



بیست و ششمین کنفرانس اپتیک و فوتونیک ایران و دوازدهمین کنفرانس مهندسی و فناوری فوتونیک ایران، دانشگاه خوارزمی، تهران، ایران. ۱۶-۱۵ بهمن ۱۳۹۸



شبیه‌سازی اپتیکی و ساخت الکترودهای شفاف رسانای نانو ساختار $\text{MoO}_3/\text{Ag}/\text{D}$ به منظور استفاده در ادوات اپتوالکترونیک

بهرام جلیلی، سید محمدباقر قریشی

دانشکده فیزیک، دانشگاه کاشان، کاشان

bahram.jalili1994@gmail.com- mghorashi@kashanu.ac.ir

چکیده - در این پژوهش نخست شبیه‌سازی الکترودهای شفاف نانو ساختار $\text{MoO}_3/\text{Ag}/\text{ZnS}$ ، $\text{MoO}_3/\text{Ag}/\text{WO}_3$ ، $\text{MoO}_3/\text{Ag}/\text{V}_2\text{O}_5$ با ضخامت‌های بهینه به ترتیب $39.9/21.4/22$ ، $39.3/21.7/22.8$ و $42.4/20.7/21$ نانومتر به منظور دست‌یابی به شفافیت بالا و مقاومت سطحی پایین پرداخته شد. سپس این ساختارها روی بسترهای شیشه‌ای به روش تبخیر حرارتی انباشت شدند. همچنین در این مقاله تأثیر پارامترهایی نظیر آهنگ لایه‌نشانی، ضخامت لایه‌ها، دمای زیر لایه‌ها، روی ویژگی‌های ساختاری، اپتیکی و الکتریکی، این نانو ساختارهای چندلایه‌ای بررسی شد. تراگسیل اپتیکی برای هر ساختار به‌ویژه در طول موج 550 نانومتر به ترتیب به صورت 55.1% ، 65.8% ، 66.9% و مقاومت سطحی الکترودهای ساخته‌شده به ترتیب (Ω/\square) 8.38 ، 4.26 ، 4.38 ، 8.38 به دست آمد.

کلیدواژه- الکترودهای شفاف نانو ساختار، تراگسیل اپتیکی، فاکتور شایستگی، مقاومت سطحی.

Optical design and fabrication of $\text{MoO}_3 / \text{Ag} / \text{D}$ nano conductive transparent electrodes for use in optoelectronic devices

Bahram Jalili; S.M.B Ghoreyshi

Department of Physics, University of Kashan, Kashan

bahram.jalili1994@gmail.com- mghorashi@kashanu.ac.ir

Abstract- In this study, we first design and simulate transparent nanostructured electrodes $\text{MoO}_3 / \text{Ag} / \text{V}_2\text{O}_5$, $\text{MoO}_3 / \text{Ag} / \text{WO}_3$, $\text{MoO}_3 / \text{Ag} / \text{ZnS}$ with optimum Thickness, $39.3 / 21.7 / 22.8$, $39.9 / 21.4 / 22$, $42.4 / 20.7 / 21$, respectively. The nanometers were studied to achieve high transparency and low sheet resistance and then these structures were deposited on glass substrates by thermal evaporation. In this paper, the effect of parameters such as layer rate, layer thickness, substrate temperature, on structural, optical and electrical properties of these multilayer nanostructures was investigated. The optical transducers for each structure, especially at 550 nm, were 65.8 , 55.1 and 66.9% , respectively, and the sheet resistance of the electrodes was $8.38 / 4.26 / 4.38 (\Omega / \square)$, respectively.

Keywords: Nanostructure Transparent conductive electrode, Optical transducer, Competency factor, Surface resistivity.

مقدمه

بازتاب را برای محدوده طول موج مورد نظر تنظیم کرد [۳] در ساختارهای الکترودهای رسانای شفاف نانو ساختار، لایه فلز پارامتر اصلی در تعیین مقاومت سطحی است. در این پژوهش فلز نقره به علت دارا بودن کمترین مقدار مقاومت ویژه نسبت به سایر فلزات بهترین کاندید برای لایه فلز می باشد. در ساختار سه لایه ها علاوه بر رسانندگی فلز، شفافیت و مقاومت سطحی به شدت وابسته به ضخامت لایه است [۴].

