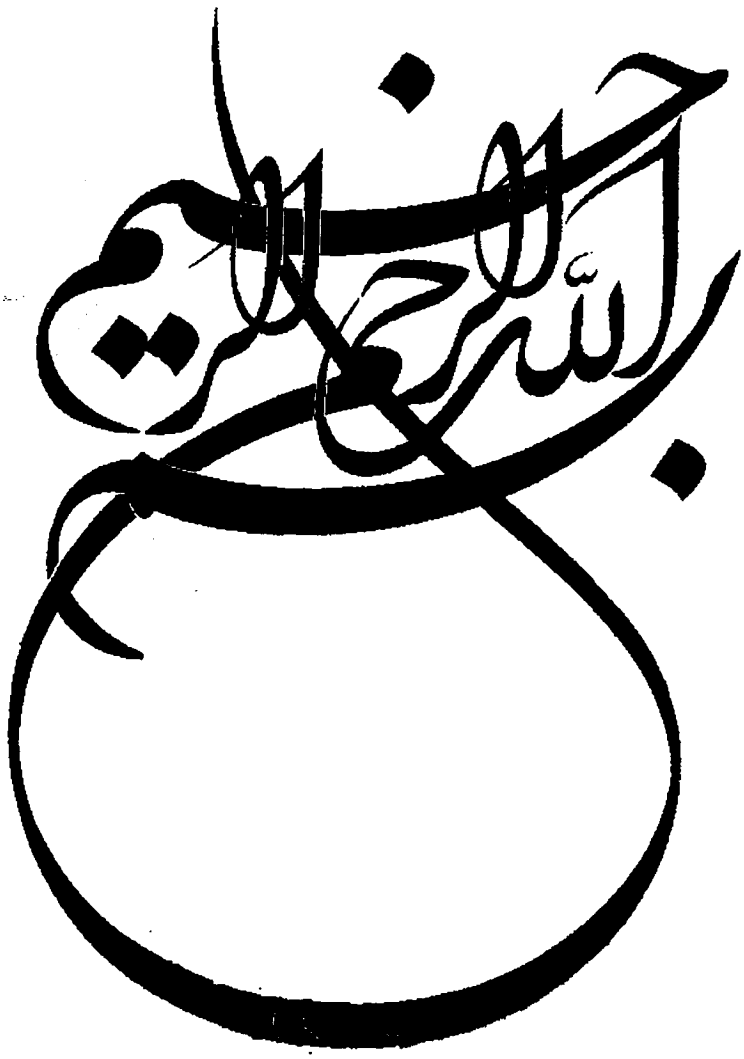


١٥١٢٧٢

دانشگاه تربیت معلم سبزوار
دانشکده علوم پایه

پایان نامه کارشناسی ارشد

گرایش حالت جامد

عنوان:

بررسی ویژگی های ساختاری، الکتریکی و اپتیکی لایه های نازک اکسید ایندیوم آلاییده با ناخالصی قلع (ITO)

استاد راهنما: دکتر محمود رضایی رکن آبادی

استاد مشاور: دکتر شعبان رضا قربانی

نگارش: مریم داوری

۱۳۸۷/۱۱/۰۸

۱۵۱۶۷۲

تقدیم به:

پدر و مادر مهربانم که دعای خیر آنها همواره پشتیبان و راهگشای من بوده است.

خاله و شوهر خاله عزیزم که در طول تحصیل در دوره کارشناسی ارشد محیطی آرام فراهم نموده و مرا بسیار یاری نمودند.

تشکر و قدردانی

با دامن پاک و پندار عالی در صحنه نبرد قدم بگذارید تا هم از لذت حقیقی حیات بهره برید و هم به وظایف انسانیت خویش عمل نمایید. نه همچون زنده به گوران که بر نفس خود اتکا و اعتماد ندارند و به همین جهت از غوغای زندگی کناره می گیرند.
پس برخیزید و دامن همت بر کمر زنید، بکوشید و بجوشید و غوغای زندگی را برپا کنید.

خداوندا آرامشی عطا فرما تا بپذیرم آنچه را نمی توانم تغییر دهم، شهامتی تا تغییر دهم آنچه را می توانم و دانشی تا بدانم تفاوت آن دو را.

