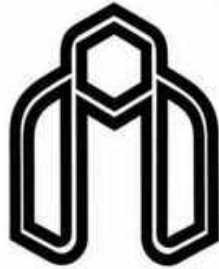


بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ



دانشگاه صنعتی شاهرود

دانشکده فیزیک

گروه حالت جامد (ماده چگال)

اثر آرایش عناصر واسطه روی خواص نانولایه های نیمرسانا با
گاف نواری بزرگ

دانشجو

محمد یونسی

اساتید راهنما

محمد ابراهیم قاضی

مرتضی ایزدی فرد

استاد مشاور

فرهاد اسماعیلی قدسی

رسالة دکتری جهت اخذ درجه دکتری

بهمن ۱۳۸۸

دانشگاه صنعتی شاهرود

دانشکده: فیزیک

گروه: فیزیک

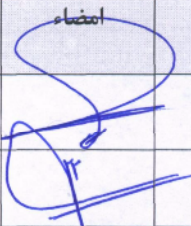
رساله دکتری آقای محمدیونسی

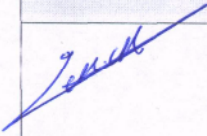
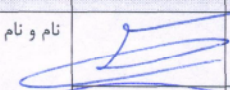
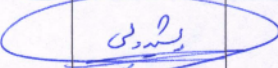

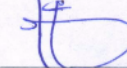
تحت عنوان:

اثر آلاینش عناصر واسطه روی خواص نانو لایه های نیمرسانای نانو با گاف نواری بزرگ

در تاریخ ۸۸/۱۱/۱۷ توسط کمیته تخصصی زیر جهت اخذ مدرک رساله دکتری مورد ارزیابی و با

درجه عالی مورد پذیرش قرار گرفت.

امضاء	اساتید مشاور:	امضاء	اساتید راهنما:
	نام و نام خانوادگی: فرهاد اسماعیل قدسی		نام و نام خانوادگی: محمدابراهیم قاضی
	نام و نام خانوادگی:		نام و نام خانوادگی: مرتضی ایزدی فرد

امضاء	نماینده تحصیلات تکمیلی	امضاء	اساتید داور:
	نام و نام خانوادگی: مهدی مؤمنی		نام و نام خانوادگی: حسین عشقی
			نام و نام خانوادگی: رشید ولی
			نام و نام خانوادگی: حمید هراتی زاده
			نام و نام خانوادگی: هادی عربشاهی

تقدیم به:

کسانی که صادقانه برای آبادی و اعتلای ایران در جهان تلاش می کنند:
اعم از شخصیت‌های علمی، فرهنگی، هنری، اجتماعی، اقتصادی و سیاسی.

تشکر و قدردانی:

مثبت اندیشی گوهری است که نصیب هر فرهیخته ای نمی شود.

با حمد و سپاس پروردگار یکتا، ستوده ای که به ستایش نیاز ندارد و منشأ و مأوای تمام موجودات است. دوره دکتری اینجانب، مشکلات و ناهمواریهای فراوانی همراه بوده است که اگر کمک و یاری اساتید محترم و دوستان عزیز نمی بود، طی این دوره با موفقیت محقق نمی شد. از اینرو بر خود واجب می دانم که از این عزیزان تشکر و قدردانی نمایم. یاد و خاطره این عزیزان همواره در زندگیم خواهد ماند.

در ابتدا لازم است که از زحمات اساتید راهنمای محترم آقایان دکتر محمد ابراهیم قاضی و دکتر مرتضی ایزدی فرد تشکر و قدردانی نمایم. اگر حمایت‌های علمی این عزیزان نمی بود، کار انجام این رساله میسر نمی گردید.

همچنین از جناب آقای دکتر فرهاد اسماعیلی قدسی عضو هیأت علمی محترم دانشگاه گیلان که زحمت مشاوره این رساله را عهده دار بودند کمال تشکر را دارم. لازم به ذکر است که همه نمونه های مطالعه شده در این رساله در آزمایشگاه سل-ژل دانشگاه گیلان رشد داده شده اند.

از دکتر بهرام بهرامیان، عضو هیئت علمی محترم دانشکده شیمی دانشگاه صنعتی شاهرود بخاطر راهنمایی های ارزنده در تهیه مواد و محلولهای مورد نیاز برای رشد نمونه ها کمال تشکر را دارم. از ریاست محترم دانشکده فیزیک و کارکنان محترم آن بخاطر زحماتی که در طول دوره تحصیل اینجانب متحمل شده اند تشکر می نمایم.

از هیئت محترم داوران، آقایان دکتر حسین عشقی، دکتر حمید هراتی زاده، دکتر رشید ولی و دکتر هادی عربشاهی که با داشتن مشغله فراوان، زحمت مطالعه نقد و داوری این رساله را قبول فرمودند، نهایت تشکر و قدردانی به عمل می آید.

لازم می دانم که از آقایان دکتر حمید رضا علائی، دکتر اسماعیل عبدلی و دکتر یعقوبی بخاطر نظرات و مساعدتهای علمی، همچنین از مسئول آزمایشگاه رشد بلور دانشگاه صنعتی شاهرود جناب آقای رضا مسکنی بخاطر ثبت سفارش و تهیه مواد مورد نیاز و از جناب آقای آرش پاکدل بخاطر همکاری در رشد و تهیه نمونه ها کمال قدردانی و تشکر را دارم. در نهایت، به تمام عزیزان دیگر که اسامی آنها را ذکر نکرده ام درود می فرستم.

در پایان لازم است از حمایت‌های بی دریغ خانواده عزیزم در طول مدت تحصیل نهایت سپاسگزاری را بنمایم.

دانشجو تأیید می نماید که مطالب مندرج در این پایان نامه (رساله) نتیجه تحقیقات خودش می باشد و در صورت استفاده از نتایج دیگران مرجع آن را ذکر نموده است.

کلیه حقوق مادی مترتب از نتایج مطالعات، آزمایشات و نوآوری ناشی از تحقیق موضوع این رساله متعلق به دانشگاه صنعتی شاهرود می باشد.

محمد یونسی
بهمن ۱۳۸۸ خورشیدی

چکیده:

امروزه مواد نیمرسانای مغناطیسی رقیق بعلت قابلیت کاربرد گسترده آنها در صنعت اسپینترونیك مورد توجه محققین قرار گرفته است و مطالعات تجربی و تئوری زیادی روی این مواد در حال انجام می باشد. در اسپینترونیك علاوه بر خواص بار الکتریکی از خاصیت اسپینی حاملها نیز استفاده می گردد. به دلیل توجه به این ویژگیها، آرایش گروهی از مواد نیمرساناها نظیر ترکیبات گروه III-IV و II-VI با اتمهای مغناطیسی مورد توجه قرار گرفته است. به منظور کاربردی شدن این مواد در صنایع اسپینترونیك تلاش می شود که با انتخاب ماده میزبان مناسب و آرایش آن با عناصر واسطه، دمای کوری این ترکیبات به دمای اتاق یا بالاتر افزایش یابد. در این رساله نیمرسانای اکسید روی که دارای گاف نواری پهن است بعنوان ماده میزبان به روش سل-ژل رشد و با عناصر واسطه نظیر آهن، کبالت، منگنز و نیکل آرایش داده شد. با استفاده از این روش لایه های نازک اکسید روی و آرایش یافته تا حدود پنج درصد با عناصر واسطه و ضخامتهای در حدود ۱۰۰ تا ۳۰۰ نانومتر تهیه گردیده اند. سپس اثر پارامترهای مختلف فیزیکی از قبیل میزان آرایش، ضخامت لایه، عملیات حرارتی و نوع حلال روی خواص ساختاری، اپتیکی و مغناطیسی این لایه ها مورد بررسی قرار گرفت. طیفهای XRD ثبت شده برای نمونه ها نشان داد که لایه های رشد داده شده همگی دارای ساختار هگزاگونال هستند. مورفولوژی سطوح لایه ها توسط دستگاه AFM مورد ارزیابی قرار گرفت. این اندازه گیری های نشان داد که این سطوح نسبتاً هموار می باشند. طیفهای تراگیسل ثبت شده برای نمونه های رشد داده شده نشان داد که شفافیت نمونه ها در ناحیه مرئی حدود ۸۰ تا ۹۰ درصد است. ضرایب شکست، خاموشی و عمق نفوذ نور در لایه ها با استفاده از روش کمینه کردن غیر مقید نقاط و برازش آن با روابط کوشی محاسبه شدند. خواص مغناطیسی نمونه ها نیز از طریق اندازه گیریهای MFM و ثبت حلقه پسماند آنها در دمای اتاق مورد مطالعه قرار گرفت. نتایج حاصل از این اندازه گیریها نشان داد که نمونه آرایش یافته با منگنز دارای خاصیت پارامغناطیسی و بقیه نمونه ها دارای خاصیت فرومغناطیسی هستند. همچنین تحرک پذیری حاملها در نیمرساناهای مغناطیسی رقیق در فاز پارامغناطیس با استفاده از مدل هایزنبرگ مورد بررسی نظری قرار گرفت.

کلمات کلیدی: سل-ژل، اکسید روی، عناصر واسطه، اسپینترونیك، نیمرسانای مغناطیسی رقیق.

لیست مقالات

مقالات چاپ و ارسال شده در کنفرانسها و مجلات علمی

- (۱)
The optical and structural properties of ZnO:Mn nano films grown by sol-gel
چاپ شده در:
Journal Of Optoelectronics And Advanced Materials
Vol. 10, No. 10, October 2008, p. 2603 - 2606
- (۲)
Electron mobility arising from exchange scattering potential in diluted magnetic
semiconductors
چاپ شده در:
Journal Of Optoelectronics And Advanced Materials - Symposia
Vol. 1, No. 3, 2009, p. 443 - 446
- (۳)
Structural and optical properties of $Zn_{0.98}Mn_{0.02}O$ thin films synthesized by sol-gel route
and different kind of solvents
ارسال شده به:
The European Physical Journal - Applied Physics
- (۴)
Influence of Co and Fe dopants on optical and structural properties of zinc oxide thin
films
ارسال شده به:
Journal of Alloys and Compounds
- (۵)
تاثیر عملیات حرارتی بر خواص ساختار و اپتیکی نانو فیلم $Zn_{0.95}Mn_{0.05}O$ تهیه شده به روش سل-ژل
ارائه در کنفرانس:
شانزدهمین همایش انجمن بلور شناسی و کانی شناسی ایران (گیلان-۸۷)
- (۶)
تاثیر ضخامت و عملیات حرارتی بر روی ویژگیهای نوری نیمرسانای مغناطیسی ZnO:Mn
ارائه در کنفرانس:
پانزدهمین کنفرانس اپتیک و فوتونیک ایران (اصفهان-۸۷)
- (۷)
مطالعه خواص ساختاری و اپتیکی لایه های نازک اکسید روی آلائیده با کبالت
ارائه در کنفرانس:
شانزدهمین کنفرانس انجمن اپتیک و فوتونیک ایران (یزد-۸۸)

فصل اول: نیمرسانا

۲مقدمه (۱-۱)
۲چگالی حالات (۲-۱)
۳ساختار نواری (۳-۱)
۴مقاومت الکتریکی (۴-۱)
۵تراکم حاملها (۵-۱)
۶ساختار بلوری (۶-۱)
۷نیمرساناهای ترکیبی (۷-۱)
۸نیمرسانای غیر ذاتی (۸-۱)
۹ویژگیهای نیمرسانا (۹-۱)
۹حفره (۱-۹-۱)
۹خواص الکتریکی (۲-۹-۱)
۱۰خواص اپتیکی (۳-۹-۱)
۱۰گاف نواری مستقیم (۱-۳-۹-۱)
۱۲گاف نواری غیر مستقیم (۲-۳-۹-۱)
۱۳رشد بلور (۱۰-۱)
۱۴روش سل-ژل (۱۱-۱)
۱۴فرآیند سل-ژل (۱-۱۱-۱)
۱۵پارامترهای شیمیایی (۲-۱۱-۱)
۱۵تهیه سل (۱-۲-۱۱-۱)
۱۶ژلاسیون (۲-۲-۱۱-۱)
۱۷ماندگی سل (۳-۲-۱۱-۱)
۱۸واکنش چگالش (۴-۲-۱۱-۱)
۱۸اثر PH (۵-۲-۱۱-۱)
۱۹پارامترهای فیزیکی (۳-۱۱-۱)
۱۹انباشت (۱-۳-۱۱-۱)
۲۲خشک سازی (۲-۳-۱۱-۱)
۲۲بازپخت (۳-۳-۱۱-۱)
۲۳مزایا و کاربردهای روش سل-ژل (۴-۱۱-۱)

فصل دوم: اسپینترونیک

۲۷مقدمه..... (۱-۲)
۲۸مقاومت مغناطیسی..... (۲-۲)
۳۰مقاومت مغناطیسی قوی..... (۳-۲)
۳۴مقاومت مغناطیسی تونلی (TMR)..... (۴-۲)
۳۶نیمرساناهای مغناطیسی رقیق..... (۵-۲)
۳۸حلالیت..... (۱-۵-۲)
۳۹ثابت شبکه..... (۲-۵-۲)
۴۰تراز اتم TM در گاف نواری ماده میزبان..... (۳-۵-۲)
۴۱ناخالصی TM هم الکترون با ماده میزبان..... (۴-۵-۲)
۴۲مقاومت الکتریکی در DMS..... (۵-۵-۲)
۴۳وابستگی گاف انرژی به ترکیبات..... (۶-۵-۲)

فصل سوم: ویژگیهای فیزیکی اکسید روی خالص و آرایش یافته با عناصر واسطه

۴۷مقدمه..... (۱-۳)
۴۷اکسید روی خالص..... (۲-۳)
۴۷ویژگیهای کلی..... (۱-۲-۳)
۵۲بررسی خواص ساختاری..... (۲-۲-۳)
۵۳بررسی خواص نوری..... (۳-۲-۳)
۵۵محاسبه ضرایب اپتیکی..... (۴-۲-۳)
۵۶بررسی خواص مغناطیسی..... (۵-۲-۳)
۵۸آرایش اکسید روی با منگنز..... (۳-۳)
۵۸بررسی خواص ساختاری..... (۱-۳-۳)
۶۰بررسی خواص نوری..... (۲-۳-۳)
۶۱بررسی خواص مغناطیسی..... (۳-۳-۳)
۶۳آرایش اکسید روی با کبالت..... (۴-۳)
۶۳بررسی خواص ساختاری..... (۱-۴-۳)
۶۴بررسی خواص نوری..... (۲-۴-۳)
۶۵بررسی خواص مغناطیسی..... (۳-۴-۳)
۶۶آرایش اکسید روی با آهن..... (۵-۳)
۶۶بررسی خواص ساختاری..... (۱-۵-۳)
۶۸بررسی خواص نوری..... (۲-۵-۳)

