بیستمین کنفرانس اپتیک و فوتونیک ایران
و ششمین کنفرانس مهندسی و فناوری فوتونیک ایران
۸ تا ۱۰ بهمن ماه۱۳۹۲ - دانشگاه صنعتی شیراز

تأثیر دمای بازپخت بر گاف انرژی نوری و ریزساختار لایه‌های نازک سولفید کادمیوم

مرضیه سعیدی بروجنی و ویشتاسب سلیمانیان

گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه شهرکرد، شهرکرد، ایران

چکیده- در این بررسی نانوذرات سولفید کادمیوم به روش حمام شیمیایی روی زیر لایه‌ی شیشه نشانده شد. با مطالعه‌ی طیف مرئی- فرابنفش نمونه‌ها تغییرات گاف انرژی به‌صورت تابعی از دمای بازپخت مورد بررسی قرار گرفت. همچنین ریزساختار فیلم‌های سولفید کادمیوم برحسب اندازه بلورک‌ها، چگالی دررفتگی و صفحات لغزشی فعال با استفاده از تحلیل خطوط پراش و نرم‌افزار CMWP مطالعه شد.

کلید واژه- چگالی دررفتگی، ریز ساختار، سولفید کادمیوم، گاف انرژی

The effect of annealing temperature on the optical energy gap and microstructure of CdS thin films

M. Saeedi boroujeni and V. Soleimanian

Department of Physics, faculty of Sciences, Shahrekord University, Shahrekord, Iran

Abstract- In this study, the cadmium sulfid nanostructure films were deposited on glass substrate using CBD technique. The behavior of optical energy gap of film was studied as a function of annealing temperature using UV-visible spectrometer. The microstructure of CdS films was also evaluated in terms of crystalline size as well as dislocation density and fraction of slip planes activity, using X-ray diffraction analysis and applying CMWP fitting procedure.

Keywords: Band gap, Cadmium sulfide, Dislocation density, Microstructure

[Downloaded from www.opsi.ir on 2026-11-06]

۱-مقدمه

سولفید کادمیوم یک نیم‌رسانای ترکیبی با گاف انرژی مستقیم و فرمول شیمیایی CdS است که کابردهای فراوانی در ساخت سلولهای خورشیدی، دیودهای گسیلنده نور[۱]، کاتالیستهای نوری [۲] و ابزارهای اپتوالکترونیکی [۳] دارد. این ماده در دو سامانه مکعبی و شش‌گوشه‌ای متبلور می‌شود. در سالهای اخیر اثرات الکترونوری نانوساختارهای این ماده مورد توجه و مطالعه قرار گرفته است [۴]. با اینکه تاثیر کوچک شدن اندازه بلورک‌ها، شکل آن‌ها و افزایش نقصهای نقطه، خطی و صفحه‌ای بر خواص فیزیکی نانوذرات سولفید کادمیوم بر کسی پوشیده نیست تا کنون بررسی دقیقی بر تاثیر این کمیت‌ها روی یکدیگر انجام نگرفته است و در این پژوهش‌ها عمده بررسی ریزساختار به تخمین اندازه بلورک‌ها با میکروسکوپهای الکترونی روبشی (SEM) و انتقالی (TEM) محدود می‌شود. در این پژوهش ریزساختار فیلم‌های سولفید کادمیوم با استفاده از پراش پرتوهای X و نرم‌افزار CMWP مورد ارزیابی قرارگرفته است.