در ابتدا از خدای خود تشکر می کنم که من را به راه علم آموزی رهنمون ساخت و همواره این بنده حقیرش را از این طریق راه گشا بوده و ان شاءا... خواهد بود. همچنین بر خود واجب می دانم که نهایت تشکر و قدردانی را از از راهنمائی های ارزنده و زحمات بی دریغ و صمیمانه استاد محترم و ارجمندم جناب آقای دکتر محمود رضایی رکن آبادی که تجربیات گرانبها و بی شائبه شان را در اختیار من گذاشتند ابراز داشته و امید آن دارم که همواره و در همه حال با استعانت از مربی عالمیان در کوشش های علمی و فرهنگی شان موفق و مؤید باشند.
همچنین از استاد محترم مشاور پایان نامه جناب آقای دکتر شعبان رضا قربانی که اینجانب را بسیار یاری نمودند و از جناب آقای دکتر هادی عربشاهی که در جلسه دفاع داوری پایان نامه را بر عهده داشتند کمال تشکر را دارم. در ادامه لازم می دانم از جناب آقای محمد مهدی باقر محققی که کمک های علمی بسیاری به من نمودند و از آقای شیعی کارشناس گروه فیزیک دانشگاه تربیت معلم سبزوار قدردانی نمایم.

مریم داوری نجف آبادی

تیرماه ۱۳۸۶

فهرست عناوین

پیشگفتار ۱

چکیده ۳

فصل اول: اکسیدهای رسانای شفاف

۱-۱ مقدمه ٦

۱-۲ خواص الکتریکی اکسیدهای رسانای شفاف ۱۰

۱-۳ خواص اپتیکی اکسیدهای رسانای شفاف ۱٤

۱-٤ مراجع ۲۱

فصل دوم: روش های جایگذاری

۲-۱ تبخیر حرارتی ۲٤

۲-۲ کندوپاش ۲٦

۲-۲-۱ کندوپاش واکنش پذیر هدف های فلزی ۲۷

۲-۲-۲ کندوپاش از هدف های اکسید ۳۰

۲-۲-۳ کندوپاش ستون یون ۳۲

۲-۳ جایگذاری بخر شیمیایی CVD ۳۲

۲-٤ روش های اسپری (اسپری هیدرولیزیز و اسپری پایرولیزیز) ۳٤

۲-٤-۱ روش جایگذاری CSD ۳٤

۲-٤-۲ اسپری هیدرولیزیز و اسپری پایرولیزیز ۳٥

۲-٥ روش فروبردنی ٤۰

۲-٦ رسوب همگن یا رشد از محلول شیمیایی ٤۱

۲-۷ کاربرد اکسیدهای رسانای شفاف ٤۱

۲-۸ مراجع ٤٩

فصل سوم: لایه نشانی

لایه نشانی ITO به روش اسپری پایرولیزیز

۳-۱ آماده سازی محلول اسپری ٥٠
۳-۱-۱ لایه نشانی ITO ٥٤
۳-۲ بررسی های ساختاری ٥٥
۳-۲-۱ میکروسکوپ الکترونی ٥٥
۳-۲-۲ پراش پرتو ایکس ٥٦
۳-۳ اندازه گیری های الکتریکی ٥٨
۳-۳-۱ اساس روش وندرپو ٥٨
۳-٤ اندازه گیری های اپتیکی ٦٥
۳-٥ مراجع ٧١

فصل چهارم: کارهای انجام شده

مشخصه های ساختاری، الکتریکی و اپتیکی لایه های رسانای شفاف ITO

٤-۱ نتایج بررسی های ساختاری ٧٣
٤-۱-۱ تأثیر ناخالصی بر ویژگی های ساختاری ٧٣
٤-۱-۲ تأثیر دما بر ویژگی های ساختاری ٧٧
٤-۱-۳ تأثیر ضخامت بر ویژگی های ساختاری ٨٣
٤-۲ بررسی ویژگی های اپتیکی ٨٦
٤-۲-۱ تأثیر ناخالصی بر ویژگی های اپتیکی ٨٦
٤-۲-۲ تأثیر دما بر ویژگی های اپتیکی ٩٢