۶۹ بررسی خواص مغناطیسی..... (۳-۵-۳)
۷۱ آرایش اکسید روی با نیکل..... (۶-۳)
۷۱ بررسی خواص ساختاری..... (۱-۶-۳)
۷۲ بررسی خواص نور..... (۲-۶-۳)
۷۳ بررسی خواص مغناطیس..... (۳-۶-۳)

فصل چهارم: بررسی شرایط محیطی بر روی خواص فیزیکی ZnO:Mn

۷۵ مقدمه..... (۱-۴)
۷۵ اثر ضخامت بر روی خواص فیزیکی ZnO:Mn..... (۲-۴)
۷۶ آنالیز نمونه اول با ضخامت سه لایه..... (۱-۲-۴)
۷۶ طیف تراگیل..... (۱-۱-۲-۴)
۷۷ انرژی گاف نواری..... (۲-۱-۲-۴)
۷۸ تعیین ثابتهای نوری..... (۳-۱-۲-۴)
۷۹ آنالیز نمونه دوم با ضخامت پنج لایه..... (۲-۲-۴)
۷۹ طیف تراگیل..... (۱-۲-۲-۴)
۷۹ انرژی گاف نواری..... (۲-۲-۲-۴)
۸۰ تعیین ثابتهای نوری..... (۳-۲-۲-۴)
۸۱ بحث و نتایج..... (۳-۲-۴)
۸۱ طیف تراگیل در دمای 200°C (۱-۳-۲-۴)
۸۲ طیف تراگیل در دمای 500°C (۲-۳-۲-۴)
۸۳ محاسبه گاف نواری..... (۳-۳-۲-۴)
۸۴ تعیین ثابتهای نوری..... (۴-۳-۲-۴)
۸۶ نتیجه گیری..... (۵-۳-۲-۴)
۸۶ اثر عملیات حرارتی بر روی خواص فیزیکی ZnO:Mn..... (۳-۴)
۸۷ اثر دمای باز پخت 300°C (۱-۳-۴)
۸۷ طیف XRD..... (۱-۱-۳-۴)
۸۷ طیف تراگیل..... (۲-۱-۳-۴)
۸۹ تعیین ثابت های اپتیکی..... (۳-۱-۳-۴)
۹۰ اثر دمای باز پخت 400°C (۲-۳-۴)
۹۰ طیف XRD..... (۱-۲-۳-۴)
۹۰ طیف تراگیل..... (۲-۲-۳-۴)
۹۱ تعیین ثابت های اپتیکی..... (۳-۲-۳-۴)

۹۲ اثر دمای باز پخت 450°C (۳-۳-۴)
۹۲ طیف XRD (۱-۳-۳-۴)
۹۳ طیف تراگسیل (۲-۳-۳-۴)
۹۴ تعیین ثابت های اپتیکی (۳-۳-۳-۴)
۹۵ اثر دمای باز پخت 500°C (۴-۳-۴)
۹۵ طیف XRD (۱-۴-۳-۴)
۹۶ طیف تراگسیل (۲-۴-۳-۴)
۹۷ تعیین ثابت های اپتیکی (۳-۴-۳-۴)
۹۸ بحث و نتیجه گیری (۵-۳-۴)
۹۸ طیف XRD (۱-۵-۳-۴)
۹۹ طیف تراگسیل (۲-۵-۳-۴)
۱۰۰ انرژی گاف نواری (۳-۵-۳-۴)
۱۰۱ تعیین ثابت های اپتیکی (۴-۵-۳-۴)
۱۰۲ نتیجه گیری (۶-۳-۴)
۱۰۳ اثر حلال بر روی خواص فیزیکی ZnO:Mn (۴-۴)
۱۰۴ حلال نوع اول (۱-۴-۴)
۱۰۴ طیف XRD (۱-۱-۴-۴)
۱۰۵ مورفولوژی سطح (۲-۱-۴-۴)
۱۰۶ طیف تراگسیل (۳-۱-۴-۴)
۱۰۷ محاسبه گاف انرژی (۴-۱-۴-۴)
۱۰۸ ثابتهای اپتیکی (۵-۱-۴-۴)
۱۰۹ عمق نفوذ (۶-۱-۴-۴)
۱۰۹ حلال نوع دوم (۲-۴-۴)
۱۰۹ طیف XRD (۱-۲-۴-۴)
۱۱۰ مورفولوژی سطح (۲-۲-۴-۴)
۱۱۱ طیف تراگسیل (۳-۲-۴-۴)
۱۱۱ گاف نواری (۴-۲-۴-۴)
۱۱۲ ثابتهای اپتیکی (۵-۲-۴-۴)
۱۱۳ عمق نفوذ (۶-۲-۴-۴)
۱۱۴ حلال نوع سوم (۳-۴-۴)
۱۱۴ طیف XRD (۱-۳-۴-۴)
۱۱۵ مورفولوژی سطح (۲-۳-۴-۴)
۱۱۵ طیف تراگسیل (۳-۳-۴-۴)

۱۱۶.....	انرژی گاف (۴-۳-۴-۴)
۱۱۷.....	ثابت‌های اپتیکی (۵-۳-۴-۴)
۱۱۸.....	عمق نفوذ (۶-۳-۴-۴)
۱۱۹.....	حلال نوع چهارم (۴-۴-۴)
۱۱۹.....	طیف XRD (۱-۴-۴-۴)
۱۱۹.....	مورفولوژی سطح (۲-۴-۴-۴)
۱۲۰.....	طیف تراگیل (۳-۴-۴-۴)
۱۲۱.....	گاف انرژی (۴-۴-۴-۴)
۱۲۲.....	ثابت‌های اپتیکی (۵-۴-۴-۴)
۱۲۳.....	عمق نفوذ (۶-۴-۴-۴)
۱۲۴.....	نتایج و بحث (۵-۴-۴)
۱۲۴.....	PH و ویسکوزیته (۱-۵-۴-۴)
۱۲۴.....	طیف XRD (۲-۵-۴-۴)
۱۲۶.....	مورفولوژی سطح (۳-۵-۴-۴)
۱۲۷.....	طیف تراگیل (۴-۵-۴-۴)
۱۳۰.....	گاف انرژی (۵-۵-۴-۴)
۱۳۰.....	ثابت‌های نوری (۶-۵-۴-۴)
۱۳۲.....	عمق نفوذ (۷-۵-۴-۴)
۱۳۳.....	مطالعه نمونه‌ها با استفاده از میکروسکوپ نیروی مغناطیسی MFM (۶-۴-۴)
۱۴۰.....	نتیجه‌گیری (۷-۴-۴)