روش ساخت: به منظور طراحی سیستم های سه لایه ای مد نظر با استفاده از نظریه ماتریس انتقال لایه های نازک هر سه ساختار در محیط نرم افزار Mathcad شبیه سازی شد. سپس با کمک ضخامت های محاسبه شده هر سه نوع ساختار به روش تبخیر حرارتی روی بسترهای شیشه ای انباشت شدند. زیر لایه های شیشه ای به ابعاد 20×10 میلی متر پس از شست و شو اولیه با آب و صابون و حلال های ایزوپروپانول، استون، اتانول و آب یونیزه شده جهت چربی زدایی که در هر مرحله به مدت ۱۸ دقیقه مورد شست و شو قرار گرفتند و در ادامه در دمای 120°C درجه سانتی گراد در دستگاه آون آزمایشگاهی خشک شدند. برای اندازه گیری ضخامت لایه ها از دستگاه ضخامت سنج بلور کوآرتز استفاده شده است که در هر لحظه می تواند ضخامت لایه و آهنگ انباشت را در حین لایه نشانی بر روی صفحه نمایشگر نشان دهد. فلز Ag و پودرهای ZnS ، MoO_3 ، V_2O_5 ، WO_3 با خلوص ۹۹٫۹۹ درصد در هر بار فرایند لایه نشانی در بوتله های تنگستن و مولیبدن قرار داده شدند و پس از اعمال خلأ توسط پمپ مکانیکی و دیفیوژن تا فشار 10^{-4} Torr، 2×2 میلی بار می رسد. جهت لایه نشانی ساختار $(22) / \text{V}_2\text{O}_5 / \text{Ag}(21,4) / \text{MoO}_3(39,9)$ با اعمال جریان ۱۴ آمپر به بوتله ی مولیبدن حاوی پودر اکسید مولیبدن با نرخ ۰٫۱ نانومتر بر ثانیه و با ضخامت ۳۹٫۹ نانومتر انجام گرفت. و پس از آن بدون شکستن خلأ با اعمال جریان ۳۵ آمپر به بوتله ی تنگستن حاوی فلز نقره با نرخ ۰٫۱ نانومتر بر ثانیه با ضخامت ۲۱٫۴ نانومتر صورت گرفت. سپس تحت همان فشار با اعمال جریان ۲۸ آمپر به بوتله ی تنگستن حاوی پودر وانادیم پنتا اکسید با نرخ لایه نشانی ۰٫۱ نانومتر بر ثانیه انجام شد برای لایه نشانی دو الکتروده $\text{MoO}_3/\text{Ag}/\text{WO}_3$ ، $\text{MoO}_3/\text{Ag}/\text{ZnS}$ ، شرایط و نحوه لایه نشانی همانند مراحل بیان شده است، تنها تفاوت، در ضخامت ها و مقدار جریان اعمال شده به بوتله ها و نوع بوتله است که به ترتیب در جدول ۱ و ۲ آمده است.

در سال های اخیر استفاده زیاد از اکسیدهای رسانای شفاف تک لایه ای و چند لایه ای به خصوص در زمینه صفحات و وسایل فوتولتائیک (OPV) و دیودهای نور گسیل آلی (OLED) منجر به این امر شده است که تلاش های بسیاری برای طراحی و ساخت اکسیدهای رسانای شفاف با کیفیت بالا و هزینه پایین انجام گیرد. اخیراً استفاده وسیع از ITO در وسایل اپتوالکترونیکی به یک مشکل بزرگ تبدیل شده است، از یک سو تقاضای زیاد برای فلز ایندیوم و از سوی دیگر محدود بودن منابع، باعث افزایش قیمت آن در سال های اخیر شده است [۱]. از جهتی دیگر وسایل توسعه یافته و پیشرفته امروزی به الکترودهای جدید با مقاومت سطحی پایین و خصوصیات اپتیکی بالاتری نسبت به الکترودهای نسل حاضر نیاز دارند. اخیراً برای بهبود بخشیدن به خواص الکتریکی و اپتیکی اکسیدهای رسانای شفاف و یا مواد دی الکتریک استفاده می شود. ساختارهای دی الکتریک (اکسید) / فلز / دی الکتریک (اکسید)، خصوصیات اپتیکی بهتری را نسبت به الکترودهای تک لایه ای TCO و یا الکترودهای فلزی فراهم می آورد. به عنوان مثال ساختار $\text{ZnS}/\text{Cu}/\text{Ag}/\text{ZnS}$ به عنوان الکتروده شفاف طراحی و ساخته شده است [۲] یکی از عوامل مؤثر بر روی بازدهی خواص لایه فلزی است، که به عنوان لایه رسانای سطحی می باشد. با تغییر ضخامت لایه فلز میانی در ساختارهای چند لایه ای می توان میزان تراگسیل اپتیکی و مقاومت سطحی را کنترل کرد. خصوصیت مهم دیگر ساختار الکترودهای رسانای چند لایه ای، شفافیت در ناحیه طیفی مورد نظر است. در ساختارهای سه لایه ای مورد بحث با بهینه کردن ضخامت لایه ها، تراگسیل در ناحیه مرئی ($1,7 - eV$) و جذب در ناحیه فرابنفش را می توان بیشینه نمود.

