بسم الله الرحمن الرحیم

دانشکده علوم پایه- گروه فیزیک

پایان نامه کارشناسی ارشد فیزیک حالت جامد

سنتز و بررسی خواص الکتریکی و اپتیکی نانوپودر ZnO آلاییده با اکسیدمس

اساتید راهنما :

دکتر احمد کمپانی، دکتر سید محمد حسینی

نگارش:

فاطمه روزبان

دی ماه ۱۳۸۹

تقدیم به

آنان که دریای عشق بودند و مرا رسم محبت آموختند.

آنان که لحظه‌های شیرین زندگی

یادآور لبخند مهربانشان است.

تقدیم به

پدرم، مایه آسایش و تندیس شکوهم

و مادرم، نور دیده و چراغ فروزان هستیم

تقدیم به

اساتید گرامی‌ام

اسوه صبر و پشتکار، جناب آقای دکتر احمد کمپانی

آیه تلاش و استواری، جناب آقای دکتر سید محمد حسینی

سپاس گزاری

سپاس ایزد مهربانی را که مسیر زندگانی من، بر راه علم نهاد که جاودانی است و ماندنی؛ و بر این منت آنم که بگشاد دروازه علم؛ و شادمانم که می توانم قدر این نعمت بدانم، گرچه باز هم در گرو محبت آنم؛ و خوش باد یاد آن استاد که نهاد در نهاد من بذر علم و اعتقاد و با سپاس از او که فرمود مرا به علم و نمود راه راستی را.

سپاس فراوان از اساتید راهنمای گرانقدرم، دکتر احمد کمپانی و دکتر سید محمد حسینی که با صبر و شکیبایی در یکایک مراحل انجام این پروژه مرا یاری نموده اند.

سپاس از اساتید محترم دکتر رضایی و دکتر بهدانی که زحمت مطالعه و داوری پایان نامه را به عهده گرفتند.

سپاس از دوستان و یاران، قجری، کفاش، قربانی مقدم که یاریم دادند و با تشکر از همراهان مهربان دکتر ابراهیمی زاده، قاسمی فرد، مولاروی و خرمی. . . که از بذل توان دریغ نداشتند.

چکیده

در این پژوهش خواص ساختاری، الکترونی و اپتیکی ترکیب اکسیدروی آلاییده با اتم مس مورد بررسی قرارگرفته است. نانوپودر ZnO:Cu با درصدهای مس (۰/۰۵، ۰/۰۴، ۰/۰۲، ۰/۰۰) به روش سل ژل سنتز گردید. ساختار نانوپودرها با استفاده از پراش پرتو X مورد مطالعه قرار گرفت، طرح پراش پرتو X نشان می‌دهد که فاز ورتسایت در دمای تکلیس ۵۰۰°C برای نمونه‌های $Zn_{1-x}Cu_xO$ به ازای (۰/۰۲، ۰/۰۰) تشکیل شده، اما در نمونه‌های $Zn_{0.96}Cu_{0.04}O$ و $Zn_{0.95}Cu_{0.05}O$ فاز ثانویه منوکلینیک دیده می‌شود. در ناحیه فروسرخ میانی، با استفاده از طیف فروسرخ تبدیل فوریه (FTIR) عبوری مشخص شد که با کوچک شدن ابعاد ذره در مقیاس نانو، علاوه بر قله جذبی مربوط به پیوند فلز- اکسیژن یک شانه جذب نیز ظاهر می‌شود. در ناحیه فرابنفش نیز، گاف نوری با استفاده از طیف جذبی محاسبه گردید و این محاسبات نشان داد که گاف نوری با افزایش درصد مس از ۳/۲۷ eV به ۳/۲۵ eV به ترتیب برای نمونه‌های با درصد مس ۰/۰۰ و ۰/۰۵ کاهش می‌یابد. با استفاده از نانوپودرهای سنتز شده، نانو سرامیک‌هایی به شکل قرص ساخته شدند، و اثر تغییر درصد مس بر خواص الکتریکی آن‌ها بررسی شد. همچنین در این پروژه نمونه‌های ZnO:Cu با درصد مس (۰/۰۵، ۰/۰۴، ۰/۰۲) به روش مخلوط اکسید جامد تهیه شدند و برخی از خواص مربوط به آن‌ها بررسی و با نتایج نمونه‌های نانو مقایسه شدند. درمطالعات نظری، از کد WIEN2k و تقریب شیب تعمیم‌یافته (GGA) در چارچوب نظریه تابعی چگالی (DFT) استفاده‌گردید. ساختار نواری انرژی و چگالی حالت‌های کلی و جزئی ترکیب‌های $Zn_{1-x}Cu_xO$ (۰/۱۸۷۵، ۰/۱۲۵۰، ۰/۶۲۵۰، x=۰/۰۰۰۰) محاسبه و اثر اتم مس در ساختار نواری و چگالی حالت‌ها بررسی شد.