۳-۲-٤ تأثیر ضخامت بر ویژگی های اپتیکی ۹۵
۳-٤ بررسی ویژگی های الکتریکی ۹۷
۱-۳-٤ اثر ناخالصی بر ویژگی های الکتریکی ۹۷
۲-۳-٤ اثر دما بر ویژگی های الکتریکی ۹۸
۳-۳-٤ اثر ضخامت بر ویژگی های الکتریکی ۹۹
٤-٤ مراجع ۹۹

پیشگفتار

در این پایان نامه خواص ساختاری الکتریکی و اپتیکی لایه های رسانای شفاف In_2O_3 محتوی درصد های مختلف ناخالصی قلع، تهیه شده به روش اسپری پایرولیزیز بر روی زیر لایه های شیشه ای،مورد بررسی قرار گرفته است.

نام اختصاری این ماده که اخیرا پر کاربرد ترین ماده در ساخت وسایل اپتوالکترونیک است ITO می باشد (Indium Tin Oxide) این ماده جزو اکسید های رسانای شفاف یا TCO ها است. ترکیبات اکسیدهای رسانای شفاف از جمله موادی هستند که در ناحیه مرئی طیف الکترومغناطیسی رسانندگی الکتریکی خوب و شفافیت بالایی دارند. همچنین توسعه لایه های نازک رسانای شفاف p، یکی از مسایل اساسی در ساخت پیوند های p-n شفاف از قبیل دیودها، ترانزیستورها و دیودهای نور گسیل UV است. در حالت کلی، نیمرساناهای اکسیدی دارای گاف نواری پهن و رسانندگی نوع n هستند که آن ها را برای کاربردهای فراوان مناسب می سازد. هنگامی که نیمرسانای اکسیدی، مغناطیسی می شود می تواند یک جفت شدگی تبادلی فرو مغناطیسی قوی بین اسپین های جایگزیده را نوید دهد، لذا برای کاربرد به عنوان نیمرسانای رقیق مغناطیسی گزینه مناسبی است. خواص فیزیکی این ترکیبات در فصل اول شرح داده شده است.

از میان ترکیبات اکسید رسانای شفاف، ITO یک نیمه هادی با رسانندگی نوع n و شفافیت اپتیکی بسیار عالی با پهنای گاف در حدود $E_g \sim ۳/۴$ ev است. رسانندگی این نیمه هادی می تواند توسط کنترل تراکم تهی جای اکسیژن تنظیم شود. In_2O_3 دارای خواص اپتیکی و الکتریکی متنوع است. کاربردهای فراوانی در قطعات اپتوالکترونیک مثل FPD (Flat-Panel DisPaly) ، سلول های خورشیدی لایه نازک، مانیتورهای حسی، شیشه های پوشش داده شده برای پنجره هایی که در جلوگیری از به هدر رفتن انرژی استفاده می شود، دزدگیرها، نمایشگرهای پلاسمایی، آشکارسازهای IR دارد. روش های رشد لایه های ITO، خواص فیزیکی و کاربردهای این ترکیب در فصل دوم مورد بررسی قرار گرفته است. لایه های نازک رسانای شفاف In_2O_3 با درصدهای مختلف ناخالصی قلع، ضخامت های متفاوت و دماهای متفاوت زیر لایه به روش اسپری پایرولیزیز تهیه شدند. روش اسپری پایرولیزیز برای

لایه نشانی انتخاب شد زیرا مهمترین مزیت این روش لایه نشانی ارزان و سرعت عمل آن است. سرد شدن سریع محلول مواد اولیه بر بستر شیشه ای داغ در این روش، موجب ظهور خواص فیزیکی بدیع در نمونه های ساخته شده می شود که از نظر کاربردی اهمیت دارد.جزئیات روش های رشد، مطالعات ساختاری، الکتریکی، و اپتیکی لایه های In_2O_3: Sn در فصل سوم شرح داده شده است.

نتایج و بررسی های تجربی در فصل چهارم این پایان نامه شرح داده شده است. In_2O_3 با توجه به اینکه نمونه های مختلف با ضخامت، دمای زیر لایه و درصد مختلف ناخالصی تهیه شد. تاثیر این سه فاکتور در خصوصیات اپتیکی ، الکتریکی و ساختاری و مورفولوژی سطح آن مورد مطالعه قرار گرفت.

