



دانشگاه الزهراء (س)

دانشکده علوم پایه

پایان نامه

جهت اخذ کارشناسی ارشد

رشته فیزیک

گرایش ماده چگال

عنوان

بررسی اثر ابعاد نانو ساختارهای ZnO بر خواص

اپتوالکتریک

استاد راهنما

دکتر عبدالله مرتضی علی

دانشجو

سیده زهره نگین تاجی

آبان ۱۳۸۸

خدایا

در برابر هر آنچه انسان ماندن را به تباهی می کشاند مرا
با نداشتن و نخواستن، روئین تن کن

تقدیم به

پدر و مادر عزیزم که نگاه نگران، خسته و دعای خیرشان
همواره بدرقه راهم بود

تقدیم به

خواهر بزرگوارم و سه برادر عزیزم

تقدیری ناچیز

به سپاس بیکران محبتشان



قدر دانی و تشکر

شکر و سپاس خدایی را که به من قدرت اندیشیدن داد و در راه کسب علم و دانش مرا یاری کرد.

قبل از هر چیز لازم می‌دانم از استاد گرامی آقای دکتر عبدالله مرتضی‌علی به فاطمه راهنمای‌های ارزشمندشان تشکر کنم.

همچنین از کمک‌های بی‌دریغ دانشجویان دکتری: فانم سعیده، رمضان، فانم مریجان، ربیبی و فانم مطهره عین‌اله زاده صمدی سپاسگزاری می‌کنم.

از راهنمایی‌های استاد گرامی آقای دکتر شفیق فانی و دوست بسیار عزیزم فانم رقیه ایمانی کمال تشکر را دارم.

همچنین از تمامی دوستان که هر کدام به نوعی مشوق و همراهم بودند تشکر و قدردانی می‌نمایم.



چکیده

در این پروژه میکرو/نانوساختارهای ZnO بر روی زیرلایه کوارتز به روش تبخیر حرارتی در کوره رشد داده شد. ترکیبی از پودر ZnO و پودر گرافیت (با نسبت یکسان، جهت پایین آوردن دمای بخار) را داخل یک بوته کوارتز کوچک و نزدیک انتهای آن گذاشته شد و زیرلایه کوارتز را در فواصل مختلف از مرکز کوره در تیوپ کوارتز کوچک قرار داده شد. سپس تیوپ کوچک را درون یک تیوپ بزرگ کوارتز قرار داده و گاز خنثای N₂ به عنوان گاز حامل بخار ZnO از سمتی که پودر قرار دارد، وارد می‌شود و کل مجموعه در دمای ۱۰۵۰ °C در مدت زمان‌های مختلف تحت عملیات حرارتی قرار می‌گیرد. عوامل مؤثر بر رشد میکرو/نانوساختارها از جمله اثر لایه کاتالیستی و مدت زمان لایه‌نشانی مورد بررسی قرار گرفت. بعد از فرایند لایه‌نشانی، جهت بررسی خواص ساختاری و همچنین مورفولوژی ساختارها از پراش اشعه X و آنالیز عکس‌های میکروسکوپ الکترونی روبشی SEM استفاده شد. سپس طیف عبوری T(λ) لایه به وسیله‌ی اسپکتروفوتومتری Carry ۵۰۰ در بازه‌ی طول موج ۹۰۰-۲۰۰ nm و در فرود تقریباً عمود بدست آمده و با استفاده از روش Swanepoel، خواص اپتوالکتریکی مورد تجزیه و تحلیل قرار گرفته است.