۲-روش تجربی

ابتدا به روش لایه‌نشانی حمام شیمیایی، نانوذرات سولفید کادمیوم بر زیرلایه‌های شیشه رشد داده شد. زیرلایه‌ها قبل از قرار گرفتن در محلول به ترتیب با اسید نیتریک، استون، دوپروپانول و آب دیونیزه در اولتراسونیک تمیز و خشک شدند. با واکنش کلریدکادمیوم $(CdCl2)$ وتیوره(NH_2CSNH_2) به عنوان منبع یون‌های کادمیوم و گوگرد در یک محلول آبی لایه‌ی نازک سولفید کادمیوم بر زیر لایه‌های شیشه پس از ۹۰دقیقه لایه‌نشانی شد. برای هدایت مسیر واکنش‌ها و بهبود پوشش حاصل در حمام از سیترات سدیم و به‌منظور افزایش pH محلول از سود استفاده شد. pH محلول بین ۱۱ تا ۱۲ و دمای حمام بین ۶۷ تا ۶۸ درجه تنظیم گردید. سپس لایه‌های نازک سولفید کادمیوم، در دماهای ۳۰۰ تا ۵۰۰ درجه در کوره‌ی الکتریکی باز پخت شد. برای تعیین گاف انرژی با استفاده از دستگاه طیف سنج مرئی-فرابنفش از نمونه‌های تهیه شده در محدوده‌ی طول موج ۱۹۰ تا۹۰۰ با گام ۲ نانومتر طیف عبوری گرفته شد و در گستره‌ی $2\theta = 20-60^0$ نقش پراش پرتو x برای بررسی ریزساختار نمونه تهیه گردید.

۲-۱-بررسی خواص اپتیکی

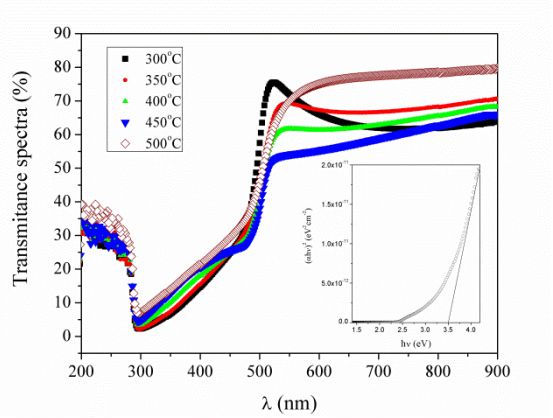
در تعیین گاف انرژی نمونه‌ها ، می‌توان از وابستگی ضریب جذب اپتیکی α به انرژی فوتون $h\nu$ استفاده کرد [۵].

$$(\alpha h\nu) = k(h\nu - E_g)^n \qquad (۱)$$

n برای نیم‌رساناها با گاف انرژی مستقیم حدود ۰/۵ است. ابتدا ضریب جذب برای هر طول موج طبق رابطه زیر تعیین می شود [۶].

$$\alpha = -\frac{1}{d}\ln T \qquad (۲)$$

از رسم منحنی $(\alpha h\nu)^2$ بر حسب $h\nu$و برازش خط راست بر روی محدوده‌ی خطی این منحنی‌ها، k و kE_g به ترتیب از شیب و عرض از مبدأ به‌دست می‌آید و از تقسیم این دو مقدار گاف انرژی تعیین می‌شود (شکل۱) . d ضخامت لایه‌ها و T ضریب عبور است.



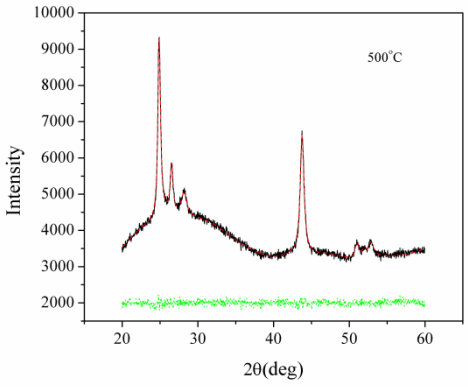
شکل ۱: منحنی تغییرات طیف عبور برحسب طول موج و نمودار فرعی تغییرات $(\alpha h\nu)^2$برحسب $h\nu$را نشان می‌دهد.