فصل پنجم: اثر آلاینده‌های عناصر واسطه بر روی خواص فیزیکی اکسید روی

۱۴۲.....	مقدمه (۱-۵)
۱۴۳.....	ویژگی‌های اکسید روی خالص (۲-۵)
۱۴۳.....	ساختارسنجی (۱-۲-۵)
۱۴۳.....	مورفولوژی سطح (۱-۱-۲-۵)
۱۴۴.....	طیف XRD (۲-۱-۲-۵)
۱۴۵.....	خواص نوری (۲-۲-۵)
۱۴۵.....	طیف تراگیل (۱-۲-۲-۵)
۱۴۶.....	گاف نواری (۲-۲-۲-۵)
۱۴۷.....	ثوابت نوری (۳-۲-۲-۵)
۱۴۸.....	عمق نفوذ (۴-۲-۲-۵)

۱۴۸.....	اکسید روی آلاییده با منگنز..... (۳-۵)
۱۴۸.....	ساختار سنجی..... (۱-۳-۵)
۱۴۸.....	مورفولوژی سطح..... (۱-۱-۳-۵)
۱۴۹.....	طیف XRD..... (۲-۱-۳-۵)
۱۵۰.....	خواص نوری..... (۲-۳-۵)
۱۵۰.....	طیف تراگیل..... (۱-۲-۳-۵)
۱۵۱.....	گاف نواری..... (۲-۲-۳-۵)
۱۵۲.....	ثوابت نوری..... (۳-۲-۳-۵)
۱۵۳.....	عمق نفوذ..... (۴-۲-۳-۵)
۱۵۳.....	اکسید روی آلاییده با آهن..... (۴-۵)
۱۵۳.....	ساختار سنجی..... (۱-۴-۵)
۱۵۳.....	مورفولوژی سطح..... (۱-۱-۴-۵)
۱۵۴.....	طیف XRD..... (۲-۱-۴-۵)
۱۵۵.....	خواص نوری..... (۲-۴-۵)
۱۵۵.....	طیف تراگیل..... (۱-۲-۴-۵)
۱۵۶.....	گاف نواری..... (۲-۲-۴-۵)
۱۵۷.....	ثوابت نوری..... (۳-۲-۴-۵)
۱۵۸.....	عمق نفوذ..... (۴-۲-۴-۵)
۱۵۸.....	اکسید روی آلاییده با کبالت..... (۵-۵)
۱۵۸.....	خواص ساختاری..... (۱-۵-۵)
۱۵۸.....	مورفولوژی سطح..... (۱-۱-۵-۵)
۱۵۹.....	طیف XRD..... (۲-۱-۵-۵)
۱۶۰.....	خواص نوری..... (۲-۵-۵)
۱۶۰.....	طیف تراگیل..... (۱-۲-۵-۵)
۱۶۱.....	گاف نواری..... (۲-۲-۵-۵)
۱۶۲.....	ثوابت نوری..... (۳-۲-۵-۵)
۱۶۳.....	عمق نفوذ..... (۴-۲-۵-۵)
۱۶۴.....	اکسید روی آلاییده با نیکل..... (۶-۵)
۱۶۴.....	ساختار سنجی..... (۱-۶-۵)
۱۶۴.....	مورفولوژی سطح..... (۱-۱-۶-۵)
۱۶۴.....	طیف XRD..... (۲-۱-۶-۵)
۱۶۵.....	خواص نوری..... (۲-۶-۵)
۱۶۵.....	طیف تراگیل..... (۱-۲-۶-۵)

۱۶۶گاف نواری (۲-۲-۶-۵)
۱۶۷ثوابت نوری (۳-۲-۶-۵)
۱۶۸عمق نفوذ (۴-۲-۶-۵)
۱۶۸(۷-۵) بحث و نتیجه گیری
۱۶۸(۱-۷-۵) ساختار سنجی
۱۶۸(۱-۱-۷-۵) مورفولوژی سطح
۱۷۰(۲-۱-۷-۵) طیف XRD
۱۷۲(۲-۷-۵) خواص نوری
۱۷۲(۱-۲-۷-۵) طیف تراگیسل
۱۷۳گاف نواری (۲-۲-۷-۵)
۱۷۴ثوابت اپتیکی (۳-۲-۷-۵)
۱۷۶عمق نفوذ (۴-۲-۷-۵)
۱۷۷(۸-۵) مطالعه خواص مغناطیسی نمونه ها
۱۷۷(۱-۸-۵) تاریخچه
۱۷۸(۲-۸-۵) منحنی پسماند اکسید روی خالص
۱۷۹(۳-۸-۵) منحنی پسماند اکسید روی با آرایش آهن
۱۷۹(۴-۸-۵) منحنی پسماند اکسید روی با آرایش کبالت
۱۸۰(۵-۸-۵) حلقه پسماند اکسید روی با آرایش نیکل
۱۸۱(۶-۸-۵) خواص مغناطیسی اکسید روی با آرایش منگنز
۱۸۱(۷-۸-۵) جمع بندی نتایج

فصل ششم: محاسبه تحرک الکترون در DMS

۱۸۷(۱-۶) مقدمه
۱۸۹(۲-۶) پتانسیل پراکندگی تبادلی
۱۹۰(۲-۱-۶) برهمکنش دوقطبی - دوقطبی
۱۹۴(۲-۲-۶) برهمکنش مدل هایزنبرگ
۱۹۶(۳-۶) نتیجه گیری
۱۹۷پیوستها
۲۰۰مراجع

فهرست شکلها

- شکل (۱-۱): نمایش چگالی حالات برای الف) فلزات، پ) نیمه فلزات، ب) نیمرساناها و ت) عایقها. ۳
- شکل (۲-۱): حالت‌های اشغال شده و ساختار نواری الف) عایق یا نیمرسانا ب) فلز یا نیمه فلز و ج) فلزات. ۳
- شکل (۳-۱): نمایش مقاومت و رسانندگی الکتریکی مواد. ۴
- شکل (۴-۱): وابستگی مقاومت الکتریکی به دما. الف) برای فلز، ب) برای نیمرسانا. ۴
- شکل (۵-۱): تراکم حاملها برای مواد. ۵
- شکل (۶-۱): ساختار fcc با پایه دو اتمی. الف) ساختار زینک بلند، ب) ساختار الماسی. ۶
- شکل (۷-۱): ساختار ششگوش با اندیسهای میلر. ۷
- شکل (۸-۱): نیمرسانای آلئیده: الف) نوع n، ب) نوع p. ۹
- شکل (۹-۱): نمودار جذب اپتیکی در یک نیمرسانائی با گاف نواری مستقیم در دمای صفر درجه کلوین. ۱۱
- شکل (۱۰-۱): جذب فوتونی برای یک نیمرسانا دارای گاف نواری مستقیم. ۱۱
- شکل (۱۱-۱): نمودار جذب اپتیکی در یک نیمرسانای گاف نواری غیر مستقیم در دمای صفر درجه کلوین. ۱۲
- شکل (۱۲-۱): نمودار پاشندگی انرژی برای گاف نواری غیر مستقیم. ۱۳
- شکل (۱۳-۱): الف) ژل کلئیدی، ب) ژل پلیمری. ۱۶
- شکل (۱۴-۱): واکنش هیدرولیز و چگالش. ۱۷
- شکل (۱۵-۱): سیستم انباشت غوطه وری آزمایشگاه سل - ژل دانشگاه گیلان. ۲۰
- شکل (۱۶-۱): مراحل مختلف انباشت با تکنیک غوطه وری. ۲۰
- شکل (۱۷-۱): تصویر روش غوطه وری زاویه ای آزمایشگاه سل - ژل دانشگاه گیلان. ۲۱
- شکل (۱-۲): طرح شماتیک یک نمونه GMR. ۳۰
- شکل (۲-۲): طرح شماتیک GMR برای CIP و CPP. ۳۱
- شکل (۳-۲): منشأ GMR بر اساس مدل دوسیالی. الف) اگر مغناطش دو لایه در یک جهت باشد، طبق قضیه دوم مات اسپین های موافق (مخالف) مغناطش پراکنده نمی شوند (می شوند). در نتیجه مقاومت کم (زیاد) است. ب) اگر مغناطش دو لایه مختلف جهت باشد، طبق قضیه دوم مات اسپینهای بالا