کلید: میکرو/نانوساختارهای ZnO، روش Swanepoel، ثابت‌های اپتوالکتریکی

فصل اول: خواص فیزیکی اکسید روی

- ۱-۱ مقدمه..... ۱
- ۲-۱ ساختار کریستالی ZnO..... ۲
- ۲-۱ ساختار هگزاگونال ZnO..... ۴
- ۳-۱ خواص فیزیکی اکسید روی..... ۶
- ۴-۱ کاربردهای ZnO..... ۶
- ۴-۱-۱ آینه حرارتی..... ۷
- ۴-۱-۲ آشکارساز نوری..... ۸
- ۴-۱-۳ فیلترهای سیگار..... ۸
- ۴-۱-۴ وسایل آرایشی..... ۸
- ۴-۱-۵ صنعت دارو سازی..... ۸
- ۴-۱-۶ صنعت سرامیک..... ۹
- ۴-۱-۷ سلول خورشیدی..... ۹
- ۴-۱-۸ پیزوالکتریک..... ۱۰
- ۵-۱ ساختارهای نواری..... ۱۲
- ۶-۱ نواقص شبکه..... ۱۴
- ۷-۱ دسته بندی نانو ذرات..... ۱۵

نشانی‌های لایه فصل دوم : روش

- ۲۲ ۱-۲ روش‌های شیمیایی
- ۲۲ ۲-۲ روش‌های فیزیکی
- ۲۳ ۱-۲-۲ تبخیر گرمایی
- ۲۵ ۲-۲-۲ اسپاترینگ
- ۲۶ ۳-۲-۲ پوشش‌دهی یونی (Ion plating)
- ۲۷ ۴-۲-۲ لایه‌گذاری به وسیله‌ی باریکه مولکولی (MBE)
- ۲۸ ۵-۲-۲ تبخیر حرارتی در کوره
- ۳۲ ۳-۲ لایه نازک
- ۳۲ ۱-۳-۲ ساختمان لایه نازک
- ۳۲ ۲-۳-۲ مکانیزم رشد لایه‌های نازک
- ۳۳ ۳-۳-۲ پارامترهای مهم لایه نازک اکسید روی
- ۳۶ ۴-۳-۲ ویژگی‌های زیرلایه خوب

فصل سوم : خواص اپتیکی لایه نازک

۴۰	۲-۳ طیف عبوری لایه ZnO.....
۴۰	۱-۲-۳ اثر ناخالصی در طیف عبوری لایه ZnO.....
۴۲	۳-۳ محاسبه ضریب جذب لایه.....
۴۳	۴-۳ محاسبه ضریب شکست.....
۴۵	۵-۳ محاسبه ضخامت لایه.....
۴۵	۶-۳ محاسبه ضریب خاموشی لایه.....
۴۷	۷-۳ محاسبه گاف انرژی.....

فصل چهارم بررسی نتایج تجربی

۵۰	۴-۱ مقدمه.....
۲-۴ ۵۰	مراحل شتشوی زیر لایه.....
۵۱	۳-۴ رشد نانو ساختارها.....
۵۲	۱-۳-۴ تأثیر تغییر فاصله بین پودر واقع در مرکز کوره و زیر لایه.....
۵۳	۲-۳-۴ تأثیر مدت زمان لایه نشانی در رشد میکرو/نانو ساختارها.....
۵۶	۳-۳-۴ تأثیر پخت لایه کاتالیستی.....
۵۸	۴-۳-۴ آنالیز RD.....
۶۰	۴-۴ بررسی خواص اپتو الکترونیکی نانو ساختارهای ZnO.....
۶۳	۱-۴-۴ خواص اپتیکی ساختارهای ZnO.....
۶۳	۱-۴-۴-۱ بررسی تغییرات بخش حقیقی ضریب شکست ساختارهای ZnO.....

