



تعیین گاف انرژی و خواص نوری شیشههای MoO3-V2O5-TeO2

حسيني، سيده فاطمه؛ سوري، داريوش

گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه ملایر، ملایر

چکیدہ

در این پژوهش، نمونههای تودهای 2O5-40TeO₂ و60-x)V₂O5-40TeO با درصدهای مولی متفاوت 60≥x≥0 به روش فرونشانی سریع مذاب تهیه شدهاند. جهت ارزیابی خواص اپتیکی، طیف جذب نوری نمونهها در محدوده طول موج ۱۱۰۰–۱۹۰ نانومتر گرفته شد. سپس، از روش مشتق انطباق طیف جذب (به طوراختصار DASF) به عنوان رویکردی دقیق برای تعیین گاف انرژی و همچنین ماهیت دقیق گذار حاملهای بار استفاده شد. نتایج نشان میدهد که کمترین گاف انرژی نوری مقداری برابر با ۲/۳۸ eV برای 10 = x است. همچنین برخی از کمیتهای اپتیکی مانند پهنای دنبالهای نوار انرژی (انرژی (انرژی Moch از محدود))، ضریب شکست (n) و ثابت دی الکتریک (ع) برای شیشههای مورد مطالعه بدست آمد. نتایج حاکی از آن است که نمونه MV00 منونه بهینه برای کاربردهای نوری مانند فیبرهای نوری است.

كليد واژه: مشتق انطباق طيف جذب، گاف انرژى نورى، انرژى اورباخ، ضريب شكست.

Determination of the optical band gap and optical properties of MoO₃-V₂O₅-TeO₂ glasses

Hosseini, Seyyedeh Fatemeh; Souri, Dariush

Department of Physics, Faculty of Science, Malayer University, Malayer

Abstract

In this research, the bulk samples of $xMoO_3$ -(60-x)V₂O₅-40TeO₂ compositions with different molar contents of $0 \le x \le 60$ were prepared by rapid melt-quenching method. To investigate the optical properties, the optical absorption spectra of samples were taken within the wavelength range of 190-1100 nm. Then, derivation of absorption spectrum fitting method (shortened as DASF) was used as precise approach to determine the band gap and the exact nature of charge carriers transition. Results show that the minimum optical band gap is equal to 2.38 eV for x = 10. In addition, some optical quantities such as the width of the band tails (Urbach energy), refractive index (n) and dielectric constant (ε) were obtained for the under studied glasses. Results imply that the TVM10 sample is the optimal sample for optical applications such as optical fibres.

Keywords: derivation of absorption spectrum fitting, optical band gap, Urbach energy, refractive index.

PACS :78,81

مقدمه

شیشههای اکسیدی شامل اکسیدهای فلزات واسطه در سالهای اخیر از جنبههای گوناگونی از قبیل خواص نوری، ترموالکتریکی، ساختاری و الکتریکی بطور گستردهای مورد مطالعه قرار گرفتهاند [۱–۴]. برخی از ویژگی های منحصر به فرد شید شههای تلوریومی عبارتند از: ضریب شکست بالا، ثابت های دیالکتریک بالا، توانایی تشکیل شیشه بالا، پایداری شیمیایی و محیطی بالا، استحکام مکانیکی خوب، دمای ذوب پایین، خاصیت غیر نمگیری، گذار فروسرخ و ســاختار مقاوم در برابر شــوکهای گرمایی[۳و۵و۶]. <mark>در</mark> نیمرســاناهای آمورف، گاف نواری (که به دلیل وجود دنباله نواری و لبه های متحرک به آن شــبه گاف میگویند) را میتوان با روشهای شناخته شدهای که برای نیمه رساناهای بلوری و نانو بلوری نیز استفاده میشود، تعیین کرد. به دلیل عـدم مطـالعـه گســترده و دقیق در مورد خواص نوری<mark></mark> شـــیشــههای ســهتایی تلورو وانادیومی حاوی مولیبدن، در پژوهش حاضــر از رویکرد DASF برای تعیین گاف نوری<mark>،</mark> ماهیت گذار حاملهای بار نوری شـــیشـــههای مورد مطال<mark>عه</mark> ستفاده شده است. در روش قدیمی تاک و روش بهبود یافت<mark>ه</mark> نطباق طیف جذبی (ASF) که تاکنون از آن بهره گرفته شده است، علاوه بر وقت گیر بودن میتواند با خطا در تعیین<mark></mark> گاف انرژی نوری همراه باشد؛ چرا که شاخص نوع گذار نوری (m) باید ابتدا مشــخص گردد. روش DASF با گســترش تئوری روشASF ، به روشی بسیار دقیق و سریع در تعیین گاف انرژی نوری نیمرســـاناها بدون نیاز به پیش داوری در زمینه نوع گذار صورت گرفته، و همچنین پرهیز از ا ستفاده از روش مجموع کمترین مربعات تبدیل شده است[۹–۷].