۲-۲-تعیین ریزساختار

تئوری پهن‌شدگی خطوط پراش بررسی روشهایی است که با استفاده از پراش پرتوهای x، ریزساختار مواد بلوری را برحسب اندازه بلورک‌ها و نقص‌های شبکه‌ای مورد تحلیل قرارمی‌دهد[۷]. در این بررسی از بین روش‌های مختلف تعیین ریزساختار نرم‌افزار $CMWP$ انتخاب شد[۸]. از

[Downloaded from www.opsi.ir on 2026-11-06]

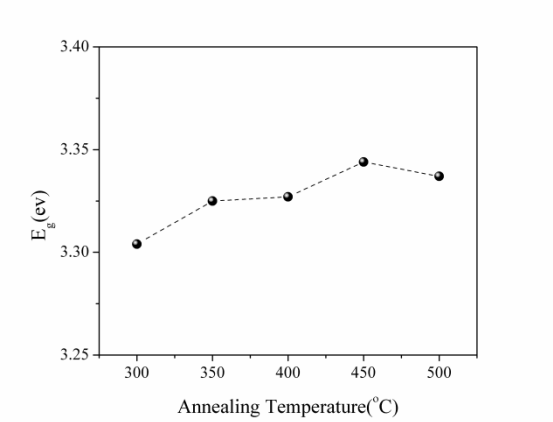
مزایای این نرم‌افزار نسبت به موارد مشابه می‌توان به عدم استفاده از یک تابع شکل ریاضی به‌منظور برازش خطوط پراش اشاره کرد. به جای آن در این نرم‌افزار با تعریف یک تابع توزیع لاگ نرمال برروی رفتار اندازه بلورک‌ها و تغییر پارامترهای این تابع و همچنین نسبت دادن دررفتگی به کرنش ناهمسانگرد نمونه‌ها، شکل خطوط پراش شبیه‌سازی می‌شود. در مرحله بعد پارامترهای وابسته به توزیع لاگ نرمال و چگالی دررفتگی پالایش شده و آنقدر این تغییرات ادامه پیدا می‌کند تا اختلاف بین نمایه‌های مشاهده و محاسبه شده به روش حداقل مجذورات کمینه شود. در این نرم‌افزار علاوه بر تخمین اندازه بلورک‌ها و چگالی دررفتگی می‌توان درصد فعالیت صفحات لغزشی در سامانه‌های مکعبی و شش گوشه‌ای را مورد ارزیابی قرار داد. نقش پراش مشاهده و شبیه‌سازی شده نمونه ۵۰۰ درجه در شکل۱ نشان داده شده است. همانگونه که از شکل دیده می‌شود توافق نسبتا خوبی بین نمایه‌های مشاهده و محاسبه شده وجود دارد.



شکل ۲: نقش پراش مشاهده شده(__)، محاسبه شده(---)و اختلاف بین دو نقش نمونه(...) سولفید کادمیوم که به روش CMWP در دمای بازپخت 500°C به دست آمده است.

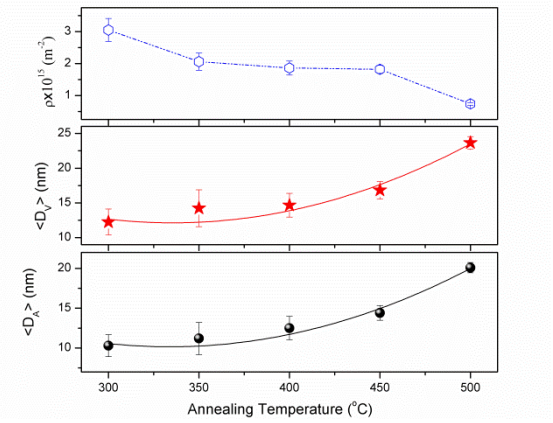
۳-تحلیل داده ها

* شکل۲ منحنی تغییرات گاف انرژی نوری نمونه‌ها را به‌صورت تابعی از دمای بازپخت نشان می‌دهد. همانگونه که از شکل مشاهده می‌شود گاف انرژی نمونه‌ها بین ۳/۳۰۴ تا ۳/۳۳۷ الکترون ولت تغییر می‌کند. هرچند یک روند افزایشی دیده می‌شود اما تغییرات نسبت به دما ناچیز است.