فهرست

فصل اول: آشنایی با ویژگی‌های اکسیدروی (ZnO) و کاربرد آن

مقدمه

۱-۱ سرامیک ۳

۱-۱-۱ انواع سرامیک‌ها ۴

۱-۱-۲ نانوسرامیک‌ها ۵

۱-۱-۳ ویژگی‌های‌نانو سرامیک‌ها ۵

۱-۱-۴ کاربرد نانو سرامیک ۵

۱-۲ وریستورها ۶

۱-۳ ویژگی‌هایZnO ۷

۱-۳-۱ ویژگی‌های ساختاری ۷

۱-۳-۲ ویژگی‌های الکتریکی ۹

۱-۳-۳ ویژگی‌های شیمیایی ۹

۱-۳-۴ ویژگی‌های فیزیکی ۱۰

۱-۴ کاربردهای ZnO ۱۰

فصل دوم: مروری بر روش‌های ساخت پودرهای سرامیکی

مقدمه

۲-۱ روش سنتی واکنش حالت جامد(مخلوط اکسیدها) ۱۲

۲-۱-۱ انتخاب مواد اولیه و مخلوط کردن آن‌ها ۱۳

۲-۱-۲ تکلیس ۱۴
۲-۱-۳ آسیاب‌کاری و دانه‌بندی ۱۵
۲-۱-۴ شکل‌دهی (تهیه نمونه‌های قرصی) ۱۵
۲-۱-۵ تفجوشی ۱۶
۲-۱-۶ صیقل کردن ۱۶
۲-۱-۷ الکترود گذاری ۱۷
۲-۲ سنتز نانو ذرات ۱۷
۲-۲-۱ سل- ژل ۱۸
۲-۲-۲ روش شیمیای سل- ژل ۱۹
۲-۲-۳ روش احتراق ژل ۲۰
۲-۲-۴ فرایندهای روش سل- ژل ۲۰
۲-۲-۴-۱ مواد اصلی برای تهیه محلول آغازین ۲۰
۲-۲-۴-۲ حلال ۲۱
۲-۲-۴-۳ عامل کمپلکس‌ساز ۲۱
۲-۲-۴-۴ عامل پلیمرساز ۲۱
۲-۲-۴-۵ عامل رسوب دهنده ۲۲
۲-۲-۴-۶ عامل پراکنده‌ساز ۲۲
۲-۲-۵ روش هم‌رسوبی ۲۲
۲-۲-۶ مزایا و محدودیت‌های روش سل- ژل ۲۳

فصل سوم: کارهای آزمایشگاهی

مقدمه

۳-۱ تهیه نانوپودر ZnO:Cu ۲۴

۳-۱-۱ تهیه نانوذرات ZnO:Cu به روش سل- ژل ۲۵

۳-۲ تهیه قرص از نانوپودرهای سنتز شده ۳۱

۳-۳ فرایند تفجوشي ۳۲

۳-۴ صیقل دادن (پالیش کردن) ۳۳

۳-۵ الکترودگذاری ۳۴

۳-۶ سنتز پودرهای ZnO:Cu به روش مخلوط اکسیدها (واکنش حالت جامد) ۳۴

فصل چهارم: نتایج مشخصه‌یابی و اندازه‌گیری نانوپودر و نانوسرامیکZnO

مقدمه

۴-۱ مشخصه‌یابی و مطالعه‌ی خواص ساختاری نانوپودرهای ZnO:Cu ۳۷

۴-۱-۱ مشخصه‌یابی با استفاده از طیف پراش پرتوی X ۳۷

۴-۱-۲ مشخصه‌یابی و مطالعه‌ی خواص میکروسکوپی نانوپودرها ۴۱

۴-۲ مشخصه‌یابی و مطالعه‌ی خواص نوری نانوپودرهای ZnO:Cu ۴۲

۴-۲-۱ طیف تراگسیلی FTIR ۴۲

۴-۲-۲ طیف بازتاب FTIR ۴۵

۴-۲-۳ ویژگی‌های نوری در ناحیه UV ۴۶

۴-۳ مشخصه‌یابی و مطالعه‌ی خواص الکتریکی سرامیک ZnO:Cu ۴۷

۴-۳-۱ چگالی ۴۷

۴-۳-۲ مشخصه‌یابی I-V ۴۹

فصل پنجم: نتایج مشخصه‌یابی و اندازه‌گیری پودرهای ZnO:Cu تهیه شده به روش مخلوط اکسید جامد