۶۴ بررسی تغییرات بخش موهومی ضریب شکست ساختار ZnO ۲-۱-۴-۴
۶۷ خواص دی الکتریکی ساختارهای ZnO ۲-۴-۴
۶۷ منحنی تغییرات قسمت حقیقی ضریب دی الکتریک ساختارهای ZnO ۱-۲-۴-۴
۶۸ منحنی تغییرات قسمت موهومی ضریب دی الکتریک ساختارهای ZnO ۲-۲-۴-۴
۷۰ ضریب جذب ساختارهای ZnO ۴-۴-۳
۷۳ محاسبه گاف انرژی ۴-۴-۴
۷۵ بررسی اثر تغییرات ابعاد ساختارهای ZnO بر تأثیر رسانندگی آن ها در اثر تابش نور ۵-۴-۴
۷۹ نتیجه گیری و پیشنهادات ۷۹
۸۱ پیوست الف ۸۱
۸۲ مراجع ۸۲

فصل اول

- شکل (۱-۱) سه ساختار اکسید روی..... ۲
- شکل (۲-۱) نمودار انرژی بستگی بر حسب حجم ۳
- شکل (۳-۱) نمودار انرژی بستگی بر حسب حجم..... ۴
- شکل (۴-۱) تصاویری از ساختار ورتزیت اکسید روی..... ۵
- شکل (۵-۱) طیف در صد عبوری ودر صد بازتاب برای اکسید روی در طول موج های مرئی ومادون قرمز..... ۷
- شکل (۶-۱) نمونه از کاربرد اکسید روی در سلول خورشیدی..... ۱۰
- شکل (۷-۱) نمونه از نانوساختارهای ZnO با خاصیت پیزوالکتریک قوی..... ۱۱
- شکل (۸-۱) ساختار نواری ZnO..... ۱۳
- شکل (۹-۱) ترازهای انرژی..... ۱۳
- شکل (۱۰-۱) ساختار ZnO..... ۱۴
- شکل (۱۱-۱) (a) nanowire (b), nanotubes (c), nano-tetrapod (d), nanocombs (e) flower-like..... ۱۶
- شکل (۱۲-۱) طیف XRD باپراش اشعه X برای لایه نازک ZnO و زیرلایه si ۱۷
- شکل (۱۳-۱) طیف XRD لایه های ZnO و ZnO:Al با زیرلایه شیشه ۱۸

- شکل (۱۴-۱) طیف XRD لایه‌های ZnO:Al₃ZnO در دمای ۴۵۰ °C به مدت ۳۰ دقیقه پخت در مجاورت هوا..... ۱۹.....
- شکل (۱۵-۱) طیف XRD لایه‌های ZnO:Al با ضخامت‌های مختلف..... ۱۹.....
- شکل (۱۶-۱) طیف XRD لایه ZnO با سه زیرلایه شیشه، کوارتز و (Al₂O₃)..... ۲۰.....

فصل دوم

- شکل (۱-۲) دستگاه تبخیر گرمایی..... ۲۴.....
- شکل (۲-۲) دستگاه اسپاترینگ ۲۶.....
- شکل (۳-۲) دستگاه پوشش دهی یونی..... ۲۷.....
- شکل (۴-۲) شماتیکی از اجزاء دستگاه MBE..... ۲۸.....
- شکل (۶-۲) تبخیر حرارتی در کوره..... ۲۹.....
- شکل (۷-۲) ساختمان لایه نازک ۳۰.....
- شکل (۸-۲) مکانیزم رشد لایه‌های نازک ۳۲.....

فصل سوم

- شکل (۱-۳) طیف عبوری لایه‌ها بر حسب طول موج با ضخامت های مختلف ۳۹.....
- شکل (۱-a-۳) طیف عبوری لایه های ZnO و ZnO:Al با زیرلایه شیشه..... ۴۰.....
- شکل (۱-b-۳) طیف عبوری لایه‌های ZnO:Al زیرلایه شیشه با ضخامت‌های مختلف..... ۴۰.....
- شکل (۲-۳) طیف عبوری لایه ZnO برای سه زیرلایه شیشه، کوارتز، (Al₂O₃)..... ۴۱.....
- شکل (۳-۳) مقادیر بیشینه و کمینه طیف عبور..... ۴۳.....

