



تاثیر راستای رشد فیلم نازک ZnO بر خواص اپتیکی آن

عمار مهاجران، فريبا احمدي و احمد يزداني

گروه حالتجامد، بخش فیزیک، دانشکدهی علوم پایه، دانشگاه تربیت مدرس، صندوق پستی۱۷۵–۱۴۱۱۵، تهران

چکیده – در این مقاله با استفاده از محاسبات بنیادی توسط بستهٔ WIEN2K، پارامترهای اپتیکی و الکترونیکی فیلم نازک اکسید روی رشد داده شده در راستاهای مختلف بدست آمده است. مشاهده خواهد شد که خواص الکترونیکی و اپتیکی این ترکیب به مقدار زیادی به راستای رشد آن بستگی دارد. با تغییر راستای رشد، چینش اتمهای سطح نیز تغییر میکند که این خود موجب تغییرات الکترونیکی و اپتیکی می شود. در این گزارش، ساختارهای نواری و نمودارهای تابع دی الکتریک *ZnO* به منظور بررسی تغییرات الکترونیکی و اپتیکی ای این ترکیب به ارائه شده است.

كليد واژه- تابع دى الكتريك، ساختارنوارى، فيلم نازك، WIEN2K.

Effect of growth direction on optical properties of ZnO thin film

Ammar Mohajeran, Fariba Ahmadi and Ahmad Yazdani

Department of Physics, Tarbiat Modares University, P.O.Box 14115-175, Tehran, Iran

Abstract- In this article, optical and electronic properties of the grown ZnO thin film are gained in various directions by means of the first principles calculations, using WIEN2K package. Here it is proved that electronic and optical properties of ZnO are extensively depended on its growth direction. When direction of growth is altered, the arrangement of surface atoms is consequently changed, leading to electronic and optical changes. In this report, band structures and dielectric function graphs of ZnO are presented to study electronic and optical variations.

Keywords: Band structure, Dielectric function, Thin film, WIEN2K.

مقدمه

در سالهای اخیر تلاشهای گسترده ای در راستای تولید فیلمهای نازک شفاف به دلیل کاربرد های بالقوهی آن در الكترودهاى شفاف نمايشگرهها ، ناشر ميدان ، نشر ليزر فرابنفش، ردیابهای نوری، پیزوالکتریسیتی ، بیوسنسورها، دیودهای نوری با طول موج کوتاه و تکنولوژی اطلاعات [1-5] شده است. اکسید روی مادهی مناسبی برای اینگونه کاربردها می باشد. اکسید روی نیمه رسانای نوع n با گاف مستقیم حدود (eV) 3.37 و انرژی اکسیتونی 60(meV) در دمای اتاق است . نظم میکروسکوپی سطح و ساختار بلوری فیلم های رسانای شفاف تاثیر بسیاری بر عملکرد سلولهای خورشیدی دارد . برای اینگونه کاربردها ، توسعهی فیلم های نازک اکسیدی رسانای شفاف با سطوح تار و يودى بسيار مهم است[6,7] . وجود تارو يود مزيت والایی است برای کاربرد در سلول های خورشیدی زیرا باعث افزایش پراکندگی نور به لایه های فعال سلول و افزایش طول مسیر اپتیکی [8] و در نتیجه تولید حامل-های آزاد میشود اکسید روی دارای ساختار کریستالی شش وجهی با گروه فضایی P6₃mc است. پارامتر های شبکه (^a=3.249(A°) و c=5.207(A°) با جایگاههای . (2/3,1/3,0,345) ، Zn(2/3,1/3,0) است . ساختار را می توان به مانند صفحاتی متشکل از $O^{2^{-}}$ و ZnO هایی در نظر گرفت که به صورت چهاروجهی در ${
m Zn}^{2+}$ راستای c تکرار شده اند . ساختار چهاروجهی ZnO باعث یک تقارن غیر مرکزی و خاصیت پیزوالکتریکی می شود . ویژگی مهم دیگرZnO وجود صفحات قطبی آن است . مشهودترین صفحات قطبی ZnO صفحه ی پایه آن است (عمود بر بردار نرمال [000]) يون هاى با بار مخالف صفحات قطبى (0001)-Zn