- و پائین پراکنده شده و در نتیجه مقاومت فلز زیاد است.
- شکل (۲-۴): وابستگی GMR به میدان مغناطیسی و ماده مغناطیسی. الف) تغییر مقاومت الکتریکی برای ساختار مغناطیسی چند لایه برحسب تابعی از میدان اعمالی. $GMR = (R_{AP} - R_P) / R_P$ به حدود ۲۰٪ نیز می رسد که خیلی از اثر MR بیشتر است. ج) آرایش مغناطش لایه ها برحسب میدان خارجی. ب) منحنی پسماند ماده مغناطیسی. H_S میدان اشباع است.
- شکل (۲-۵): وابستگی GMR به ضخامت لایه غیر مغناطیسی.
- شکل (۲-۶): وابستگی GMR به دما.
- شکل (۲-۷): روش عملکرد یک CPP-TMR.
- شکل (۲-۸): آرایش اتمی برای آلیاژ سه گانه. الف) نیمرسانای فرومغناطیسی (آرایش بالا). ب) نیمرسانای غیر مغناطیسی. ج) برای DMS.
- شکل (۲-۹): تغییر پارامتر شبکه بر اساس قانون وگارد.
- شکل (۲-۱۰): مکانهای تراز انرژی تقریبی حاصل از لایه d اتم TM نسبت به لبه باند ظرفیت و رسانش الف) گروه II-V و ب) گروه III-V.
- شکل (۲-۱۱): وابستگی دمائی مقاومت ویژه ترکیب $p\text{-Zn}_{1-x}\text{Cr}_x\text{Te}$.
- شکل (۲-۱۲): تغییرات گاف انرژی DMS سه تائی.
- شکل (۲-۱۳): نمایش اثر خمش در DMS گروه II-VI.
- شکل (۲-۱۴): گاف انرژی در DMS گروه چهارگانه. علامت دایره سفید برای $x=0$ ، علامت دایره سیاه برای $x=3y$ ، علامت مربع سفید برای $y=3x$ ، علامت مربع سیاه برای $y=0$ و علامت مثلث برای $x=y$ می باشد.
- شکل (۳-۱): ساختار سلول واحد اکسید روی. اتمهای اکسیژن (روی) به صورت کره های بزرگ (کوچک) سفید (سیاه) مشخص شده اند.
- شکل (۳-۲): فازهای مختلف اکسید روی. الف) ساختار زینک بلند ب) ساختار سنگ نمک. اتمهای اکسیژن (روی) بصورت کره های بزرگ (کوچک) و سفیدند (سیاه اند).
- شکل (۳-۳): ساختار نواری اکسید روی محاسبه شده به روش LDA.
- شکل (۳-۴): نمایش اثر میدان بلور و اسپین بر روی نوارهای انرژی اکسید روی.
- شکل (۳-۵): طیف XRD فیلم نازک اکسید روی در دمای بازپخت 600°C .

- شکل (۳-۶): طیف XRD چهار فیلم نازک اکسید بازپخت شده با غلظتهای مختلف. ۵۳
- شکل (۳-۷): اثر دمای بازپخت بر ساختار نوری اکسید روی. ۵۳
- شکل (۳-۸): محاسبه انرژی گاف نمونه های اکسید روی. شکل داخلی تغییرات انرژی را بر حسب دمای بازپخت نشان می دهد. ۵۴
- شکل (۳-۹): طیف جذبی چهار فیلم نازک اکسید روی. شکل داخلی نمایش انرژی گاف بر حسب غلظت محلول است. ۵۵
- شکل (۳-۱۰): نتایج محاسبه ضرایب شکست نمونه های اکسید روی بازپخت شده در دماهای مختلف. ۵۶
- شکل (۳-۱۱): نتایج محاسبه ضرایب خاموشی نمونه های اکسید روی بازپخت شده در دماهای مختلف. ۵۶
- شکل (۳-۱۲): حلقه پسماند نمونه ها در دمای اتاق. شکل داخلی مربوط به وابستگی مغناطش نمونه ها به دما است. ۵۷
- شکل (۳-۱۳): حلقه پسماند اکسید روی خالص برای دماهای مختلف. شکل داخلی، وابستگی مغناطش به دما را در حضور (100 Oe) و عدم حضور میدان مغناطیسی نشان می دهد. ۵۸
- شکل (۳-۱۴): طیف XRD مربوط به $Zn_{1-x}Mn_xO$ در حالت پودری. ۵۹
- شکل (۳-۱۵): طیف XRD مربوط به $Zn_{1-x}Mn_xO$ بصورت لایه نازک بر حسب درصد آلیش. ۵۹
- شکل (۳-۱۶): طیف جذبی اکسید روی آلائیده با درصدهای مختلف منگنز. ۶۰
- شکل (۳-۱۷): انرژی گاف نمونه ها بر حسب درصد آلیش. ۶۰
- شکل (۳-۱۸): طیف جذبی اکسید روی آلائیده با درصدهای مختلف منگنز. ۶۱
- شکل (۳-۱۹): منحنی مغناطش بر حسب دما برای نمونه $Zn_{0.93}Mn_{0.07}O$. منحنی داخلی حلقه پسماند در دماهای ۵۰، ۱۵۰ و ۲۵۰ درجه کلون برای این نمونه است. ۶۲
- شکل (۳-۲۰): حلقه پسماند نمونه در دمای ۲۵ درجه کلون. ۶۲
- شکل (۳-۲۱): مغناطش نمونه $Zn_{0.8}Mn_{0.2}O$ در حضور و عدم حضور میدان مغناطیسی. ۶۳
- شکل (۳-۲۲): طیف XRD کبالت با آلیشهای مختلف. علامت * قله مربوط به فاز ثانویه $ZnCO_2O_4$ است. ۶۴