- شکل (۳-۴) نمودار ضریب شکست لایه نازک ZnO در ضخامت های مختلف..... ۴۳
- شکل (۳-۵) نمودار ضریب خاموشی ZnO بر حسب طول موج..... ۴۵
- شکل (۳-۶) منحنی $(\alpha h\nu)^2$ بر حسب $h\nu$ برای زیرلایه شیشه..... ۴۷
- شکل (۳-۷) منحنی $(\alpha h\nu)^2$ بر حسب $h\nu$ برای سه زیرلایه شیشه، کوارتز و (Al_2O_3) ۴۷
- شکل (۳-۸) نمودار شبه-لگاریتمی، ضریب جذب بر حسب انرژی فوتون ($\alpha < 10^4$)..... ۴۸

فصل چهارم

- شکل (۴-۱) کوره استوانه‌ای..... ۵۱
- شکل (۲-a-۴) نمودار دما بر حسب فاصله ۵۲
- شکل SEM (۴-۲) زمان ۱۵ دقیقه و فاصله ۵ سانتیمتر از مرکز کوره ۵۳
- شکل SEM (۴-۳) زمان ۱۵ دقیقه و فاصله ۱۰ سانتیمتر از مرکز کوره..... ۵۳
- شکل SEM (۴-۵) زمان ۳۰ دقیقه، با فاصله ۱۰ سانتیمتر از مرکز کوره..... ۵۴
- شکل SEM (۴-۶) زمان ۳۰ دقیقه، با فاصله ۱۰ سانتیمتر از مرکز کوره ۵۴
- شکل SEM (۴-۷) زمان ۶۰ دقیقه، با فاصله ۵ سانتیمتر از مرکز کوره..... ۵۵
- شکل SEM (۴-۸) زمان ۶۰ دقیقه، با فاصله ۱۰ سانتیمتر از مرکز کوره..... ۵۵
- شکل SEM (۴-۹) زمان ۶۰ دقیقه، با فاصله ۱۰ سانتیمتر از مرکز کوره..... ۵۵
- شکل SEM (۴-۱۰) زمان ۶۰ دقیقه، با فاصله ۱۰ سانتیمتر از مرکز کوره..... ۵۵
- شکل SEM (۴-۱۱) زمان ۶۰ دقیقه، با فاصله ۱۰ سانتیمتر از مرکز کوره..... ۵۵
- شکل SEM (۴-۱۲) زمان ۳۰ دقیقه، حاوی کاتالیست طلا در دو بزرگ نمایی مختلف..... ۵۶
- شکل SEM (۴-۱۳) زمان ۱۵ دقیقه، حاوی کاتالیست طلا..... ۵۷

- شکل SEM (۴-۱۴) زمان ۹۰ دقیقه، حاوی کاتالیست طلا در دو بزرگ نمایی مختلف..... ۵۷
- شکل (۴-۱۵) آنالیز XRD..... ۵۸
- شکل (۴-۱۶) طیف عبوری اندازه گیری شد توسط دستگاه طیف سنج ۵۰۰ Carry مربوط به پنج نمونه ۶۲
- شکل (۴-۱۶) منحنی تغییرات قسمت حقیقی ضریب شکست بر حسب انرژی موج فرودی..... ۶۴
- شکل (۴-۱۷) منحنی تغییرات قسمت موهومی ضریب شکست بر حسب انرژی موج فرودی..... ۶۵
- شکل (۴-a-۱۶) نمودار بالک حقیقی ضریب شکست بر حسب انرژی موج فرودی..... ۶۶
- شکل (۴-b-۱۶) نمودار بالک قسمت موهومی ضریب شکست بر حسب انرژی موج فرودی..... ۶۶
- شکل (۴-۱۸) منحنی تغییرات قسمت حقیقی ضریب دی الکتریک بر حسب انرژی موج فرودی..... ۶۷
- شکل (۴-۱۹) منحنی تغییرات قسمت موهومی ضریب دی الکتریک بر حسب انرژی موج فرودی..... ۶۸
- شکل (۴-a-۱۸) منحنی بالک تغییرات قسمت حقیقی ضریب دی الکتریک بر حسب انرژی موج فرودی..... ۶۹
- شکل (۴-b-۱۹) منحنی بالک تغییرات قسمت موهومی ضریب دی الکتریک بر حسب انرژی موج فرودی..... ۶۹
- شکل (۴-۲۰) منحنی تغییرات ضریب جذب برای نمونه های a, b, c و d بر حسب انرژی موج فرودی..... ۷۲
- شکل (۴-۲۱) نمودار $(h\nu)$ بر حسب انرژی موج فرودی..... ۷۳
- شکل (۴-a-۲۰) منحنی بالک تغییرات ضریب جذب بر حسب انرژی موج فرودی..... ۷۴
- شکل (۴-b-۲۱) نمودار بالک $(h\nu)$ بر حسب انرژی موج فرودی..... ۷۴
- شکل (۴-۲۲) مدار ساده برای اندازه گیری مقاومت سطحی..... ۷۶

