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

تاثیر راستای رشد فیلم نازک ZnO بر خواص اپتیکی آن

عمار مهاجران، فریبا احمدی و احمد یزدانی

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 می‌شود. در این گزارش، ساختارهای نواری و نمودارهای تابع دی‌الکتریک *ZnO*، به منظور بررسی تغییرات الکترونیکی و اپتیکی ، ارائه شده است.

کلید واژه- تابع دی الکتریک، ساختارنواری، فیلم نازک، 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.

[Downloaded from www.opsi.ir on 2026-11-03]

مقدمه

در سالهای اخیر تلاشهای گسترده ای در راستای تولید فیلم‌های نازک شفاف به دلیل کاربرد های بالقوه‌ی آن در الکترودهای شفافِ نمایشگرهها ، ناشر میدان ، نشر لیزر 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 می‌باشد. اکسید روی نیمه رسانای نوع n با گاف مستقیم حدود 3.37(eV)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 پودی[۱] بسیار مهم است[6,7] . وجود تارو پود مزیت 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 $P6_3mc$ است. پارامتر های شبکه a=3.249(A°) و c=5.207(A°) با جایگاههای Zn(2/3,1/3,0) ، O(2/3,1/3,0,345) است . ساختار ZnO را می توان به مانند صفحاتی متشکل از O^{2-} و Zn^{2+} هایی در نظر گرفت که به صورت چهاروجهی در 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 صفحه‌ی پایه آن است (عمود بر بردار نرمال [0001])

یون های با بار مخالف صفحات قطبی (0001)-Zn مثبت و $(000\bar{1})$-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 $(01\bar{1}1)$ است . با تصویر کردن ساختار در راستای $[12\bar{1}0]$ ، علاوه بر صفحات قطبی مرسوم $(0001)\pm$ که با Zn و O تعیین می شوند ، $(10\bar{1}1)\pm$ و $(10\bar{1}\bar{1})\pm$ نیز صفحات قطبی هستند.

$\{10\bar{1}1\}$ 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 تهیه مقاله

در این مقاله تمام محاسبات اپتیکی با استفاده از بسته‌ی WIEN2K [10] با پایه‌های APW+lo (LAPW) انجام شده است. برای لحاظ‌کردن پتانسیلهای تبادلی و همبستگی از تقریب GGA استفاده شده است.

در این برنامه تانسور دی‌الکتریک مختلط به صورت : [11]

$$\mathrm{Im}\,\varepsilon_{\alpha\beta}(\omega) = \frac{4\pi e^2}{m^2\omega^2}\sum_{C,V} dk \langle C_K|P^\alpha|V_K\rangle\langle V_K|P^\alpha|C_K\rangle \times \delta(\varepsilon_{C_K}-\varepsilon_{V_K}-\omega) \quad (۱)$$

$$\mathrm{Re}\,\varepsilon_{\alpha\beta}(\omega) = \delta_{\alpha\beta} + \frac{2}{\pi}P\int_0^\infty \frac{\omega'\mathrm{Im}\,\varepsilon_{\alpha\beta}(\omega')}{\omega'^2-\omega^2}d\omega' \quad (۲)$$

به کار برده می‌شود. 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 : $\varepsilon(\omega)=\varepsilon_1(\omega)+i\varepsilon_2(\omega)$ نوشت.

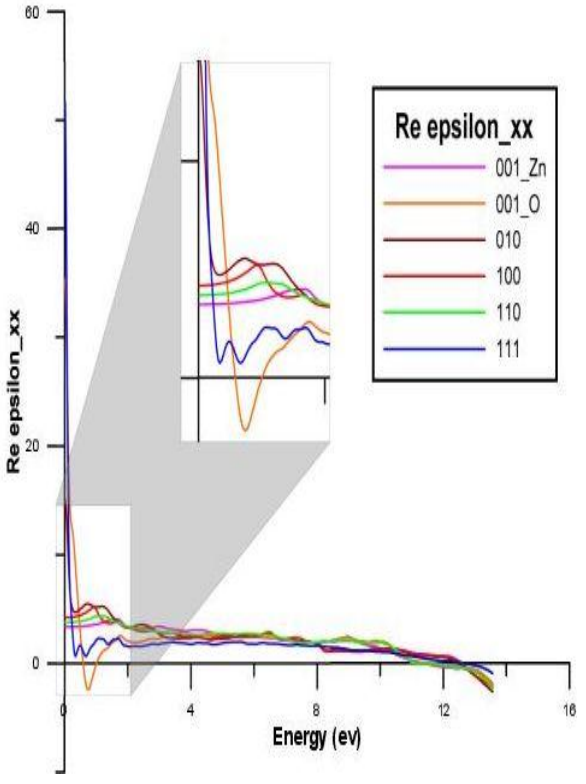
باقی پارامترهای اپتیکی را می‌توان از روی مولفه‌های تابع دی‌الکتریک مختلط به دست آورد. با روشهای مختلف می‌توان فیلم‌های نازک گوناگونی در راستاهای متفاوت تولید کرد، از جمله در راستاهایی مانند [0001] ، [10-10] ، [10-11] .[12]