مقدمه

۵-۱ مشخصه‌یابی طیف پراش X ۵۲

۵-۲ طیف تراگسیلی FTIR ۵۵

فصل ششم: نتایج نظری

۶-۱ ساختار نوارهای انرژی ۵۷

۶-۱-۱ ساختار نواری ZnO ۵۷

۶-۱-۲ ساختار نواری $Zn_{1-x}Cu_xO$ (x=0.0625,0.1250,0.1875) ۶۱

۶-۲ چگالی حالت‌های کلی و جزئی ۶۵

۶-۲-۱ چگالی حالت‌های کلی و جزئی ZnO ۶۵

۶-۲-۲ چگالی حالت‌های کلی و جزئی $Zn_{1-x}Cu_xO$ (x=0.0625,0.1250,0.1875) ۶۷

جمع‌بندی ۷۲

پیشنهادات ۷۵

مراجع ۷۶

فصل اول

آشنایی با ویژگی های اکسید روی (ZnO)

و کاربرد آن

مقدمه

فناوری نانو واژه‌ای است کلی که به تمام فناوری‌های پیشرفته در عرصه کار با مقیاس نانو اطلاق می‌شود، یا به عبارتی می‌توان گفت علم مطالعه کنترل رفتار مواد در مقیاس اتمی و مولکولی است. طبق تعریف موسسه ملی نانوفناوری آمریکا، یک نانو ذره، ذره‌ای است که ابعاد آن در حدود۱nm تا۱۰۰nm باشد(۱ نانومتر یک میلیاردیم متر است). اولین جرقه فناوری نانو (البته در آن زمان هنوز به این نام شناخته نشده بود) در سال ۱۹۵۹ زده شد. در این سال ریچارد فاینمن[۱] طی یک سخنرانی با عنوان "در آن پایین‌ها جا برای کار بسیار است[۲]" ایده فناوری نانو را مطرح ساخت. وی این نظریه را ارائه داد که در آینده‌ای نزدیک می‌توانیم مولکول‌ها و اتم‌ها را به صورت مستقیم دستکاری کنیم. واژه فناوری نانو اولین بار توسط نوریوتاینگوچی[۳] استاد دانشگاه علوم توکیو در سال ۱۹۷۴ بر زبان‌ها جاری شد. او این واژه را برای توصیف ساخت مواد (وسایل) دقیقی که خطای ابعادی آنها در حد نانومتر می‌باشد، به کار برد. در سال ۱۹۸۶ این واژه توسط دکتر اریک درکسلر[۴] در کتابی تحت عنوان: "موتور آفرینش: آغاز دوران فناوری‌نانو" بازآفرینی و تعریف مجدد شد. وی این واژه را به شکل عمیق‌تری در رساله‌ی دکترای خود مورد بررسی قرار داد و بعدها آن‌را در کتابی تحت عنوان:

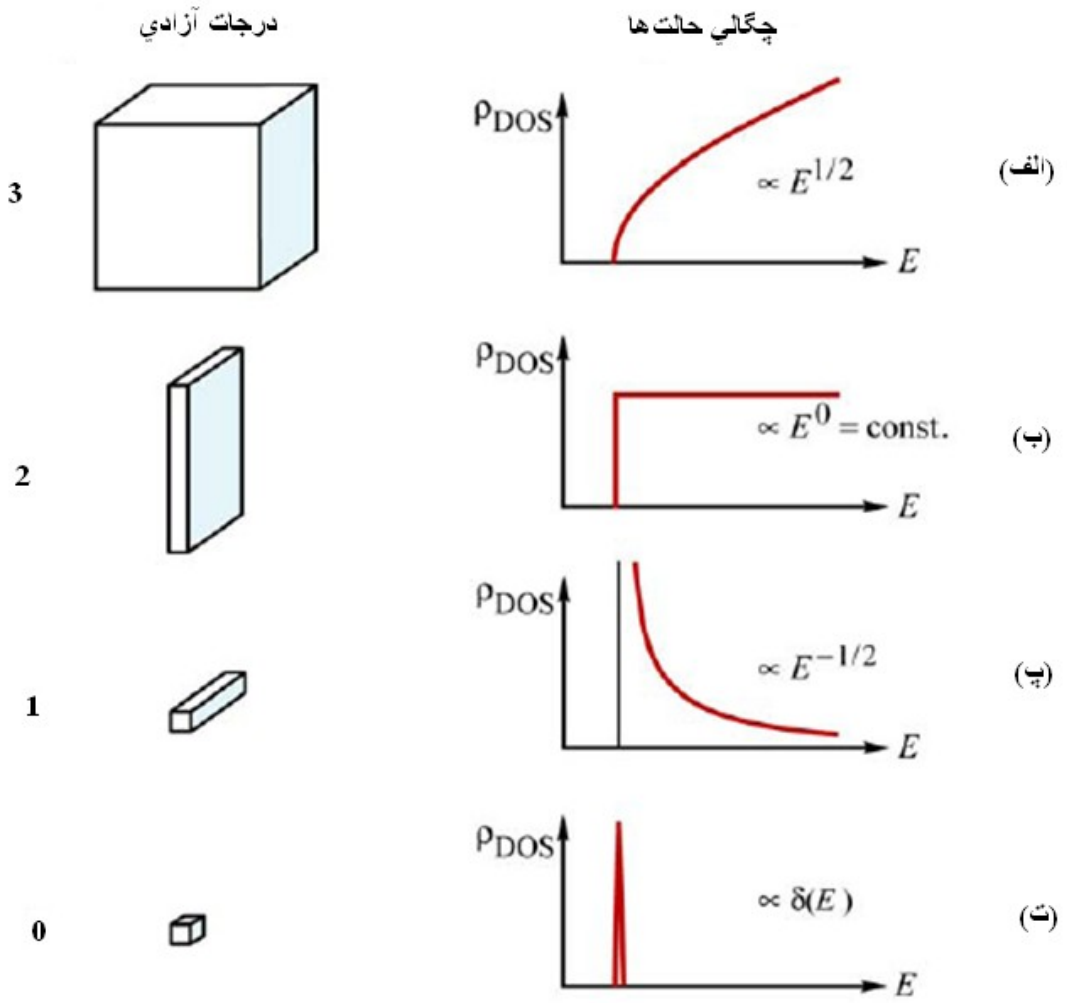
[1]Feynman
[2] There are plenty of rooms at the bottom
[3]Norio Taniguchi
[4]Eric Drexler

"نانوسیستم‌ها ماشین‌های مولکولی، چگونگی ساخت و محاسبات آنها" گسترش داد. با کاهش اندازه ذرات و قطعات از میکرو به نانو، با تغییر برخی از خواص فیزیکی مواجه می شویم، که دو مورد مهم آن‌ها عبارتند از: افزایش نسبت مساحت سطح به حجم و دیگر اثر اندازه[۵] و محدودیت کوانتومی[۶]. افزایش نسبت مساحت سطحی به حجم که به تدریج با کاهش اندازه ذره رخ می دهد باعث غلبه رفتار اتم‌های واقع در سطح ذره به رفتار اتم‌های درونی شده به طوری که رفتار کل ماده را تحت تاثیر قرار می‌دهد. این پدیده باعث بهبود خواص فیزیکی نانو ذرات می‌شود و به همین دلیل نانو ذرات به صورت های مختلف، زمینه کاربرد فراوانی دارند. به عنوان مثالی برای کاربرد و مشاهده رفتار

ویژگی‌های فیزیکی مواد، با توجه به ابعاد آنها، نمودار چگالی حالت‌ها برای یک ماده در حالت حجیم[۷] نانولایه[۸]، نانوسیم[۹] و یک نقطه کوانتومی[۱۰] در شکل(۱-۱) آورده شده است. از طریق فناوری نانو خواهیم توانست با جایگذاری تک اتم‌ها و تک مولکول‌ها در کنار یکدیگر از پایین به بالا ساختارهای نوینی را که به نانو ساختارها[۱۱] موسوم‌اند، و دارای خواص و عملکردهای کاملا نوین می‌باشند بوجود آوریم. نانو ساختارها سنگ بنای فناوری نانو هستند. رسیدن به مقیاس نانو از طریق رویکرد از پایین به بالا یکی از گزینه‌های علم و فناوری نانو است. رویکرد دیگر در علم فناوری نانو، رویکرد از بالا به پایین، یا بیرون کشیدن نانو ساختارها از درون ساختارهای بزرگتر است. این رویکرد به نام برنامه کوچک