روش ساخت نمونه

در این پژوهش، شیشههای اکسیدی سه مولفهای TVMx (که به اختصار ۲۷MoO₃-(60-x)V₂O₅-40TeO₂ نامگذاری میشوند و x درصد مولی مؤلفهی MoO₃ دارای مقادیر MoO₃ میشوند و x درصد مولی مؤلفه ی xeO₃ دارای مقادیر x=0, 10, 20, 30, 40, 50, 60 mol% دارای ذوب مخلوط مناسب مؤلفه های تشکیل دهنده با درصد خلوص بالا به روش سرمایش سریع مذاب ساخته شدهاند که

جزییات مربوطه در مرجع شـماره (۱) آمده اسـت. علاوه بر سـاخت نمونه های تودهای، لایه های آمورف جهت اندازه گیریهای نوری با دمش در مذاب با ویسکوزیته بالا از طریق لولهی باریک بور- سـیلیکا حاصـل شـدند. تحلیلهای سـاختاری اپتیکی این نمونهها، به ترتیب به وسـیله پراش Diffractometer: SEIFERT3003, این نمونهها، به ترتیب م وسـیله پرتو X توسط دستگاه (CuKa, و دسـنج فرابنفش – مرئی (PerkinElmer, UV/VIS Spectrometer Lambda25, (SA) انجام شدهاست.

نتايج و بحث

الف: مشخصه يابي پر تو X

TVMx مشخصه یابی پرتو ایکس روی نمونههای تودهای TVMx به روش پودری انجام شده است (شکل (۱)). عدم وجود قله-های بلوری در این الگوها طبیعت آمورف و غیر بلوری نمونهها را تایید میکند[۱].



ب: تحلیل اپتیکی، تعیین گاف انرژی و پهنای حالت-های دنبالهای نواری

شــکل(۲) طیف جذب نمونههای TVMx را در گســتره فرابنفش– مرئی نشــان میدهد که میتوان از این نمودار

اطلاعاتی از قبیل گاف نوری، پهنای انرژی حالت های دنباله ای در گاف انرژی و نوع گذار القایی نوری انجام شـده برای حامل های بار را بدست آورد. همانطور که مشاهده می کنید، تیز نبودن لبه جذب نوری در نمونههای مورد پژوهش، مبین ماهیت غیربلوری نمونهها و نتایج حاصـل از پراش پرتو X میباشد. برای محاسبه گاف انرژی نوری نمونههای مورد نظر از روش DASF استفاده شده است که مراحل آن در مرجع شماره (۷) ذکر شده است.



 $d\{\ln[A(\lambda)/\lambda]\}/d(1/\lambda)$ (نمودار ($\Delta (1/\lambda)$) شکل (π) برحسب $(1/\lambda)$ را برای نمونههای مورد بررسی نشان می دهد که به صورت نوعی برای نمونهی TVM0 در تصویر درونی شـکل (۳) نشان داده شـدهاست و نتایج بدست آمده در جدول (۱) آمده است. مطابق شکل (۴)، نمونه TVM10 دارای کمترین گاف انرژی است که مبین افزایش بی نظمی ساختاری و گسترش حالات جایگزیده درون گاف انرژی نوری بر طبق مدل نواری دیویس- مات میباشد و ممکن است گزینهی خوبی برای فیبرهای نوری (به دلیل پذیرفتاری نوری غیرخطی بالاتر) باش.د. از طرفی، افزایش گاف در TVM50 و TVM60، مىتواند ناشـى از تغييرات سـاختارى ناشیی از افزایش مولی بدن و در نتیجه کاهش چگالی اکسیژنهای غیرپیوندی میباشد. با توجه به رابطه (۲) از شیب بخش خطی نمودار $\ln\left(\frac{A}{\lambda}\right)$ ابرحسب $\ln\left(\frac{A}{\lambda}\right)$ ، مقدار m (شاخص نوع گذار نوری) در محدوده ۴ ۰/۶۲۹۰ - ۰/۲۹۰۸ (نزدیک به ۰/۵) می باشد که مبین گذار نوری مجاز مستقیم برای نمو نه های مورد پژوهش است. شکل (۵) نمودار تغییرات $ln(\frac{A}{\lambda} - \frac{1}{\lambda_a})$ را بر حسب $ln(\frac{A}{\lambda} - \frac{1}{\lambda_a})$ برای نمونه های TVMx نش_ان مید هد. انرژی اور باخ (Etail) را بعنوان

معیاری از بی نظمی اتمی و انحراف از وجود لبه های تیز نوارهای ظرفیت و رسانش (گذار نوری بین حالات دنبالهای نوار ظرفیت و حالات گسترده در نوار رسانش) میتوان طبق آنچه در شکل (۶) آمده است، از قرار دادن شیب ناحیه خطی نمودار (A) آمده است، از قرار دادن شیب ناحیه خطی نمودار (A) آمره است، کرد؛ که نتایج در جدول (۱) آمده است. مقادیر انرژی اورباخ بدست آمده در محدوده آمده است. مقادیر انرژی اورباخ میباشد.