[۱] Textured surface

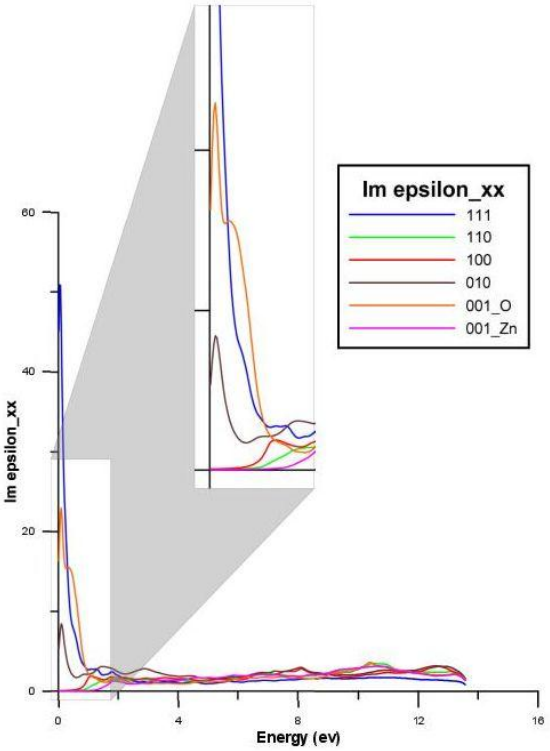
[Downloaded from www.opsi.ir on 2026-11-03]

بنا به ملاحظات تقارنی ما راستاهای :
[0001] ، [11-20] ، [11-21] ، [10-10] ،
[01-10] را برگزیده‌ایم. چون نوع اتمهایی که بر روی سطح قرار می‌گیرند 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 (23.07~24 bohr) . تفاوت اندک لایه ها به دلیل موقعیت گوناگون صفحات است. بنا به نمودارهای تابع دی‌الکتریک مختلط(شکل ۲-۱)، ساختارها را به دو گروه تقسیم می‌کنیم:

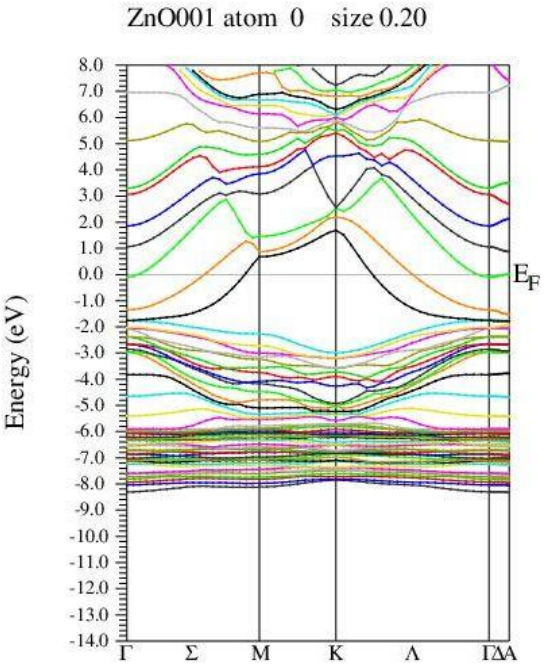
۱) [0001]_O، [01-10]، [11-21]
۲) [0001]_Zn، [10-10]، [11-20]



شکل ۱: قسمت حقیقی تابع دی‌الکتریک

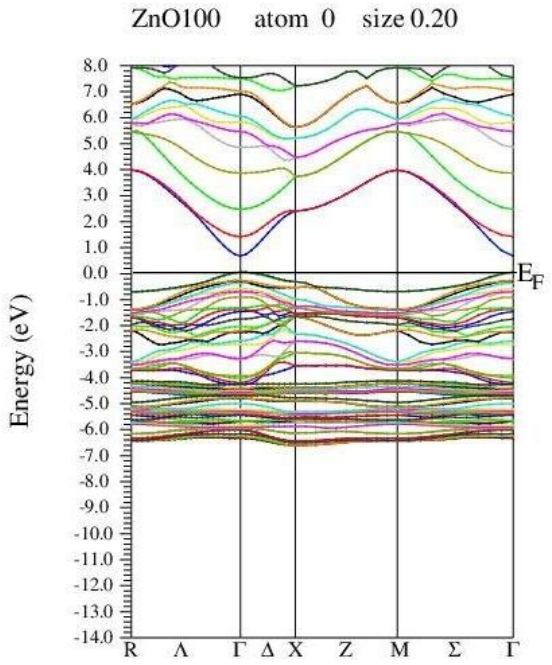


شکل ۲: قسمت مختلط تابع دی‌الکتریک



شکل ۳: ساختار نواری فیلم نازک رشد داده شده در راستای [0001] که به اتمهای اکسیژن ختم می‌شود

[Downloaded from www.opsi.ir on 2026-11-03]



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 دهنده‌ی میزان جذب است، همانگونه که در شکل(۲) نمایان است ساختارهای گروه ۲ در بازه‌ی صفر تا یک الکترون‌ولت جذب ندارند و گروه ۱ دارای قله‌ی جذب هستند. قسمت حقیقی تابع دی-الکتریک نشان دهنده‌ی میزان بازتاب است، در نتیجه بنا به شکل(۲)، مشاهده می شود که گروه ۲ در بازه‌ی مذکور دارای مقدار ثابت است و گروه ۱ از مقدار بیشینه خود به صورت نزولی کاهش می‌یابد. به علت کمبود فضا در مقاله برای نمونه از هر گروه یک ساختارنواری آورده شده است. ساختار [0001] به اتمهای O ختم می‌شود. میزان هیبریدشدگی s-p و sp-d اتمهای اکسیژن و روی خاصیت فلزی و نیمه‌رسانایی این ساختارها را تعیین می-کنند.

نتیجه‌گیری

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 رشد داده شده در راستای [10-10] نیمه‌رسانایی با گاف انرژی حدود 0.6 ev است و ساختار دیگر در راستای [0001] 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. می‌توان 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

[Downloaded from www.opsi.ir on 2026-11-03]