[5] Size effect
[6] Quantum confinement
[7] Bulk
[8] Nano film
[9] Nano wire
[10] Quantum dot
[11] Nano-Structure

سازی[۱۲] مشهور گشته است و همراه با رویکرد اول، بسترهای اساسی برای پیشرفت برنامه عظیم جهانی علوم فناوری نانو هستند.



شکل(۱-۱) چگالی حالتها (الف) حالت حجیم، (ب) نانو لایه، (پ) نانو سیم، (ت) نقطه کوانتومی

۱-۱ سرامیک

به مواد جامداتی که بخش عمده‌ی مواد تشکیل دهنده‌ی آن‌ها مواد غیرفلزی و غیرآلی باشند، سرامیک گفته می‌شود. این تعریف نه‌تنها سفالینه‌ها، پرسلان(چینی)، دیرگدازها، محصولات سازه‌ای،

[12]Miniaturization Program

ساینده‌ها، سیمان و شیشه را در بر می‌گیرد، بلکه شامل آهنرباهای سرامیکی، لعاب‌ها، فروالکتریک‌ها، سوخت‌های هسته‌ای نیز می‌شود. برخی آغاز استفاده و ساخت سرامیک‌ها را در حدود ۷۰۰۰ سال ق.م. می‌دانند، در حالی که برخی دیگر قدمت آن را تا ۱۵۰۰۰ سال ق.م نیز دانسته‌اند. ولی در کل اکثریت تاریخ‌نگاران بر ۱۰۰۰۰ سال ق.م اتفاق نظر دارند.

نام سرامیک از کلمه یونانی کراموس[۱۳] به معنای ماده آتش دیده، خاک رس کوزه گری یا اشیاء پخته شده از خاک رس استخراج شده است که به‌طور ساده‌تر به سفالینه تعبیر می‌شود. سرامیک‌ها موادی هستند که دارای سختی‌های متفاوتند، شکننده‌اند، در مقابل حرارت و فرسایش مقاومند و از خاک نسوز یا مواد معدنی دیگر بخصوص اکسیدهای فلزی ساخته می‌شوند. سرامیک‌ها به سه گروه عمده طبقه‌بندی می‌شوند: سرامیک‌های سنتی(سیلیکاتی)، الکتروسرامیک، بیوسرامیک

۱-۱-۱ انواع سرامیک‌ها

سرامیک‌های سنتی : این سرامیک‌ها همان سرامیک‌های سیلیکاتی هستند. مثل کاشی، سفال، چینی، شیشه، گچ، سیمان.

الکتروسرامیک : این فرآورده‌ها عمدتاً از مواد اولیه‌ی خالص و سنتزی ساخته می‌شوند. این نوع سرامیک‌ها اکثراً در ارتباط با صنایع دیگر مطرح شده‌اند. برخی از پرکاربردترین این نوع سرامیک‌ها عبارت‌اند از: برلیا (BeO) ، تیتانیا (TiO_2)، آلومینا (Al_2O_3)، زیرکونیا (ZrO_2)، منیزیا (MgO).

[13] Kramoos

بیوسرامیک‌ها: موادی سازگار با بافت‌ها و سلول‌های بدن هستند و به عنوان یک بیو ماده در ترمیم، جایگزینی و اصلاح عملکرد بسیاری از بافت‌ها و اندام‌های بدن استفاده می‌شوند.

سرامیک‌ها نسبت به مواد دیگر دارای مزایایی از قبیل: دیرگدازی بالا، سختی زیاد، مقاومت بالا در مقابل خوردگی بالا می‌باشند.

۱-۱-۲ نانو سرامیک

سرامیک های نانو، سرامیک هایی هستند که اندازه دانه ها یا اجزای سازنده ی آن ها در حد نانومتر است. سرامیک های نانو دارای ساختاری مستحکم تر و انعطاف پذیر تر از سرامیک های میکرو ساختار می باشند. زمان ظهور نانوسرامیک‌ها را می‌توان دهه ۹۰ میلادی دانست. در این زمان بود که با توجه به خواص بسیار مطلوب پودرهای نانوسرامیکی، توجهاتی به سمت آنها جلب شد، اما روش‌های فرآوری آنها چندان آسان و مقرون به‌صرفه نبود. فناوری باعث ایجاد تحول چشمگیری در صنعت سرامیک گشته‌است. در این میان نانوسرامیک‌ها، خود باعث ایجاد تحول عظیمی در فناوری امروزه می باشند.