- شکل (۳-۲۳): طیف جذبی در دمای اتاق برای نمونه ها. ۶۴
- شکل (۳-۲۴): طیف تراگیسیل نمونه ها در دمای اتاق برای نمونه ها. ۶۵
- شکل (۳-۲۵): منحنی مغناطش نمونه های پودری $Zn_{1-x}CO_xO$ برحسب میدان مغناطیسی اعمالی. ۶۵
- شکل (۳-۲۶): منحنی حلقه پسماند نمونه های پودری در دمای اتاق. ۶۶
- شکل (۳-۲۷): طیف XRD نمونه های مورد مطالعه در دمای اتاق. ۶۷
- شکل (۳-۲۸): طیف XRD نمونه $Zn_{0.98}Fe_{0.02}O$ مورد مطالعه در دمای اتاق. ۶۷
- شکل (۳-۲۹): اثر آلایش مختلف آهن بر طیف فوتولومینسانس اکسید روی. ۶۸
- شکل (۳-۳۰): اثر آهن بر خواص نوری اکسید روی. شکل داخلی نمایش انرژی گاف نمونه های بر حسب درصد آلایش است. ۶۹
- شکل (۳-۳۱): اثر آلایش آهن بر خواص مغناطیسی اکسید روی. شکل داخلی وابستگی خاصیت مغناطیسی اکسید روی به درصدهای مختلف آلایش آهن را نشان می دهد. ۷۰
- شکل (۳-۳۲): اثر آلایش آهن بر خواص مغناطیسی $Zn_{0.98}Fe_{0.02}O$ در دماهای ۵ و ۳۰۰ درجه کلوین. ۷۰
- شکل (۳-۳۳): طیف XRD نمونه های ZnO شامل آلایشهای مختلف نیکل. علامت * قله مربوط به فاز ثانویه NiO است. ۷۱
- شکل (۳-۳۴): طیف XRD اکسید روی با آلایشهای مختلف نیکل. علامت * قله مربوط به فاز ثانویه NiO است. ۷۲
- شکل (۳-۳۵): طیف تراگیسیل لایه های اکسید روی آلائیده با درصدهای مختلف نیکل. ۷۲
- شکل (۳-۳۶): وابستگی دائمی مغناطش نمونه های $Zn_{1-x}Ni_xO$. ۷۳
- شکل (۴-۱): طیف تراگیسیل نمونه ها در دمای خشک سازی و بازپخت شده. ۷۷
- شکل (۴-۲): محاسبه انرژی گاف نواری نمونه بازپخت شده. ۷۷
- شکل (۴-۳): محاسبه ضریب خاموشی با روش پوما و برازش آن با روابط کوشی. ۷۸
- شکل (۴-۴): محاسبه ضریب شکست با روش پوما و برازش آن با روابط کوشی. ۷۸
- شکل (۴-۵): طیف تراگیسیل نمونه در دمای خشک سازی $200^\circ C$ و بازپخت $500^\circ C$. ۷۹
- شکل (۴-۶): محاسبه انرژی گاف نواری نمونه در دمای بازپخت $500^\circ C$. ۸۰

- شکل (۴-۷): ضریب خاموشی محاسبه شده با روش پوما و برازش آن با معادله کوشی. ۸۰
- شکل (۴-۸): محاسبه ضریب شکست با روش پوما و برازش آن با روابط کوشی. ۸۱
- شکل (۴-۹): نمودار طیف تراگسیل تجربی در دمای خشک سازی اولیه 200°C . ۸۲
- شکل (۴-۱۰): نمودار طیف تراگسیل تجربی و تئوری نمونه ها در دمای بازپخت. ۸۳
- شکل (۴-۱۱): محاسبه انرژی گاف نانو فیلم های بازپخت شده $\text{Zn}_{0.97}\text{Mn}_{0.03}\text{O}$ با ضخامت های مختلف. ۸۴
- شکل (۴-۱۲): نمودار تغییرات ضریب شکست تئوری و برازشی نانو فیلم های بازپخت شده $\text{Zn}_{0.97}\text{Mn}_{0.03}\text{O}$ برای نمونه هایی با سه و پنج لایه. ۸۵
- شکل (۴-۱۳): نمودار تغییرات ضریب خاموشی تئوری و برازشی نانو فیلم های بازپخت شده $\text{Zn}_{0.97}\text{Mn}_{0.03}\text{O}$ برای نمونه هایی با سه و پنج لایه. ۸۵
- شکل (۴-۱۴): طیف XRD نمونه $\text{Zn}_{0.95}\text{Mn}_{0.05}\text{O}$ در دمای بازپخت 300°C . ۸۷
- شکل (۴-۱۵): طیف نور تراگسیل نمونه در دمای اتاق به ازای دمای بازپخت 300°C . ۸۸
- شکل (۴-۱۶): محاسبه انرژی گاف نانوفیلم باز پخت شده در دمای 300°C . ۸۸
- شکل (۴-۱۷): نمودار تغییرات ضریب خاموشی تئوری و برازشی با روابط کوشی در دمای باز پخت 300°C . ۸۹
- شکل (۴-۱۸): نمودار تغییرات ضریب شکست تئوری و برازشی با روابط کوشی در دمای باز پخت 300°C . ۸۹
- شکل (۴-۱۹): طیف XRD نمونه در دمای باز پخت 400°C . ۹۰
- شکل (۴-۲۰): طیف نور تراگسیل نمونه در دمای اتاق به ازای دمای بازپخت 400°C . ۹۱
- شکل (۴-۲۱): محاسبه انرژی گاف نمونه در دمای اتاق به ازای دمای بازپخت 400°C . ۹۱
- شکل (۴-۲۲): نمودار تغییرات ضریب خاموشی تئوری و برازشی نمونه در دمای باز پخت 400°C . ۹۲
- شکل (۴-۲۳): نمودار تغییرات ضریب شکست تئوری و برازشی نمونه در دمای باز پخت 400°C . ۹۲
- شکل (۴-۲۴): طیف XRD نمونه بازپخت شده در 450°C . ۹۳
- شکل (۴-۲۵): طیف نور تراگسیل نمونه در دمای اتاق به ازای دمای بازپخت 450°C . ۹۳
- شکل (۴-۲۶): محاسبه انرژی گاف نمونه در دمای اتاق به ازای دمای بازپخت 450°C . ۹۴

- شکل (۴-۲۷): نمودار تغییرات ضریب خاموشی تئوری و برازشی نمونه بازپخت شده در دمای 450°C . ۹۴
- شکل (۴-۲۸): نمودار تغییرات ضریب شکست تئوری و برازشی نمونه بازپخت شده در دمای 450°C . ۹۵
- شکل (۴-۲۹): طیف XRD نمونه بازپخت شده در دمای 500°C . ۹۵
- شکل (۴-۳۰): طیف نور تراگسیل نمونه در دمای اتاق به ازای دمای بازپخت 500°C . ۹۶
- شکل (۴-۳۱): محاسبه انرژی گاف نمونه در دمای اتاق به ازای دمای بازپخت 500°C . ۹۶
- شکل (۴-۳۲): نمودار تغییرات ضریب خاموشی تئوری و برازشی نمونه بازپخت شده در دمای 500°C . ۹۷
- شکل (۴-۳۳): نمودار تغییرات ضریب شکست تئوری و برازشی نمونه بازپخت شده در دمای 500°C . ۹۷
- شکل (۴-۳۴): طیفهای XRD چهار نمونه نانوفیلم $\text{Zn}_{0.95}\text{Mn}_{0.05}\text{O}$ بازپخت شده در دماهای 300°C ، 400°C ، 450°C و 500°C درجه سلسیوس. ۹۸
- شکل (۴-۳۵): طیف XRD پودر $\text{Zn}_{0.95}\text{Mn}_{0.05}\text{O}$ بازپخت شده در 800°C درجه سلسیوس. ۹۹
- شکل (۴-۳۶): نمودار طیف تراگسیل تجربی و تئوری نمونه ها. ۱۰۰
- شکل (۴-۳۷): محاسبه گاف انرژی نانوفیلم ها $\text{Zn}_{0.95}\text{Mn}_{0.05}\text{O}$ بازپخت شده در دماهای مختلف. ۱۰۰
- شکل (۴-۳۸): نمودار تغییرات ضریب شکست تئوری و برازشی نانو فیلم های $\text{Zn}_{0.95}\text{Mn}_{0.5}\text{O}$ بازپخت شده در دماهای مختلف. ۱۰۱
- شکل (۴-۳۹): نمودار تغییرات ضریب میرائی تئوری و برازشی نانو فیلم های $\text{Zn}_{0.95}\text{Mn}_{0.5}\text{O}$ بازپخت شده در دماهای مختلف. ۱۰۲
- شکل (۴-۴۰): طیف XRD در دمای اتاق برای حلال نوع اول. ۱۰۵
- شکل (۴-۴۱): مورفولوژی سطح نمونه در دمای اتاق. ۱۰۶
- شکل (۴-۴۲): طیف تراگسیل نمونه در دمای اتاق برای دمای خشک سازی و بازپخت. ۱۰۷
- شکل (۴-۴۳): محاسبه انرژی گاف نمونه بازپخت شده. ۱۰۷
- شکل (۴-۴۴): ضریب خاموشی محاسبه شده با روش پوما و برازش آن با روابط کوشی در لایه های نازک. ۱۰۷