کو چک بودن مقادیر انرژی اور باخ در مقایسه با مقادیر متناظر گاف انرژی نمونه ها، بیانگر احتمال بیشتر گذار حامل بار بین حالات جایگزیده در برانگیزشههای الکتریکی است. ضریب شکست بالاتر و کمترین مقدار گاف انرژی برای نمونه TVM10 مبین بالاترین پذیرفتاری نوری غیر خطی مرتبه سوم در بین نمونه هاست و آن را بعنوان گزینه مناسبی جهت استفاده در فیبرهای نوری معرفی می کند.

٣





ج: تعیین ضریب شکست و ثابت دی الکتریک در لبه جذب

ضریب شکست در تعیین تنا سب مواد شیشهای برای استفاده در دستگاه های نوری استفاده می شود و رابطه معکوسی با گاف انرژی دارد، که در لبهی جذب با استفاده از رابطه زیر معرفی می شود[۱۰]:

$$\left(\frac{n^2-1}{n^2+2}\right) = 1 - \sqrt{\frac{E_{gap}^{DASF}}{20}}$$
 (*)

مقادیر ضریب شکست نمونهها در جدول (۱) آمده است. بیشترین ضریب شکست مربوط به نمونهی TVM10 است که کمترین مقدار E_{gap}DASF را دارد. همچنین با استفاده از مجذور ضریب شکست، میتوان ثابت دیالکتریک(٤) در لبه جذب را بدست آورد که نتایج در جدول (۱) آمده است.

نتيجهگيرى

الگوهای XRD و تیز نبودن لبه جذب نوری نمونهها مبین ماهیت آمورف نمونه ها می باشد. نتایج به دست آمده از روش DASF نشان میدهد که گاف انرژی نوری از ۲/۵۰ به ۲/۳۸ الکترون ولت برای ۱۰ $> x > \cdot$ کاهش مییابد و سپس به ۲/۴۰ eVa برای ۲/۶۰ه افزایش مییابد. مقادیر m بد ست آمده در محدوده ۲/۶۲۹۴ افزایش مییابد. مقادیر ایری مجاز مستقیم برای نمونههای مورد پژوهش است. همچنین، بیشترین ضریب شکست مربوط به نمونهی TVM10 است که کمترین مقدار E_{gap} DASF را دارد.

جدول(۱): مقادیر گاف انرژی به دست آمده از روش DASF (شیری اورباخ(E_{tail}) ، شاخص گذار (m)، ضریب شکست (n) ، ثابت دی الکتریک (٤)، برای شیشههای TVMx.

sample	$\lambda_g {}^{\textbf{-}1} (nm {}^{\textbf{-}1})$	n	m	E _{gap-DASF} (eV)	E _{tail} (eV)	3
TVM0	0.00202	2.5449	0.3017	2.50445	0.9185	6.4769
TVM10	0.00192	2.5875	0.2908	2.38047	0.32046	6.6956
TVM20	0.00199	2.5572	0.333	2.46726	0.3144	6.5397
TVM30	0.00209	2.5166	0.3967	2.59124	0.3080	6.3332
TVM40	0.00220	2.4745	0.3665	2.7276	0.40488	6.1234
TVM50	0.00255	2.3548	0.3031	3.16156	0.32817	5.5452
TVM60	0.00274	2.2973	0.6294	3.39713	0.34337	5.2780

مراجع

- [1] D. Souri, M. Elahi; Phys. Script. 75 (2007) 219-222.
- [2] D. Souri; J. Phys. D: Appl. Phys. 41 (2008) 105102.
- [3] G. Turky, M. Dawy; Mater. Chem. Phys. 77 (2002) 48-59.
 [4] K. Sega, H. Kasai, H. Sakata; Mater. Chem. Phys. 53 (1998) 28-33.
- [5] A.H. Khafagy, A.A. El-Adawy, A.A. Higazy, S. El-Rabaie, A.S. Eid; J. Non-Cryst. Solids 354 (2008) 3152.
- [6] M. M. Ahmad, E. S. Yousef, E. S. Moustafa; Physica B: Cond. Matt. 371 (2006) 74-80.
- [7] D. Souri, Z.E.Tahan; Appl. Phys. B 119 (2015) 273–279.
- [8] D. Souri, K. Shomalian, J. Non-Cryst. Solids 355 (2009) 1597–1601.
- [9] L.E. Alarcon, A. Arrieta, E. Camps, S. Muhl, S. Rudil, E.V. Santiago, Appl. Surf. Sci. 254 (2007) 412–415.
- [10] N. Chopra, A. Mansingh, G.K. Chadha; J. Non-Cryst. Solids 126 (1990) 194–201.