌سازی فیلم‌های اکسید رسانای شفاف اختصاص داده شده است، روش اول سودمندتر به نظر می‌رسد. کار روی رشد و تحلیل لایه‌های اکسید نیمه هادی شفاف توسط بسیاری از محققین در زمان‌های مختلف مرور شده است. هالند^[۴] کار در این حوزه را تا سال ۱۹۵۵ میلادی مرور کرده است. ووسن^[۵]، هیک^[۶] و مارتون^[۷] مرورهای جامعی به کارهای آزمایشی صورت گرفته تا اواسط ۱۹۷۰ میلادی انجام داده‌اند.

منیفسیر^[۸] جازبسکی^[۹]، چوپرا و جوشی^[۱۰] بررسی‌های جزئیات را در این حوزه تا اواخر ۱۹۸۰ میلادی گزارش کرده‌اند. اخیراً هامبرگ^[۱۱] کار روی لایه‌های اکسید ایندیوم را به جزئیات، بویژه از نقطه نظر عملی مرور کرده است.

۱-۱-۱- اکسید رسانای شفاف با ترکیبات دوتایی

اغلب مواد اکسید رسانای شفافی که تا کنون ساخته شده‌اند از ترکیبات دوتایی می‌باشند. یک مزیت استفاده از ترکیبات دوتایی همانند مواد اکسید رسانای شفاف اینست که تهیه و ترکیب آنها در لایه‌های نشانی فیلم نسبتاً ساده‌تر از ترکیبات سه تایی و پیچیده‌تر می‌باشد. مهمترین ترکیباتی که تاکنون ساخته شده SnO_2 ، In_2O_3 ، In_2O_3 ، $(\text{ITO})\text{In}_2\text{O}_3$ ، Cd_2SnO_4 و ZnO می‌باشند. در این تحقیق، بحث بر روی ماده ZnO می‌باشد، بنابراین به جزئیات خواص فیزیکی ZnO می‌پردازیم:

^۱ Holland
^۲ Vossen
^۳ Haacke and Marton
^۴ Manificier
^۵ Jarzebski
^۶ Chopra and Joshi
^۷ Hamberg

۱-۲- اکسید روی (ZnO)

لایه های نازک اکسید روی در سال های اخیر توجه زیادی را در الکترونیک و الکترونیک نوری به خود جلب کرده است. شکاف نواری پهن ، قابلیت آرایش با ناخالصی های مختلف و با غلظت بالا ، رسانایی الکتریکی قابل تنظیم از عایق تا رسانا خوب و نیز خاصیت پیزوالکتریک بلور آن از ویژگی های است که باعث شده اکسید روی، موضوع تحقیقات بسیاری در زمینه ادوات نوری ، الکتریکی ، مغناطیسی و پیزوالکتریک گردد. جمع شدن خواص مختلف در یک ماده ارزان ، آن را برای کاربردهای جدید مانند ادوات میکروالکترومکانیک^۱، MEMS بسیار مناسب کرده است. استفاده از لایه نازک اکسید روی، امکان مجتمع سازی ادوات صوتی و نوری را با مدارهای الکتریکی فراهم می کند. این امر و نیز ارزانی مواد اولیه و سادگی لایه نشانی ، در کاهش هزینه ها مؤثر خواهد بود. تولید بلور حجیم اکسید روی در مقایسه با تولید لایه نازک آن بسیار دشوار و پرهزینه است و کمتر مورد توجه قرار می گیرد. به همین دلیل سعی شده بر خواص و کاربردهای لایه نازک اکسید روی تاکید بیشتری شود.