یون های با بار مخالف صفحات قطبی (0001)-2 مثبت و (⁻0001)-O منفی به وجود می آورند که منجر به یک ممان دوقطبی و پلاریزاسیون خود به خودی در راستای c می شوند. صفحه قطبی دیگر (1⁻011) است . با تصویر کردن ساختار در راستای [10⁻12] ، علاوه بر

صفحات قطبی مرسوم (0001)± که با Zn و O تعیین می شوند ، (1⁻¹101)± و (⁻¹⁻¹101)± نیز صفحات قطبی هستند.

{1101} گونه صفحات در ZnO معمول نیست ، اما در نانو ساختارهای مارپیچی مشاهده شده اند[9].

بارهای روی صفحات قطبی بارهای یونی هستند که قابل شارش یا انتقال نیستند. به دلیل اندرکنش بین بارهای توزیع شده روی صفحات ، ساختار به گونه ای منظم می شود که انرژی الکترواستاتیکی را کمینه کند .

در این مقاله تاثیر راستای رشد که منجر به ساختارهای متفاوت میشود ، بررسی شده است.

روش تهيه مقاله

در این مقاله تمام محاسبات اپتیکی با استفاده از بستهی APW+lo (LAPW) [10] با پایههای (LAPW) تبادلی و انجام شده است. برای لحاظ کردن پتانسیلهای تبادلی و GGA همبستگی از تقریب GGA استفاده شده است. در این برنامه تانسور دیالکتریک مختلط به صورت : [11] $\operatorname{Im} \mathcal{E}_{\alpha\beta}(\omega) =$

$$\frac{4\pi e^2}{m^2 \omega^2} \sum_{C,V} dk \langle C_K | P^{\alpha} | V_K \rangle \langle V_K | P^{\alpha} | C_K \rangle$$
(1)
 $\times \delta(\varepsilon_{C_K} - \varepsilon_{V_K} - \omega)$

$$\frac{\operatorname{Re} \varepsilon_{\alpha\beta}(\omega) = \delta_{\alpha\beta} + \frac{2}{\pi} P_0^{\infty} \frac{\omega' \operatorname{Im} \varepsilon_{\alpha\beta}(\omega')}{\omega'^2 - \omega^2} d\omega'$$
(7)

به کار برده می شود. در معادلات بالا C_K و V_K توابع موج کریستالی مربوط به باند رسانش و ظرفیت هستند با بردار موج کریستالی K جمع در معادلهی اول بر روی تمام حالتهای ظرفیت و رسانش است که با اندیس V و C نشان داده شده اند.

علاوه بر این می توان ثابت دیالکتریک مختلط را به صورت : $(\omega) = \varepsilon_1(\omega) + i\varepsilon_2(\omega)$ نوشت.

باقی پارامترهای اپتیکی را میتوان از روی مولفههای تابع دیالکتریک مختلط به دست آورد. با روشهای مختلف میتوان فیلمهای نازک گوناگونی در راستاهای متفاوت تولید کرد، از جمله در راستاهایی مانند [0001] ، [10-10] ، [11-01] .[21]

Textured surface '

بنا به ملاحظات تقارنی ما راستاهای : [0001]، [20-11]، [20-11]، [00-01]، [01-10] را برگزیدهایم. چون نوع اتمهایی که بر روی سطح قرار می گیرند تاثیر زیادی بر خواص الکترونیکی و اپتیکی ماده دارند در نتیجه برای راستای [0001] که همان c میباشد، دو ساختار در نظر گرفتهایم، یک ساختار که به اتمهای O ختم میشود و دیگری که به اتمهای Zn ضخامت تمام لایهها تقریبا یکسان است اسمهای به دلیل اتمهای می کنیم مختلط(شکل ۲-۱)، ساختارها را به دو گروه تقسیم می کنیم:

- [11-21], [01-10], [0001]_O (1
- [11-20], [10-10], [0001]_Zn (Y



شکل ۱: قسمت حقیقی تابع دیالکتریک





Λ

TAA

M

-14.0 크

Σ

رشد داده شده در راستای [10-10] نیمهرسانایی با گاف انرژی حدود ev 0.6 است و ساختار دیگر در راستای [000] فلز میباشد. تمام ساختارهایی که در یک گروه قرار داده شدهاند از لحاظ اتمهای روی سطحشان با هم مشترک هستند در نتیجه، فلز یا نیمهرسانا بودن آنها را می توان به ترازهای الکترونی اتهای روی سطح نسبت داد. می توان این نتایج را در جهت بهبود بازدهای سلولهای خورشیدی و ردیابهای نوری به کار برد.