مواد و روش ساخت

انتخاب دی الکتریک: لایه های، به کار رفته در دو طرف لایه ای فلزی نقره به دلیل دارا بودن ضریب شکست بالا، از بازتاب نور فرودی از سطح لایه فلزی کاهند. با استفاده از فیلم سه لایه ای دی الکتریک / فلز / دی الکتریک D/M/D به دلیل نفوذ لایه فلزی به داخل نیمه رسانا، بهبود بخشیدن به خواص بلوری و اپتیکی آن می توان علاوه بر کنترل و رسانش الکتریکی میزان عبور یا

جدول ۱ مشخصات فرآیند انباشت سه لایه MoO₃/Ag/WO₃

ضخامت (nm)	جنس بوته	فشار (میلی بار) (mbar ^{-۱۰})	جریان بوته (آمپر)	ماده	لایه‌ها
۳۹,۳	Mo	۲,۳	۱۲	MoO ₃	۱
۲۱,۷	W	۲,۲	۳۳	Ag	۲
۲۲,۸	W	۲,۲	۶۷	WO ₃	۳

جدول ۲ مشخصات فرآیند انباشت سه لایه MoO₃/Ag/ZnS

ضخامت (nm)	جنس بوته	فشار (میلی بار) (mbar ^{-۱۰})	جریان بوته (آمپر)	ماده	لایه‌ها
۴۲,۴	Mo	۲	۱۳	MoO ₃	۱
۲۰,۷	W	۲,۱	۳۵	Ag	۲
۲۱	W	۲,۱	۷۲	ZnS	۳

نتایج و بحث

در تنظیمات مربوط به ضخامت سنج، ضریب تصحیح نیاز است تا ضخامت مواد به‌طور واقعی لایه نشانی و نمایش داده شوند. برای به دست آوردن ضریب تصحیح فلز Ag و پودرهای MoO₃، ZnS، V₂O₅، WO₃ ابتدا به صورت تک لایه با ضریب تصحیح ۱ در بوته‌های جداگانه بر روی بسترهای شیشه‌ای با ضخامت معلوم لایه نشانی شدند. ضریب تصحیح به صورت حاصل تقسیم مقدار واقعی ضخامت لایه نشانی شده به مقدار واقعی نشان داده شده با ضریب تصحیح ۱ توسط ضخامت سنج دستگاه تعریف می‌شود.

WO₃ ضریب تصحیح به ترتیب ۰,۱، ۰,۵۸، ۰,۳۷، ۰,۲، ۰,۰۲، ۵,۰۲ به دست آمد. به‌منظور بررسی خواص اپتیکی و الکتریکی ساختارها و مقاومت سطحی الکترودهای نانو ساختار شفاف سه لایه، طیف تراگسیل آن‌ها به ترتیب با دستگاه پروب چهار نقطه‌ای و اسپکتوفتومتر دو پرتویی اندازه‌گیری شدند، سپس با اندازه‌گیری تراگسیل اپتیکی در طول موج ۵۵۰ نانومتر، مقاومت سطحی و فاکتور شایستگی (ϕ_m) محاسبه شد که این کمیت به‌صورت زیر تعریف می‌شود [۵].