شکل (۴-۲۳) نمودار مقاومت سطحی بر حسب مدت زمان لایه نشانی..... ۷۸

فصل اول

جدول (۱-۱) جدول تناوبی..... ۲

فصل چهارم

جدول (۱-۴) مربوط به جریان، ولتاژ و مقاومت سطحی ۷۳

جدول (۲-۴) ضخامت نمونه‌ها..... ۷۷

Abstract

Nanostructured ZnO thin film have been grown on quartz substrates by horizontal tube furnace. the mixed pure ZnO powder and Graphit powder (weight ratio of 1:1) Was placed in the closed end of a small quartz tube. quartz substrates were placed at definite distances away from the evaporation source in the small quartz tube (at distances 5cm and 10cm of powder). then, the small tube was pushed into the large quartz tube with the source positioned at the center of the furnace. The whole system was heated at a rate 1.5 °c/min under a constant flow of N₂ gas and held at 1050° c for 15 min, 30 min and 60 min. during whole synthesis process the pressure in the tube was kept at Atmospheric pressure. After the furnace was naturally cooled to room temperatuer. After as-deposited ZnO nanostructures surface were characterized by scanning electron microscopy (SEM).

We present the methodological framework of the Swanepoel for the spectrophotometric of optical propertie in nanostructuers and thin film usinng transmittance data. We determined the refractive index, absorption index, extinction cofficient, optical gap, constant dielectric $\epsilon_1 = n^2 - k^2$ and $\epsilon_2 = 2nk$ of a ZnO nanostructures thin film. then, effect of duration time deposition and catalyst-goold was considered on propertie optoelectice.