چکیده

اکسیدهای رسانای شفاف به دلیل دارا بودن همزمان رسانندگی بالا و شفافیت بالا در ناحیه مرئی کاربرد وسیعی در صنایع و تکنولوژی دارند. امروزه محققانی که در زمینه کاری لایه های نازک فعالیت دارند انواع مختلف این نیمرساناها را با افزودن ناخالصی های مختلف بررسی می کنند و در هر مورد به نتایج جالب و بدیع در این زمینه می رسند.

در این پایان نامه ویژگی ها و خواص لایه های هادی شفاف In_2O_3 محتوی درصد های مختلف ناخالصی قلع، تهیه شده به روش اسپری پایرولیزیز بر روی بسترهای شیشه ای مورد بررسی قرار گرفت. همچنین اثر دماهای مختلف زیرلایه و ضخامت لایه ها بر خواص الکتریکی و اپتیکی لایه ها مطالعه شده است.

برای بررسی خصوصیات اپتیکی از دستگاه اسپکتروفوتومتر استفاده شد و طیف های جذبی و عبوری مورد بررسی قرار گرفت. طرح پراش پرتو ایکس نمونه ها مورد بررسی قرار گرفته و به وضوح تغییرات مربوط به افزایش دمای زیر لایه و افزایش ناخالصی لایه ها مشاهده شد.

با استفاده از طیف جذبی نمونه ها گاف انرژی مربوط به اکسید ایندیوم خالص و اکسید ایندیوم با درصد های مختلف ناخالصی محاسبه شد که نتایج بطور کامل گزارش شده است. با اندازه گیری الکتریکی نمونه ها مقدار مقاومت و مقاومت سطحی نمونه ها بدست آمد و روند تغییرات مقاومت با افزایش ناخالصی، ضخامت و دما مطالعه شد. با استفاده از میکروسکوپ الکترونی از سطح نمونه عکس برداری شد و مورفولوژی سطح مورد بررسی قرار گرفت و آنالیز

مربوطه نیز انجام شد. با استفاده از نتایج بدست آمده از پراش پرتو ایکس نمونه ها و رابطه شرر اندازه دانه ها محاسبه شد.

آزمایش اثر هال برای تعیین چگالی حامل ها و همچنین تعیین نوع حامل ها انجام شد که نتیجه تمام آزمایشات و بررسی و نتیجه گیری در مورد آنها در فصل آخر پایان نامه آورده شده است.

فصل اول

مقدمه ای بر اکسیدهای رسانای شفاف

۱-۱ مقدمه

خانواده مهمی از مواد اکسیدی که دارای دو ویژگی مقاومت الکتریکی پایین و شفافیت و عبور اپتیکی بالا در ناحیه مرئی هستند، وجود دارد.این ویژگی ها باعث استفاده این ترکیبات اکسیدی در یک سری کاربردهای خاص شده است. این مواد، اکسیدهای رسانای شفاف یا TCO[1] نام دارند.

اولین گزارش از اکسید رسانای شفاف در سال ۱۹۰۷، هنگامیکه Badeker گزارش کرد که لایه های نازک فلز کادمیم که در یک اتاقک حباب شیشه ای بدون بار نشانده شده می تواند با اکسید شدن شفاف شود در حالیکه رسانای الکتریسیته هم باقی بماند، منتشر شد[۱]. از سال ۱۹۵۰ اکسیدهای رسانای شفاف (TCO) برای کاربردهای متنوعی مطالعه شده اند. اولین اکسید رسانای شفاف کاربردی، اکسید ایندیوم آلائیده با قلع، مشهور به اکسید قلع ایندیوم (ITO) با فرمول (In_2O_3:Sn) است که در سال ۱۹۵۰ گزارش شده است[۲]. به دلیل خواص الکتریکی و اپتیکی خوب این ترکیب تقریبا نیمی از ایندیوم تولید شده در جهان برای تهیه اکسید قلع ایندیوم، برای ساخت نمایشگر تخت استفاده می شود. علی رغم گذشت بیش از پنجاه سال از اولین گزارش در مورد ITO، همه ساله مقالات متعددی در مورد بهینه سازی خواص این لایه ها و ساخت آنها به روش های مختلف در نشریات بین المللی به چاپ می رسد.