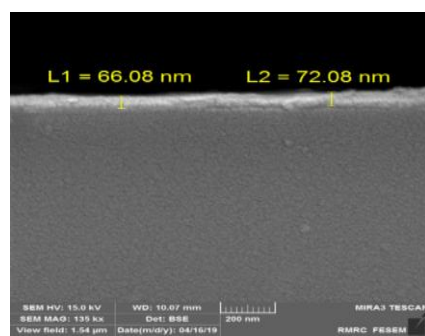
$$\phi_m = \frac{T^{10}}{R_s} \quad (1)$$

که در آن T نشان‌دهنده تراگسیل اپتیکی در طول موج ۵۵۰ و R_s مقاومت سطحی است، این عامل نشان‌دهنده عملکرد خوب ساختارها از لحاظ اپتیکی و الکتریکی است. در جدول ۳ نتایج این محاسبات را نشان می‌دهد که با نتایج سایر پژوهش‌ها از تطابق مناسبی برخوردار است [۶].

جدول ۳ مشخصات الکتریکی و اپتیکی سه الکتروده ساخته‌شده

ساختارها	T _{550nm} %	ϕ_m (Ω/□)	R _s
MoO ₃ /Ag/ V ₂ O ₅	۵۵,۱	۴,۳۸	۰,۰۱۴
MoO ₃ /Ag/ZnS	۶۶,۹	۸,۳۸	۰,۰۲۲
MoO ₃ /Ag/WO ₃	۶۵,۸	۴,۲۶	۰,۰۲

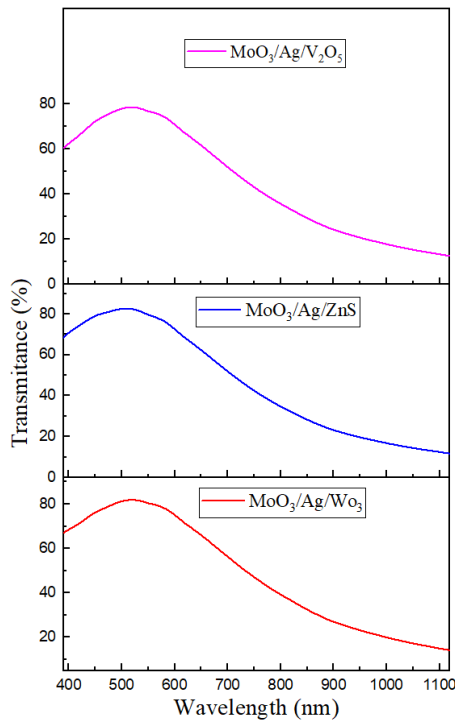
همان‌طور که بیان شد نخست طراحی الکترودهای نامبرده توسط نرم‌افزار Mathcad انجام گرفت و سپس ساختار الکتروده سه لایه‌ای شفاف در آزمایشگاه لایه نشانی در مقیاس آزمایشگاهی به‌صورت تجربی ساخته شد. در شکل ۲ و ۳ به ترتیب طیف تراگسیل اپتیکی به‌صورت تجربی و شبیه‌سازی‌شده



شکل ۱ تصویر FE-SEM گرفته‌شده از وانادیم اکسید

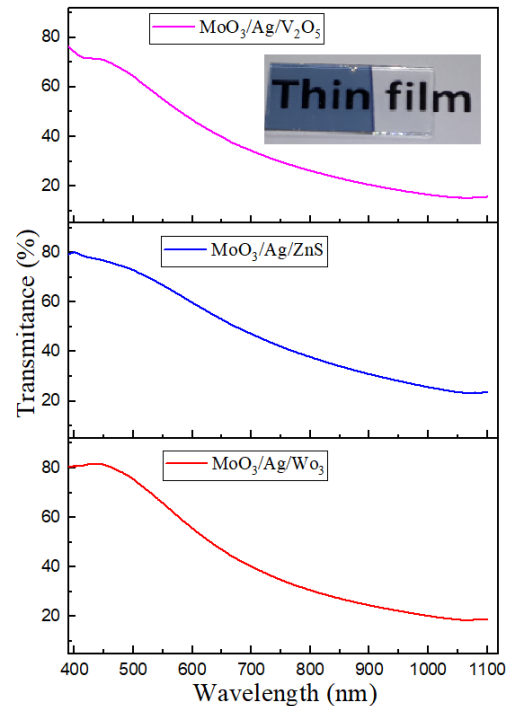
شکل ۱ تصویر FE-SEM وانادیم اکسید است که با ضریب تصحیح ۱ و ضخامت ۲۰,۵ نانومتر لایه نشانی شده است برای به دست آوردن ضریب تصحیح وانادیم اکسید، میانگین L₁, L₂ که ضخامت‌های واقعی مقدار ۷۲,۰۸، ۶۶,۰۸ روی بسترهای شیشه‌ای لایه نشانی شده‌اند را به دست می‌آید و بر ۲۰,۵ تقسیم می‌شود به این ترتیب ضریب تصحیح برای وانادیم اکسید مقدار ۳,۳۷ به دست می‌آید و برای MoO₃، ZnS، Ag،