شکل ۳: منحنی تغییرات گاف انرژی به صورت تابعی از دمای بازپخت.

* با پالایش پارامترهای سایز و کرنش توسط نرم‌افزار *CMWP* میانگین سطحی($\langle D_A \rangle$) و حجمی($\langle D_V \rangle$) اندازه بلورک‌ها و همچنین چگالی دررفتگی (ρ) نمونه‌ها محاسبه شد. بررسی این نتایج نشان می‌دهد میانگین سطحی و حجمی اندازه بلورک‌ها تابع درجه دوم از دماست و با افزایش دمای بازپخت افزایش پیدا کرده است در صورتیکه چگالی دررفتگی (کل طول خط دررفتگی در واحد حجم بلور) کاهش یافته است.که این دلیل بر بهبود خواص بلوری فیلم‌ها با افزایش دمای بازپخت است.



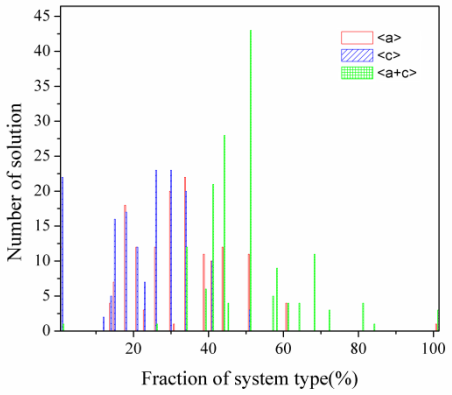
شکل ۴: منحنی تغییرات میانگین سطحی و حجمی اندازه بلورک‌ها و چگالی دررفتگی به صورت تابعی از دمای بازپخت.

جدول۱ : پارامترهای پالایش شده در دماهای بازپخت با CMWP

T(°C)	$\langle D_A \rangle$ (nm)	$\langle D_V \rangle$ (nm)	$\rho \times 10^{15}$ (m^{-2})
۳۰۰	۱۰/۳	۱۲/۲	۳/۰۵
۳۵۰	۱۱/۲	۱۴/۲	۲/۰۶
۴۰۰	۱۲/۵	۱۴/۷	۱/۸۵
۴۵۰	۱۴/۴	۱۶/۹	۱/۸۱
۵۰۰	۲۰/۱	۲۳/۷	۰/۷۴

[Downloaded from www.opsi.ir on 2026-11-06]

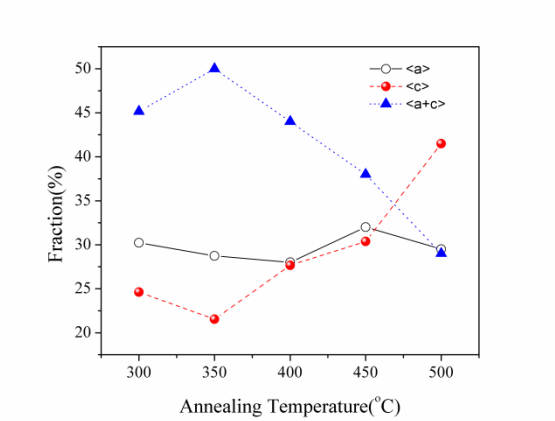
* با استفاده از دیگر مقادیر پالایش شده نرم‌افزار *CMWP* تعداد و نوع سامانه‌های لغزشی فعال نمونه‌های سولفید کادمیوم که در سامانه‌ی شش گوشه‌ای متبلور شده بودند مورد مطالعه قرار گرفت. بدین منظور ابتدا با رسم توزیع بسامد دررفتگی سه نوع صفحه لغزشی یعنی <**a**>، <**c**> و <**a+c**> که در آن a و c ثابت‌های شبکه‌ای سولفید کادمیوم هستند. رفتار این ۳ نوع دررفتگی مطالعه (شکل۴) و تغییرات آن‌ها برحسب دمای بازپخت تعیین گردید (شکل۵). این تغییرات نشان می‌دهد که دررفتگی نوع <**a**> حول ۳۰ درصد نوسان دارد. دررفتگی نوع <**c**> افزایش و <**a+c**> کاهش پیدا کرده است. میانگین دررفتگی <**a**> ، <**c**> و <**a+c**> به‌ترتیب ۳۰، ۲۹ و ۴۱ درصد است که دررفتگی نوع <**a+c**> غالب است.