TCO ها یا اکسید های رسانای شفاف در الکترودهای سلول های خورشیدی، دیودهای منتشر کننده نور، نمایشگرها با صفحه نمایش تخت و سایر وسایل اپتوالکترونیک که نیازمند اتصال الکتریکی هستند بدون اینکه ممانعتی برای ورود و خروج فوتون ها در ناحیه فعال اپتیکی وسیله وجود داشته باشد. همچنین این مواد در وسایل الکترونیکی شفاف مثل ترانزیستورهای اثر میدانی شفاف نیز استفاده می شوند.

ویژگی دیگر TCO ها که از ویژگی های اپتیکی آنهاست، این است که این مواد علاوه بر اینکه در ناحیه مرئی طیف الکترومغناطیسی بسیار شفاف هستند و عبور بالایی دارند بالعکس در

1. Transparent Conductive Oxide

ناحیه مادون قرمز طیف الکترومغناطیسی دارای انعکاس بالایی هستند. به دلیل برجستگی این ویژگی در SnO_2 که یکی از انواع TCO ها است، امروزه این ماده استفاده وسیعی در معماری دارد. پنجره هایی که با SnO_2 پوشش داده می شوند نور را به خوبی عبور می دهند ولی اجازه ورود یا خروج گرما و حرارت را بداخل ساختمان نمی دهند. پنجره های پیچیده ای به تازگی در بازار عرضه شده که به پنجره های هوشمند[1] معروفند، در این پنجره ها شیشه ها با TCO هایی که اتصالات الکتریکی داشته و لایه های الکتروکرومیک آن ها قابلیت تغییر رنگ و شفافیت دارند پوشانده می شوند و با به کار بردن و تنظیم ولتاژ در طول لایه می توان رنگ و شفافیت آن ها را به طور دلخواه تنظیم نمود.

TCO های زیادی وجود دارند که مشهورترین آنها ترکیبات دوتایی مثل In_2O_3 (که اگر قلع به عنوان ناخالصی در آن وارد شود به آن ITO گفته می شود) ، SnO_2، ZnO، Ga_2O_3 و CdO.

ترکیبات با درجه آزادی بیشتر نیز داریم مثل ترکیبات سه تایی و چندتایی که به راحتی می توان پارامترهای قابل اندازه گیری در این مواد، به طور مثال مقاومت ویژه، گاف نواری و غیره را کنترل کرد.

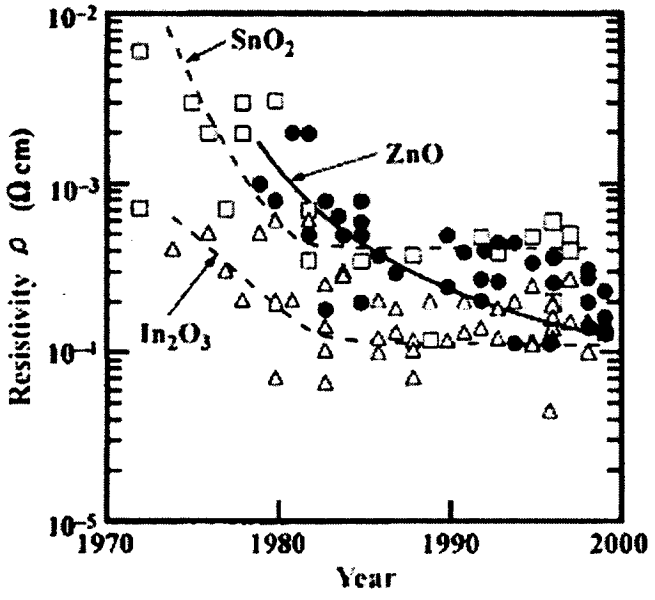
اکسید های رسانای شفاف به دو دسته n (n – TCO`s) و p (p – TCO`s) تقسیم می شوند. اکسیدهای رسانای شفاف بدون ناخالصی، دارای گاف نواری پهن هستند و عایق اند. ولی می توان با افزایش ناخالصی موضعی یا اتم های دهنده یا گیرنده ، نیم رسانای نوع n و p ساخت. n – TCO`s در سال های اخیر شامل اکسید های چند مولفه ای شبیه به $ZnSnO_3$، $CdSb_2O_6$، $MgIn_2O_4$ و Zn_2SnO_4 به طور گسترده ای مورد بررسی قرار می گیرند.