۱-۱-۳ ویژگی های نانوسرامیک ها

ویژگی‌های نانوسرامیک‌ها در مقایسه با اندازه میکروسرامیک را می‌توان از دو دیدگاه بررسی کرد. یکی ویژگی نانوساختاری، و دیگری خواص محصولات تولید شده.

ویژگی‌های نانو ساختارهای سرامیکی: کوچک، سبک، دارای خواص جدید در مقایسه با سیستم سنتی، امکان استفاده در دستگاه‌های هوشمند.

خواص نانو سرامیک‌ها: این مواد دارای خواص مکانیکی بهتر، سختی و استحکام بالاتر و انعطاف‌پذیری بهتر است که ویژگی های منحصر به فردی برای سرامیک‌ها است. دمای تفجوشی پایین‌تر که باعث تولید اقتصادی و کاهش هزینه‌ها می‌گردد و به علاوه از فرار عناصر با دماهای ذوب پایین از ترکیب جلوگیری می‌کند.

۱-۱-۴ کاربرد های نانوسرامیک

.نانو سرامیک‌ها به دلیل ویژگی های منحصر به فردی که دارند در بسیاری از صنایع جزء اجزای مهم محسوب می‌شوند. به عنوان مثال در صنایع شیمیایی به دلیل مقاومت خوبی که در برابر اسیدها و سایر مواد خورنده دارند مورد توجهند. در صنایع هوافضا به سبب مقاومت این مواد در مقابل حرارت و گرما به کار گرفته می‌شوند. در صنایع الکترونیک و ارتباطات به دلیل خواص نوری و الکتریکی خوبی که دارند از اجزای مهم قطعات الکترونی و اپتیکی هستند. مغناطیس‌های فریتی نانوسرامیکی در ساخت تلفن‌های همراه کوچکتر و قدرتمندتر کاربرد وسیعی دارند.

۱-۲ وریستورها[۱۴]

یکی از سرامیک‌های الکترونیکی که بر پایه ZnOاست قطعه‌ای است به نام وریستور. این قطعه به صورت دو دیود زنر[۱۵] پشت به پشت عمل می‌کند و مشخصه ولتاژ – جریان آنها غیر خطی است. وریستورها، با فرآیند تفجوشی[۱۶] سرامیکی ساخته می‌شوند. ساختار آنها متشکل از دانه‌های[۱۷] رسانای

[14] varistor
[15] Zener diode
[16] sintering
[17] Grain

ZnO است که در مرزدانه‌ها به وسیله سدهای باریک احاطه شده‌اند. وریستورهای ZnO به طور برجسته‌ای در نگهداری از مدارهای الکترونیکی در برابر ولتاژهای بالا مورد استفاده قرار می‌گیرند[۱]. ویژگی محافظت‌کنندگی وریستورها ناشی از رابطه‌ی غیر خطی شدید بین ولتاژ و شدت جریان آنها در بازه‌ی بزرگی از شدت جریان به صورت رابطه‌ی

$$I = \left[\frac{V}{c}\right]^{\alpha} \qquad (۱-۱)$$

است که در آن I جریان، V ولتاژ وc ثابتی وابسته به ویژگی‌های ماده و α ضریب غیر خطی است که از مشخصه‌های اساسی وریستور است. بالاتر بودن هر چه بیشتر ضریب غیر خطی نشان‌دهنده کیفیت هر چه برتر آن است[۲].