Al-Zahra University

Thesis Title

**Size effect on Optoelectronic properties of
ZnO Nanostructures**

Thesis Advisor

Dr.Abdolah Morteza Ali

By

Seyedeh Zohreh Negintaji

November. 2009



فصل اول: خواص فیزیکی اکسید روی

۱-۱ مقدمه

اکسید روی (ZnO) از ترکیبات دو عنصر ستون ۲ و ۶ جدول تناوبی می‌باشد که در آن روی، اتمی با عدد اتمی ۳۰ و اکسیژن اتمی با عدد اتمی ۸ می‌باشد و دارای ساختار هگزاگونال با ثابت-های شبکه‌ای $(A^0) ۳.۲۵$ یا $(nm) ۰.۳۲۵$ و $a = ۰.۳۲۵$ و $(A^0) ۵.۲۱$ یا $(nm) ۰.۵۲۱$ و انرژی اکسایتون بالا (mev) ۶۰ می‌باشد که هر یون Zn به وسیله چهار یون اکسیژن و هر یون اکسیژن به وسیله چهار یون Zn به صورت چهاروجهی احاطه شده است. در حالت عادی بدون افزودن ناخالصی اکسیدروی، نیمه‌رسانای نوع n با گاف انرژی در حدود (ev) ۳.۲ می‌باشد البته مقادیر (ev) ۳.۳، (ev) ۳.۴ گزارش شده است که در فاز بی‌شکل به صورت پودر زرد رنگ و در فاز بلور شفاف می‌باشد. به علت دارا بودن گاف انرژی بالا، انرژی اکسایتون بالا و شفافیت اپتیکی بالا در ناحیه مرئی و ضریب دی‌الکتریک کم دارای کاربردهای وسیعی در زمینه پیزوالکتریک، سلول‌های خورشیدی، حسگرها، آینه‌های حرارتی، آشکارسازها و ... می‌باشد. لایه‌های اکسیدروی با روش‌های شیمیایی مانند رسوب شیمیایی از حمام (CBT)، اسپریرولیز، سل ژل و ... روش‌های فیزیکی مانند اسپاترینگ، اسپاترینگ مگنترون، اسپاترینگ با پرتو یونی، اسپاترینگ تشدید سیکلوترونی الکترونی (ECR)، روش تبخیرلیزری، تبخیر اپتیکی باریکه مولکولی و ... لایه نشانی می‌شود. که در میان این روش‌ها، روش اسپاترینگ (برای کاربردهایی با کیفیت بالا)، لایه‌نشانی بخار شیمیایی الی فلز (MOCVD) و تجزیه حرارتی اسپری (برای سادگی و قیمت پایین) بیشتر مورد استفاده قرار گرفته‌اند.

در این فصل به شرح مختصری درباره‌ی ساختار، خواص فیزیکی اکسید روی، کاربردهای آن

می‌پردازیم.

۲-۱ ساختار کریستالی ZnO

اکسیدروی از ترکیبات دو عنصر ستون ۲ و ۶ جدول تناوبی (جدول (۱-۱)) می باشد که در آن روی، اتمی با عدد اتمی ۳۰ و پیکره بندی الکترونی $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2$ و اکسیژن اتمی با عدد اتمی ۸ و پیکره بندی الکترونی $1s^2 2s^2 2p^4$ می باشد.

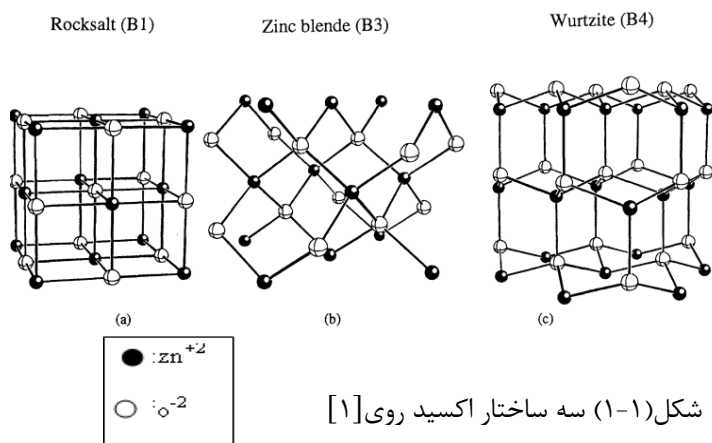
جدول (۱-۱): جدول تناوبی

II	III	IV	V	VI
.	B	C	N	O
.	Al	Si	P	S
Zn	Ga	Ge	As	Se
Cd	In	Sn	Sb	Te
Hg

در حالت عادی بدون افزودن ناخالصی اکسید روی، نیمه رسانای نوع n با گاف نواری در حدود (ev)

۳.۲ می باشد. اکسید روی دارای سه ساختار در شرایط غیر متعارف می باشد که در شکل (۱-۱) نشان

داده شده است. [۱]



۱- ساختار نمک طعام^۱

۲- ساختار زینک بلند^۲

۳- ساختار هگزاگونال^۳

^۱ Rocksalt

^۲ Zinc blende

^۳ Wurtzite