توسعه لایه های نازک p– TCO`s ، یکی از مسائل اساسی در ساخت پیوندهای p -n شفاف از قبیل دیودها، ترانزیستورها و دیودهای نور گسیل UV است.در سال ۱۹۹۸ میلادی برای نخستین بار گروه کاوازو، مقالاتی در زمینه تهیه لایه های نازک اکسیدهای رسانای شفاف نوع p، $SrCu_2O_2$، $CuAlO_2$ منتشر کردند[۲].

1. Smart Windows

در شکل (۱-۱) خلاصه ای از ویژگی های فیزیکی سه TCO مشهور یعنی In_2O_3، ZnO و SnO_2 آورده شده است.

در جدول (۱-۱) نمودار کاهش مقاومت به دست آمده برای اکسیدهای رسانای شفاف در طول سی سال اخیر آورده شده است.



شکل۱-۱: کاهش مقاومت به دست آمده برای اکسیدهای رسانای شفاف در طول سی سال اخیر[۳]

جدول ۱-۱: خلاصه ای از ویژگی های فیزیکی اکسیدهای رسانای شفاف nI_2O_3 ، OnZ و SnO_2 [٤]

Property	In_2O_3	ZnO	SnO_2
Mineral name	-	Zincite	Cassiterite
Abundance of the metal in the earth's crust (ppm)	0.1	132	40
Crystal structure	Cubic, bixbyite	Hexagonal, wurtzite	Tetragonal, rutile
Space group	$I2_13$	$P6_3mc$	$P4_2mnm$
Lattice constants [nm]	$a = 1.012$	$a = 0.325$ $b = 0.5207$	$a = 0.474$ $b = 0.319$
Density ρ [g cm^{-3}]	7.12	5.67	6.99
Mohs hardness [50]	~5	4	6.5
Thermal expansion coefficient (300 K) [10^{-6} K^{-1}]	6.7	$\|c$: 2.92 $\perp c$: 4.75	$\|c$: 3.7 $\perp c$: 4.0
Melting point [°C]	2190	2240	>1900[a]
Melting point of metal [°C]	157	420	232
Vapor pressure of metal at 500 °C [Torr]	10^{-6}	10	5×10^{-9}
Heat of formation [eV]	9.7	3.6	6.0
Band gap [eV]	3.75	3.4	3.6
Static dielectric constant ε_r (the complex dielectric functions are calculated in Ref. [51]	~9	$\|c$: 8.75 $\perp c$: 7.8	$\|c$: 9.6 $\perp c$: 13.5
Effective electron mass of conduction electrons m^*/m_0 (experimental)	0.3 [53]	-	$\|c$: 0.23 $\perp c$: 0.3 [54]
Effective electron mass of conduction electrons m^*/m_0 (computational)	0.34 [52]	$\|c$: 0.58, 0.59 $\perp c$: 0.6, 0.59 [52,55]	$\|c$: 0.20 $\perp c$: 0.26 [52]
Common extrinsic n-type dopants	Sn, Ti, Zr, F, Cl, Sb, Ge, Zn, Pb, Si	B, Al, Ga, In, Si, Ge, Sn, Y, Sc, Ti, Zr, Hf, F, Cl	Sb, F, Cl

[a] Decomposition into SnO and O_2 at 1500 °C.

۲-۱ خواص الکتریکی اکسیدهای رسانای شفاف

اکثر لایه های اکسیدی نیم رسانا، رسانندگی از نوع n دارند. به منظور تغییر در رسانندگی TCO's به آنها ناخالصی اضافه می شود. باید بین رسانندگی و شفافیت این مواد با توجه به خواص مورد نیاز سازگاری وجود داشته باشد. خواص الکتریکی، شامل مقاومت ویژه، تراکم حامل ها و تحرک حامل هاست.این مقادیر به میزان عنصرسنجی اکسیژن به طور عمدی یا غیر عمدی در ترکیبات TCO's، نوع و مقدار ناخالصی آلاییده در لایه بستگی دارد.