شکل ۵: نمودار توزیع بسامد دررفتگی نوع<a>،<c>و<a+c> در دمای بازپخت 350°c.

جدول ۲: درصد سیستم‌های لغزشی فعال در دماهای مختلف بازپخت

T(°C)	<a>%	<c>%	<a+c>%
۳۰۰	۳۰	۲۵	۴۵
۳۵۰	۲۹	۲۱	۵۰
۴۰۰	۲۸	۲۸	۴۴
۴۵۰	۳۲	۳۰	۳۸
۵۰۰	۳۰	۴۱	۲۹



شکل ۶: تغییرات دررفتگی نوع <a>و<c> و<a+c> به صورت تابعی از دمای بازپخت.

۴-بحث و نتیجه‌گیری

بازپخت نمونه‌ها سبب بهبود ساختار بلوری، رشد و افزایش اندازه بلورک‌ها می‌شود. گاف انرژی نوری ، میانگین سطحی و حجمی انداره بلورک‌ها با افزایش دمای بازپخت افزایش و چگالی دررفتگی نمونه‌ها کاهش پیدا کرده است و از بین انواع دررفتگی‌ها ، دررفتگی نوع <a+c> غالب است.

مراجع

[1] S. Q. Sum, T. Li, *Synthesis and characterization of CdS Nanoparticles and Nanorods via Solvo-Hydrothermal Route*, Cryst. Growth. Design vol.7, 2007, pp.2367-2371.

[2] N. Romeo, A. Bosio, V. Canevari, A. Podesta, *Recent Progress on CdTe/CdS thin film Solar cell*, Solar Energy vol.77,2004,795.

[3] H. Fujii, M. Ohtaki, K. Eguchi, H. Arai, *Preparation and photocatalystic activities of a semiconductor composite of CdS embedded in a TiO_2 gel as a stable oxide semiconducting matrix*, J. Mol. catal. A: chem. vol.129, 1998, pp.61-68.

[4] L. Zeiri, Ipatala, S. Acharaya, Y. Golan, S. Efrima, *Raman spectroscopy of ultranarrow CdS Nanostructures*, J. Phys. Chem.C.vol.111, 2007, pp.11843-11848.

[5] J. Tauc, *Amorphous and Liquid semiconductors*, Plenum, London, 1974, pp.159.

[6] J .C. Manifacier, J. Gasiot, J. P. Fillard, *A simple method for the determination of the optical constants n, k and the thickness of a weakly absorbing thin film*, J. Phys.E vol. 1976, pp.1002.

[7] B. E. Warren, and B. L. Averbakh ,*The Effect of Cold-Work Distortion on X-Ray Patterns* ,J. Appl. Phys. Vol. 21, 1950, pp. 595-599.

[8] G. Ribarik, J. Gubizca and T. Ungar, *Correlation between Strength and Microstructure of Ball-Milled Al-Mg Alloy Determined by X-Ray Diffraction*, J, Matt. Sci. Eng. A, Vol. 387, 2004, pp. 343-347.

[Downloaded from www.opsi.ir on 2026-11-06]