- شکل (۴-۴۵): ضریب شکست محاسبه شده با روش پوما و برازش آن با روابط کوشی در لایه های نازک. ۱۰۸
- شکل (۴-۴۶): نمودار عمق نفوذ نمونه بر حسب طول موج نور فرودی ۱۰۹
- شکل (۴-۴۷): طیف XRD نمونه بازپخت شده در دمای اتاق. ۱۱۰
- شکل (۴-۴۸): مورفولوژی سطح نمونه در دمای اتاق. ۱۱۰
- شکل (۴-۴۹): طیف تراگسیل نمونه در دمای اتاق برای دمای خشک سازی و بازپخت. ۱۱۱
- شکل (۴-۵۰): محاسبه انرژی گاف نمونه بازپخت شده. ۱۱۲
- شکل (۴-۵۱): ضریب خاموشی محاسبه شده با روش پوما و برازش آن با روابط کوشی در دمای بازپخت. ۱۱۳
- شکل (۴-۵۲): ضریب شکست محاسبه شده با روش پوما و برازش آن با روابط کوشی در دمای بازپخت. ۱۱۳
- شکل (۴-۵۳): نمودار عمق نفوذ نمونه بر حسب طول موج نور فرودی ۱۱۴
- شکل (۴-۵۴): طیف XRD نمونه بازپخت شده در دمای اتاق. ۱۱۴
- شکل (۴-۵۵): مورفولوژی سطح نمونه در دمای اتاق. ۱۱۵
- شکل (۴-۵۶): طیف تراگسیل نمونه در دمای اتاق برای دمای خشک سازی و بازپخت. ۱۱۶
- شکل (۴-۵۷): محاسبه انرژی گاف نمونه در دما بازپخت. ۱۱۶
- شکل (۴-۵۸): ضریب خاموشی محاسبه شده با روش پوما و برازش آن با روابط کوشی در لایه های نازک. ۱۱۷
- شکل (۴-۵۹): ضریب شکست محاسبه شده با روش پوما و برازش آن با روابط کوشی در لایه های نازک. ۱۱۸
- شکل (۴-۶۰): نمودار عمق نفوذ نمونه بر حسب طول موج نور فرودی. ۱۱۸
- شکل (۴-۶۱): طیف XRD نمونه در دمای اتاق. ۱۱۹
- شکل (۴-۶۲): مورفولوژی سطح نمونه در دمای اتاق. ۱۲۰
- شکل (۴-۶۳): طیف تراگسیل نمونه در دمای اتاق برای دمای خشک سازی و بازپخت. ۱۲۱
- شکل (۴-۶۴): محاسبه انرژی گاف نمونه بازپخت شده. ۱۲۱
- شکل (۴-۶۵): ضریب خاموشی محاسبه شده با روش پوما و برازش آن با روابط کوشی. ۱۲۲
- شکل (۴-۶۶): ضریب شکست محاسبه شده با روش پوما و برازش آن با روابط کوشی. ۱۲۳
- شکل (۴-۶۷): نمودار عمق نفوذ نمونه بازپخت شده بر حسب طول موج نور فرودی. ۱۲۳

- شکل (۴-۶۸): طیف XRD همه نمونه های بازپخت شده در دمای اتاق. ۱۲۵
- شکل (۴-۶۹): مورفولوژی سطح نمونه ها ۱۲۶
- شکل (۴-۷۰): طیف تراگسیل نمونه ها در دمای اتاق برای دمای خشک سازی 200°C . ۱۲۹
- شکل (۴-۷۱): طیف تراگسیل نمونه ها در دمای اتاق برای دمای خشک سازی 500°C . ۱۲۹
- شکل (۴-۷۲): تعیین گاف نواری مستقیم نمونه های بازپخت شده برای حلالهای مختلف. ۱۳۰
- شکل (۴-۷۳): تغییرات ضریب شکست نمونه ها بر حسب طول موج. ۱۳۱
- شکل (۴-۷۴): تغییرات ضریب خاموشی نمونه ها بر حسب طول موج. ۱۳۲
- شکل (۴-۷۵): عمق نفوذ بر حسب طول موج نور فرودی برای همه نمونه ها. ۱۳۲
- شکل (۴-۷۶): نمایش نیروها در تصویر برداری غیر تماسی MFM. ۱۳۴
- شکل (۴-۷۷): نمایی از عملکرد هد MFM. ۱۳۴
- شکل (۴-۷۸): روش مغناطیسی کردن هد MFM. ۱۳۴
- شکل (۴-۷۹): نحوه جاروب هد DMS. ۱۳۵
- شکل (۴-۸۰): تصویر MFM نمونه بازپخت شده حلال اول. شکل‌های (الف) و (ب) و (ب) به ترتیب تصویر دوبعدی {سه بعدی} نمونه با داده های خام و برازش شده با رابطه چند جمله ایها است. ۱۳۶
- شکل (۴-۸۱): تصویر MFM نمونه بازپخت شده حلال دوم. شکل‌های (الف) و (ب) و (ب) به ترتیب تصویر دوبعدی {سه بعدی} نمونه با داده های خام و برازش شده با رابطه چند جمله ایها است. ۱۳۶
- شکل (۴-۸۲): تصویر MFM نمونه بازپخت شده حلال سوم. شکل‌های (الف) و (ب) و (ب) به ترتیب تصویر دوبعدی {سه بعدی} نمونه با داده های خام و برازش شده با رابطه چند جمله ایها است. ۱۳۷
- شکل (۴-۸۳): تصویر MFM نمونه بازپخت شده حلال چهارم. شکل‌های (الف) و (ب) و (ب) و (ب) به ترتیب تصویر دوبعدی {سه بعدی} نمونه با داده های خام و برازش شده با رابطه چند جمله ایها است. ۱۳۷
- شکل (۴-۸۴): مورفولوژی سطح نمونه بازپخت شده برای حلال اول. الف: AFM ، ب) MFM ۱۳۸
- شکل (۴-۸۵): مورفولوژی سطح نمونه بازپخت شده برای حلال دوم. الف: AFM ، ب) MFM ۱۳۹