رابطه رسانندگی به صورت $\sigma=\mu ne$ می باشد، که در این رابطه، μ تحرک حامل ها در TCO، e بار الکترونی و n تراکم حامل هاست. رسانندگی این مواد را با توجه به رابطه می توان به دو طریق، یعنی با افزایش تراکم حامل ها و یا با افزایش تحرک آن ها افزایش داد.

با توجه به خواص اپتیکی لایه ها که در بخش بعدی مورد مطالعه قرار می گیرد، افزایش دادن تراکم حامل ها به افزایش جذب اپتیکی توسط حامل های آزاد می انجامد، ولی افزایش تحرک حامل ها در میزان شفافیت لایه های اکسیدی نیم رسانای شفاف بی تاثیر است. لذا در زمینه رسانندگی تحقیقات بر روی دو عامل فوق انجام می شود.

در این راستا در ساخت لایه های TCO جدید، ساخت لایه هایی با زمان واهلش الکترونی بالا یا موادی با جرم مؤثر الکترونی کمتر مد نظر قرار می گیرد.

محققان زیادی برای بحث و مطالعه در این رابطه از روش های مختلف لایه نشانی استفاده نمودند. در سی سال اخیر پارامترهای لایه نشانی تغییر داده شده اند تا به مقادیر بهینه برسند. با این حال هرگز یک نمونه واضح و درست از یک روش لایه نشانی جدید، یا یک سری از پارامترهای لایه نشانی که منجر به مقادیر بالای تحرک نسبت به موارد گزارش شده شود، پیدا نشد. تا اینکه کادمیوم برای اولین بار تجربه شد، این ماده توسط نزیک[1] و همکاران در اوایل دهه ۱۹۷۰ به کار گرفته شد. این گروه امیدوار بودند به دلیل جرم مؤثر الکترونی کم این ماده، بتوان

1. Nozik

به تحرک بالاتر حامل ها رسید[۵]. سپس مواد دیگری با جرم های مؤثر قابل مقایسه به کار گرفته شد و همچنین امروزه به نظر می رسد که با بهبود روش های لایه نشانی می توان حتی به زمان واهلش بیشتر برای حامل ها رسید. همچنین باید توجه داشت که به دلیل اینکه حامل های بار در p – TCO's نسبت به n – TCO's جایگزیده ترند، تحرک حامل ها در اکسیدهای رسانای شفاف نوع p کمتر از نوع n است. ضمناً هیدروژن دهی به طور مشخص و واضح افزایش تحرک حامل ها را در اواخر دهه ۱۹۹۰ نشان داده است[٦].

برای افزایش رسانندگی مواد TCO، به آن ها ناخالصی اضافه می شود. بطور مثال در ZnO، اتم روی برای تشکیل پیوند با اکسیژن، دو الکترون به اشتراک می گذارد. وقتی اکسید روی با آلومینیوم آلاییده می شود، آلومینیوم جایگزین اتم روی می شود. ولی با اکسیداسیون اتم آلومینیوم، سه الکترون و در واقع یک الکترون بیشتر از روی برای انجام پیوند فراهم می شود. این الکترون توزیع الکتروستاتیک شبکه ای را برهم می زند و برای حرکت در مواد TCO در ابتدا کاملاً آزاد نیست ولی براحتی با اعمال انرژی کمی به نوار رسانش می آید و یک حامل آزاد می شود. ناخالصی های یونیزه اغلب به عنوان مراکز پراکندگی شناخته می شوند و در موارد کمی هم گام هایی برای اثبات این نظریه برداشته شده است.

در یک روش خاص، که روش چهار مضربی نام دارد، رسانایی، ضریب هال، ثابت سی بک[1] و ثابت نرست[2] را روی نمونه مشابه بدون ایجاد هیچ تغییری در ترکیبات به دست می آورند. این روش نه تنها ما را قادر می سازد که جرم مؤثر و زمان واهلش را به طور مستقیم به دست آوریم بلکه پارامترهای پراکندگی را هم که زمان واهلش الکترون را به انرژی فرمی مربوط می کند به ما می دهد.