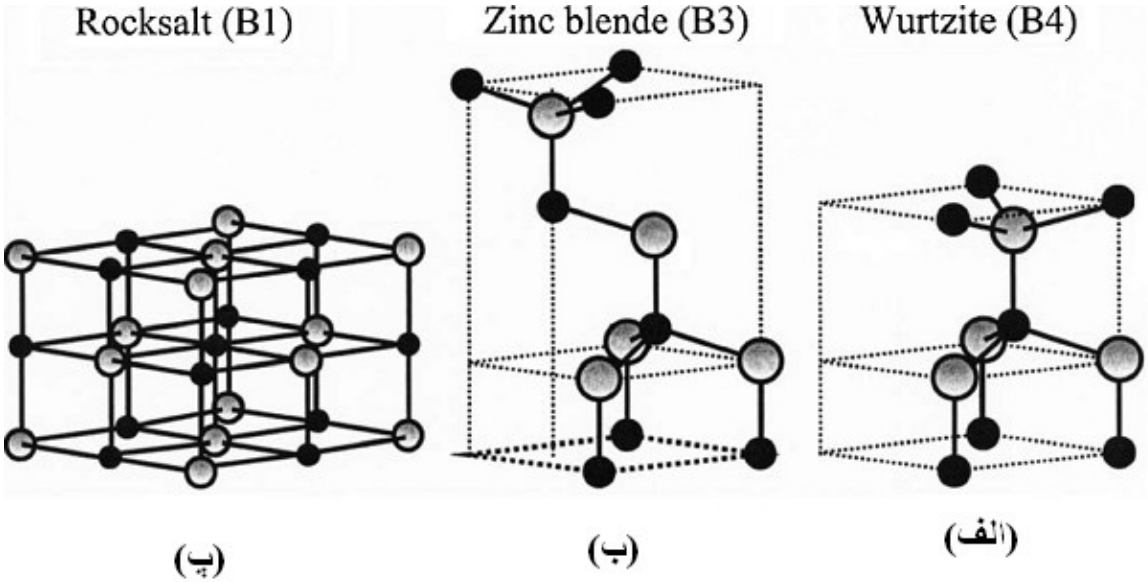
۱-۳ ویژگی‌های ZnO

اکسید روی یکی از مهمترین نیمرساناهای ترکیبات II-VI با گاف نواری بزرگ است. این ماده دارای ویژگی‌های جالبی می‌باشد؛ از جمله خاصیت چسبندگی خوب، قدرت پوشش عالی، داشتن ثابت دی-الکتریک متوسط ضریب شکست بالا و غیره. این ویژگی‌های منحصر به فرد موجب کاربرد فراوان آن شده است، به عنوان نمونه در ساخت قطعاتی مانند گسیلنده‌های نوری فرابنفش، وریستورها[۳]، قطعات الکترونیک شفاف با توان بالا، فتوکالیست[۴]، مبدل‌های پیزوالکتریک[۵]، سلولهای خورشیدی، حسگرهای گازی[۶]، پنجره‌های هوشمند، استفاده در صنعت چاپ(فتوکپی)، صنایع رنگرزی.

۱-۳-۱ ویژگی‌های ساختاری

بیشتر ترکیبات دو تایی گروه II-VI دارای ساختار زینک‌بلند مکعبی یا ساختار ورتسایت شش‌گوشی هستند. که در این ساختارها هر آنیون توسط چهار کاتیون در گوشه‌های یک چهاروجهی احاطه شده

است و برعکس. این مختصات چهاروجهی نشان‌دهنده پیوند کووالانسی sp^3 است، و این مواد دارای یک خاصیت یونی نیز هستند.همان‌طور که گفته شد، ZnO یک نیمرسانای ترکیبی II-VI است که خاصیت یونی آن در مرز بین نیمرساناهای کووالانسی و نیمرساناهای یونی قرار می‌گیرد. ساختار بلوری ZnO به صورت ورتسایت[۱۸] (B_4)، زینک بلند[۱۹] (B_3) و راکسالت[۲۰] (B_1) می‌باشد، که در شکل (۱-۱) نشان داده شده است[۷].



شکل (۱-۱) ساختار ZnO در سه فاز(الف)ورتسایت (ب)زینک بلند (پ) راکسالت

تحت شرایط محیطی، فازی که از نظر ترمودینامیکی پایدار می‌باشد، ورتسایت است. ساختار زینک بلند تنها در صورتی پایدار است که ZnO بر روی زیر لایه‌های مکعبی رشد داده شود، در این ساختار پارامتر شبکه a=۴/۳۷Å می‌باشد. و ساختار راکسالت را می‌توان در فشارهای نسبتا بالا (در حدود ۱۰ GPa) به دست آورد[۸]. این ساختار دارای پارامتر شبکه a=۴/۲Å می‌باشد.