۱-۲-۱- کاربردهای اکسید روی

اگر روی در هوا تا نقطه جوش گرم شود، بخارات آن آتش می گیرد و با شعله ای سفید مایل به سبز می سوزد و اکسید روی تولید می کند. اکسید روی ، پودری سفید مایل به زرد و بسیار نرم ، همراه با سطح ویژه بسیار بالا است که در تولید رنگ روغنی سفید، دارو، لوازم آرایش و روغن های مختلف بکار می رود. بخش عمده اکسید روی تولید شده در صنعت لاستیک سازی بکار می رود. این ترکیب در قلیاها و اسیدهای قوی قابل حل شدن است. از این ترکیب در مقادیر کوچک تر می توان به عنوان فلاکس بسیار فعال استفاده کرد و در مقادیر بیشتر خاصیت کریستالی از خود بروز می دهد. اکسید روی بطور کمی، مهمترین محصول شیمیایی با بنیان روی می باشد. اکسید روی که دارای بیشترین تقاضا در بین ترکیبات روی است را می توان با فرآیندهای متنوعی بصورت صنعتی تولید نمود. خلوص و کیفیت اکسید روی به روش تولید آن بستگی دارد. اکسید روی با خلوص بالا بصورت پودر در اتاق های رسوب، در جایی که ذرات با اندازه های مختلف از هم جدا می گردند، جمع می شود. این ماده عموماً به عنوان روی سفید شناخته می شود. در فرآیند مستقیم ماده خام استفاده شده، کانه روی یا محصولات جانبی روی بوده که همواره حاوی سرب می باشد. یک ماده کربن دار را با ماده خام حرارت می دهند که در نتیجه احیاء ، روی به صورت بخار احیا می شود. این ماده در هوا اکسید شده و به ذرات با اندازه مختلف تقسیم می شود. ماده اولیه جهت فرآیندهای شیمیایی

مرطوب محلول هاي خالص شده روي است. كربنات يا هيدروكسيد روي، ته نشين شده، سپس فیلتر شده ، شستشو داده مي شود و پس از خشك شدن در دماي ۸۰۰ درجه سانتیگراد بصورت پودر استحصال مي شود. انواع متنوع اكسيد روي به عنوان محصول واسطه در توليد ساير مواد شيميايي استفاده مي شود. اكسيد روي ته نشين شده داراي خواص رنگريزه اي نمي باشد و درجه هاي ويژه مانند اكسيد روي ظريف در كاغذهاي فتوكپي کاربرد دارد. اكسيد روي به عنوان رنگريزه در رنگ هاي لاتكس محلول کاربرد فراواني دارد. همچنين به دليل دارا بودن خاصيت پوششي اپاسيتي در برابر اشعه ماوراء بنفش و ضريب شكست بالا ، در صنايع رنگ سازي استفاده مي شود كه باعث افزايش پايداري رنگ است. کاربرد اين ماده در كشاورزي به عنوان افزاينده و باروركننده جهت جبران كمبود روي خاك از اهميت كمتر بر خوردار است. اين اكسيد جزئي از فرمولاسيون در صنعت شيشه ، لعاب كاري و سراميك مي باشد. اين ماده بر روي نقطه ذوب ، خواص نوري و الاستيك و همچنين رنگ و جلای شیشه ها تاثير مي گذارد و از اجزاء پودر صورت ، رژ لب و كرم هايي است كه در صنعت لوازم آرايشي کاربرد دارد، همچنين به صورت ورق در بدنه باطري هاي خشك ، پوشش سقف صفحه هاي گراور عكاسي ، جهت محافظت بدنه كشتي خطوط لوله و تاسيسات حفاري در دريا بكار مي رود[۱۲].

مقادير زياد اين اكسيد در صنايع لاستيك سازي به عنوان فعال كننده و شتاب دهنده اصلي در صنعت محكم سازي لاستيك با گوگرد استفاده مي شود. به علاوه اين ماده يك تركيب سراميكي مهم براي کاربرد در سنسورهاي گازی، سلول هاي خورشيدی و وریستورها است[۱۳].

از لحاظ فیزیکی این ترکیب یک عامل مقاوم کننده، یک هادی گرما ، یک رنگدانه سفید و یک جذب کننده نور UV است[۱۴] [۱۵].

اكسيد روي تامين كننده روي غذاهاي حيواني و نيز يك كود مكمل براي زمين هايي است كه كمبود روي دارند. فعاليت شيميايي آن در استفاده هاي دارويي مختلف و پيچيده است، ولي بر اساس فعاليت زياد آن ، استفاده اي روزافزون دارد. همچنين اين تركيب در امر تغذيه هم کاربرد دارد[۱۵].