شناسایی سازوکار پراکندگی و اینکه آیا این پراکندگی بیشتر در دانه ها صورت گرفته است یا مرزدانه ها از اهمیت ویژه ای برخوردار است. اگر نابجایی هایی در شبکه صورت پذیرفته باشد، این بسیار مهم است که بدانیم این نابجایی ها چطور از نظر الکتریکی عمل می کنند و آیا ممکن است سهم آنها با پیشرفت روش های ساخت کاهش یابد.

1. See beck
2. Nerest

همانطور که قبلا اشاره شد جاهای خالی اکسیژن، الکترون های آزاد را در باند هدایت TCO افزایش می دهند. تولید ناکاملی های نقطه ای یا تهی جای اکسیژن در درون شبکه مواد اکسیدی سبب افزایش رسانندگی می شود. کاهش مقدار کاتیون سبب خلق یک پیوند آویزان و یک جفت الکترون می شود این الکترون ها با دریافت مقدار کمی انرژی (انرژی فعال سازی برای ناکاملی) وارد نوار رسانش می شوند ، واکنش زیر نحوه تولید تهی جای اکسیژن را نشان می دهد[۷]:

$$O_{\cdot} \rightarrow ۰/۵O_{۲g}+V_{\cdot}^{\cdot\cdot}$$

که $O_{\cdot}$ نشان دهنده اکسیژن مقید و $V_{\cdot}$، یک تهی جای اکسیژن با جفت الکترون $^{\cdot\cdot}$ است.

تهی جای اکسیژن به دو طریق می توانند در TCO's وارد شوند.

۱) کمبود اکسیژن در حین ساخت نمونه ها

۲) بازپخت مواد ساخته شده در یک محیط احیا به طور مثال آرگون

عموماً، مواد رسانای شفاف $SnO_۲$ و $In_۲O_۳$ به ترتیب با فلوئور و قلع آلاییده می شوند. ناخالصی فلوئور، کارائی بیشتری در مقایسه با ناخالصی های فلزی دارد. استفاده از فلوئور در مقایسه با ناخالصی های فلزی در سال های اخیر توسط محققان ارائه شده است، بر طبق دلایل محققین چون نوار رسانش نیم رسانای اکسیدی از اوربیتال های فلزی نتیجه می شود لذا اگر یک ناخالصی فلزی به کار برده شود، عنصر ناخالصی از طریق جانشینی با عنصر فلزی مواد رسانای شفاف (شبیه به روی یا قلع) ، به طور الکتریکی فعال می شوند. ناخالصی فلزی یک اختلال قوی در نوار رسانش ایجاد می کند که سبب افزایش پراکندگی الکترون های رسانش می شود و در نتیجه تحرک و رسانندگی کاهش می یابد. ولی، زمانی که فلوئور جایگزین اتم اکسیژن شود، اختلال الکترونی به نوار ظرفیت پرشده محدود می شود و پراکندگی الکترون های رسانش کمینه می شود. در اینجا افزایش ناخالصی، باعث افزایش تراکم حامل ها می شود. افزایش بیشتر ناخالصی به دلیل سازوکارهای پراکندگی مختلف شبیه به پراکندگی اتم های

ناخالصی یونیزه، پراکندگی اتم های ناخالصی خنثی و غیره به کاهش تحرک پذیری می انجامد در نتیجه رسانش در لایه های نازک اکسیدی بس بلور به شدت آلاییده، به وسیله سازوکارهای پراکندگی غالب و مرزدانه ها به مقدار زیادی محدود می شود[٦].

برخی از محققین برای اینکه نشان دهند اثر مرزدانه ها نسبت به سایر ناکاملی ها (ناکاملی های نقطه ای، نابجایی ها و...) کمتر است، تک بلور چندین TCO را ساخته و تحرک پذیری آنها را اندازه گیری کرده اند که نتیجه آنها تحرک پذیری خیلی بالاتر نسبت به لایه های نازک بس بلوری است، لیکن عمده کاهش تحرک پذیری در بس بلورها ناشی از مرزدانه ها نیست بلکه سایر ناکامل ها مؤثر ترند.