[18]Wurtzite
[19]Zincblende
[20]Rocksalt

ساختار ورتسایت دارای یک یاخته واحد شش‌گوشی با دو پارامتر شبکه a=۳/۲۵Å و c=۵/۲Å است، که در آن نسبت c/a، برابر با ۱/۶۰ است و به گروه فضایی $p6_3mc$ تعلق دارد[۹]. این ساختار از دو زیر شبکه شش گوشی تنگ پکیده (hcp) تشکیل شده که هر یک شامل یک نوع اتم هستند که نسبت به یکدیگر در طول محور سه‌گانه c به اندازه u=۳/۸Å (این ساختار ایده‌ال وورتسایت است) جابجا شده‌اند (پارامتر u به صورت طول پیوند موازی محور c تعریف می‌شود). هر زیر شبکه شامل چهار اتم در هر یاخته واحد است. هر اتم از گروه II با چهار اتم از گروه VI احاطه شده است و یا برعکس که در لبه‌های یک چهار وجهی قرار گرفته‌اند. در یک بلور واقعی، ساختار ZnO وورتسایت از حالت ایده‌ال منحرف می‌شود و مقدار c/a وu تغییر می‌کند.

۱-۳-۲ ویژگی‌های الکتریکی

ZnO خالص دارای گاف نواری نسبتا پهن ۳/۳۷ eV و انرژی بستگی الکترونی بزرگ (در حدود ۶۰meV) است[۱۰]. اکسید روی خالص، بی رنگ و شفاف است. مزایای این گاف نواری پهن عبارتند از ولتاژ شکست بالاتر، مقاومت در مقابل میدانهای الکتریکی بالا،کاهش نویز و فرایندهای عملیاتی دمای بالا.

۱-۳-۳ ویژگی‌های شیمیایی

اکسید روی ماده‌ای به رنگ سفید است. با اسیدهای آلی و غیر آلی واکنش می‌دهد و در قلیایی‌ها ودر محلول آمونیاک حل و تشکیل زینکات (ترکیبات روی) می‌دهد. به راحتی با گازهای اسیدی (مانند CO_2 و SiO_2) ترکیب می‌شود. در دمای بالا با اکسیدهای دیگر واکنش می‌کند و ترکیب‌هایی مانند فریت‌های روی تشکیل می‌دهد[۱۱].

۱-۳-۴ ویژگی‌های فیزیکی

اکسید روی ماده نسبتا نرم است که در اثر گرمادهی در دمای بالای در بالای $300^{\circ}C$ زرد می‌شود نور UV را در طول‌موج‌های کوچکتر از ۳۶۶nm جذب می‌کند. اگر مقدار کمی از عناصر دو و سه ظرفیتی در شبکه بلوری آن وارد شود، خواص نیمه‌هادی از خود بروز می‌دهد[۱۱].

۱-۴ کاربردهای ZnO

کاربردهای بسیار زیادی برای ZnO وجود دارد که در زیر به برخی از آنها اشاره می‌کنیم. برای کاربرد در علم مواد، اکسید روی دارای ضریب شکست بالا،رسانش گرمایی، ویژگی‌های آنتی باکتریال، محافظ UV و غیره است. به همین علت، به عنوان افزودنی در مواد و محصولات متفاوت از جمله پلاستیکها، سرامیکها، شیشه، سیمان[۱۲]،لاستیک، رنگ‌ها، روغن‌ها، چسب‌ها، باتری‌ها، فریت‌ها مورد استفاده قرار می‌گیرد[۱۳]. در صنعت لاستیک سازی از مخلوط بهینه اکسید روی و اسید استئاریک در ساخت لاستیک‌های با دوام استفاده می‌شود، به گونه‌ای که کنترل رسانندگی گرمایی در لاستیک خودروها با افزودن اکسید روی میسر است. در پزشکی و صنایع غذایی، از ذرات بسیار ریز این اکسید به عنوان آنتی‌باکتری در بسته‌بندی‌های مواد غذایی و وسایل پزشکی استفاده می‌شود[۱۴]. اکسید روی به صورت گسترده در حفاظت‌کننده‌های پوست از جمله چسب‌های زخم، کرمها، پودرها و شامپوها نیز کاربرد دارد[۱۵]. به علت جذب بالای H_2S وHCN توسط این اکسید، ZnO به فیلتر سیگارها نیز افزوده می‌شود. به علت گاف نواری پهن، اکسید روی پتانسیل خوبی برای کاربرد در دیودهای لیزری[۲۱] و دیودهای نوری دارد. پایداری ZnO در

[21] Laser diode