سپاسگزاری

از جناب آقای محمدرضا صمدیشادلو برای همفکری و مباحثات پربارشان کمال تشکر را داریم .

مراجع

- [1] Z. K. Tang, G. K. L. Wong, P. Yu, M. Kawasaki, A. Ohtomo,
- H. Koinuma and Y. Segawa, Applied Physics Letters,
- Vol. 72, No. 25, June 1998, pp. 3270-3272.
- [2] Y. B. Li, Y. Bando and D. Golberg, Applied Physics Letters, Vol. 84, No. 18, May 2004, pp.
- 3603-3605.

[3] A. Tsukazaki, A. Ohtomo, T. Onuma, M. Ohtani, T.

Mankino, M. Sumiya, K. Ohtani, S. F. Chichibu, S. Fuke, Y. Segawa, H. Koinuma and M. Kawasaki, Nature Materials,

Vol. 4, No. 1, January 2005, pp. 42-46.

[4] S. H. Lee, S. S. Lee, J. J. Choi, J. U. Jeon and K. Ro, Microsystem

Technologies, Vol. 11, No. 6, June 2005, pp. 416-423.

[5] J. Q. Xu, Q. Y. Pan, Y. A. Shun and Z. Z. Tian, Sensors and Actuators B: Chemical, Vol. 66, No.

1-3, July 2007, pp. 277-279.

[6] H. Schade, Z.E. Smith, J. Appl. Phys. 57 (1985) 568.

[7] S. Major, K.L. Chopra, Sol. Energy Mater. 17 (1988) 319.

[8] C. Walker, R. Hollingsworth, J. Del Cueto, A. Madan, Mater. Res. Soc. Symp. Proc. 70 (1986) 563.

[9] R. S. Yang, Y. Ding and Z. L.Wang,2004, nano lett, vol.4, p.1309.

[10] He'bert, C.1, january 2007, micron, vol.38, pp.12-28.

[11] F. Wooten, "Optical properties of solids," Acdemic Press, New York, 1972.

[12] Ziaul Raza, Khan, Mohd Shoeb Khan, Mohammad Zulfequar, Mohd Shahid Khan. 2011, material sciences and applications, vol.2, pp.340-345



شکل ۴: ساختار نواری فیلم نازک رشد داده شده در راستای [10-10]

قلههای موجود در تابع دی الکتریک به گذارهای بین باند ظرفیت و باند رسانش مربوط می شود. قسمت مختلط تابع دیالکتریک نشان دهنده ی میزان جذب است، همانگونه که در شکل(۲) نمایان است ساختارهای گروه ۲ در بازه صفر تا یک الکترونولت جذب ندارند و گروه ۱ دارای قله ی جذب هستند. قسمت حقیقی تابع دی-الکتریک نشان دهنده ی میزان بازتاب است، در نتیجه بنا دارای مقدار ثابت است و گروه ۱ از مقدار بیشینه خود به مورت نزولی کاهش می یابد. به علت کمبود فضا در مقاله برای نمونه از هر گروه یک ساختارنواری آورده شده است. ساختار [000] به اتمهای O ختم می شود. میزان ساختار قاری و نیمهرسانایی این ساختارها را تعیین می-خاصیت فلزی و نیمهرسانایی این ساختارها را تعیین می-کنند.

نتيجهگيرى

تاثیر راستای رشد فیلم نازک اکسید روی بر خواص اپتیکی آن به صورت محاسباتی بررسی شده است. از ساختارهای نواری نمونه مشاهده میشود که فیلم نازک