ضریب شکست حالت بالک مواد در نظر گرفته شده است اما ساخت سه لایه ها در مقیاس نانومتر می باشد. در شکل ۲ تصویری از نمونه های ساخته شده در آزمایشگاه به روش تبخیر حرارتی نمایش داده شده است. شفافیت سه لایه های ساخته شده به خوبی قابل مشاهده است.



شکل ۱ نمودارهای تراگسیل اپتیکی ساختارهای شبیه سازی شده

هر سه الکتروود ساخته شده نشان داده شده است و بیانگر این است که روند تجربی ساخت سه لایه ها با روند شبیه سازی آنها با نرم افزار از همخوانی مناسبی برخوردار است. اختلاف کوچکی که بین نمودار تراگسیل تجربی با شبیه سازی ساختارها وجود دارد به این علت است که در شبیه سازی ساختارها



شکل ۲ نمودار تراگسیل اپتیکی ساختارهای ساخته شده و شفافیت سه لایه ای رسانای ساخته شده در آزمایشگاه

organic solar cells." *Solar Energy Materials and Solar Cells* 101 (2012): 170-175.

2. Hssein, M., et al. "Cu-Ag bi-layer films in dielectric/metal/dielectric transparent electrodes as ITO free electrode in organic photovoltaic devices." *Organic Electronics* 42 (2017): 173-180.

3. Bao, Jie, et al. "INFLUENCE OF THE BOTTOM WO₃ LAYER ON THE SERIES RESISTANCE IN SILICON BASED SOLAR CELLS WITH WO₃/AG/WO₃ EMITTER."

4. Sun, Xilian, et al. "Thickness dependence of structure and optical properties of silver films deposited by magnetron sputtering." *Thin Solid Films* 515.17 (2007): 6962-6966.

5. Haacke, G. "New figure of merit for transparent conductors." *Journal of Applied Physics* 47.9 (1976): 4086-4.

6. Bae, Hyeong Woo, et al. "Thermally Evaporated Organic/Ag/Organic Multilayer Transparent Conducting Electrode for Flexible Organic Light-Emitting Diodes." *Advanced Electronic Materials* (2019).

نتیجه گیری

با توجه به کارهای تجربی انجام شده اندازه گیری های صورت گرفته روی نمونه های ساخته شده می توان بیان کرد که، شبیه سازی، طراحی و ساخت الکتروودهای رسانای شفاف سه لایه های $MoO_3/Ag/WO_3$ ، $MoO_3/Ag/V_2O_5$ ، $MoO_3/Ag/ZnS$ ، با داشتن سه ویژگی همزمان، تراگسیل اپتیکی بالا در ناحیه مرئی و بازتاب مناسب در نواحی دیگر، شفافیت مناسب و رسانندگی بالا از نظر الکتریکی و اپتیکی جهت استفاده در قطعات اپتوالکترونیک نظیر دیودهای نور گسیل آلی و سلول های خورشیدی نسل سوم ساختاری مناسب به شمار می روند. همچنین جایگزین مناسب برای الکتروودهای طلا در سلول های خورشیدی پروسکایتی می باشد.

مرجع ها

1. Lim, Sooyeon, et al. "Cu-based multilayer transparent electrodes: a low-cost alternative to ITO electrodes in