- شکل (۴-۸۶): مرفولوژی سطح نمونه بازپخت شده برای حلال سوم. الف: AFM ، ب) ۱۳۹
MFM
- شکل (۴-۸۷): مرفولوژی سطح نمونه بازپخت شده برای حلال چهارم. الف: AFM ، ب) ۱۳۹
MFM
- شکل (۵-۱): مورفولوژی سطح نمونه. الف) {ب} و ج) {د} نمایش توپوگرافی دو
بعدی {سه بعدی} سطح به ترتیب برای داده های اولیه (تصاویر بالا) و
۱۴۴ برازش آن با چند جمله ای (تصاویر پائین).
- شکل (۵-۲): طیف XRD اکسید روی خالص بازپخت شده در دمای اتاق. ۱۴۵
- شکل (۵-۳): طیف تراگیسیل نمونه در دمای اتاق برای دمای خشک سازی و بازپخت. ۱۴۶
- شکل (۵-۴): منحنی $(ahv)^2$ بر حسب انرژی فوتون فرودی برای نمونه بازپخت شده
ZnO ۱۴۶
- شکل (۵-۵): ضریب شکست ZnO بازپخت شده در دمای اتاق. ۱۴۷
- شکل (۵-۶): ضریب خاموشی لایه بازپخت شده در دمای اتاق. ۱۴۷
- شکل (۵-۷): عمق نفوذ ZnO بازپخت شده در دمای اتاق. ۱۴۸
- شکل (۵-۸): مورفولوژی سطح نمونه. الف) {ب} و ج) {د} نمایش توپوگرافی دو
بعدی {سه بعدی} سطح به ترتیب برای داده های اولیه بدون برازش و
۱۴۹ برازش آن با چند جمله ای.
- شکل (۵-۹): طیف XRD نمونه بازپخت شده در دمای اتاق. ۱۵۰
- شکل (۵-۱۰): طیف تراگیسیل در دمای اتاق برای نمونه در دمای خشک سازی و باز
پخت. ۱۵۱
- شکل (۵-۱۱): منحنی $(ahv)^2$ بر حسب انرژی فوتون فرودی برای نمونه بازپخت شده
ZnO:Mn ۱۵۱
- شکل (۵-۱۲): ضریب شکست نمونه بازپخت شده ZnO:Mn در دمای اتاق. ۱۵۲
- شکل (۵-۱۳): ضریب خاموشی نمونه بازپخت شده ZnO:Mn در دمای اتاق. ۱۵۲
- شکل (۵-۱۴): عمق نفوذ نمونه بازپخت شده ZnO:Mn در دمای اتاق. ۱۵۳
- شکل (۵-۱۵): مورفولوژی سطح نمونه بازپخت شده. الف) {ب} و ج) {د} نمایش
توپوگرافی دو بعدی {سه بعدی} سطح به ترتیب برای داده های اولیه بدون
۱۵۴ برازش و برازش آن با چند جمله ای.
- شکل (۵-۱۶): طیف XRD نمونه بازپخت شده اکسید روی آلاییده با آهن در دمای اتاق. ۱۵۵

- شکل (۵-۱۷): طیف تراگسیل در دمای اتاق برای نمونه در دمای خشک سازی و بازپخت. ۱۵۶
- شکل (۵-۱۸): منحنی $(ahv)^2$ بر حسب انرژی فوتون فرودی برای نمونه بازپخت شده ZnO:Fe ۱۵۶
- شکل (۵-۱۹): ضریب شکست نمونه بازپخت شده ZnO:Fe ۱۵۷
- شکل (۵-۲۰): ضریب خاموشی نمونه بازپخت شده ZnO:Fe ۱۵۷
- شکل (۵-۲۱): عمق نفوذ نمونه بازپخت شده ZnO:Fe بر حسب طول موج نور فرودی. ۱۵۸
- شکل (۵-۲۲): مورفولوژی سطح نمونه. (الف) {ب} و (ح) {د} نمایش توپوگرافی دو بعدی {سه بعدی} سطح به ترتیب برای داده های اولیه بدون برازش و برازش آن با چند جمله ای. ۱۵۹
- شکل (۵-۲۳): طیف XRD نمونه بازپخت شده اکسید روی آلاییده با کبالت در دمای اتاق. ۱۶۰
- شکل (۵-۲۴): طیف تراگسیل نمونه بازپخت شده و نشده ZnO:CO در دمای اتاق بر حسب طول موج نور فرودی. ۱۶۱
- شکل (۵-۲۵): منحنی $(ahv)^2$ بر حسب انرژی فوتون فرودی برای نمونه بازپخت شده ZnO:Co ۱۶۱
- شکل (۵-۲۶): ضریب شکست نمونه بازپخت شده ZnO:Co در دمای اتاق. ۱۶۲
- شکل (۵-۲۷): ضریب خاموشی نمونه بازپخت شده ZnO:Co در دمای اتاق. ۱۶۳
- شکل (۵-۲۸): عمق نفوذ نمونه بازپخت شده ZnO:Co بر حسب نور فرودی. ۱۶۳
- شکل (۵-۲۹): مورفولوژی سطح نمونه. (الف) {ب} و (ح) {د} نمایش توپوگرافی دو بعدی {سه بعدی} سطح به ترتیب برای داده های اولیه بدون برازش و برازش آن با چند جمله ای. ۱۶۴
- شکل (۵-۳۰): طیف XRD نمونه بازپخت شده اکسید روی آلاییده با نیکل در دمای اتاق. ۱۶۵
- شکل (۵-۳۱): طیف تراگسیل نمونه ZnO:Ni در دمای اتاق برای دمای خشک سازی و بازپخت. ۱۶۶
- شکل (۵-۳۲): منحنی $(ahv)^2$ بر حسب انرژی فوتون فرودی برای نمونه بازپخت شده ZnO:Ni ۱۶۶
- شکل (۵-۳۳): ضریب شکست نمونه بازپخت شده ZnO:Ni در دمای اتاق بر حسب نور فرودی. ۱۶۷

- شکل (۳۴-۵): ضریب خاموشی نمونه بازپخت شده ZnO:Ni در دمای اتاق برحسب نور فرودی. ۱۶۷
- شکل (۳۵-۵): عمق نفوذ نمونه بازپخت شده ZnO:Ni در دمای اتاق برحسب طول موج نور فرودی. ۱۶۸
- شکل (۳۶-۵): تصاویر AFM نمونه های بازپخت شده عناصر واسطه با آلایش سه درصدی از عناصر واسطه. ۱۶۹
- الف) اکسید روی خالص، ب) ZnO:Mn، ج) ZnO:Fe، د) ZnO:Co و ه) ZnO:Ni ۱۷۰
- شکل (۳۷-۵): طیف XRD ثبت شده نمونه ها در دمای اتاق ۱۷۱
- شکل (۳۸-۵): طیف نور تراگیسیل همه نمونه ها در دمای اتاق برای دمای خشک سازی. ۱۷۳
- شکل (۳۹-۵): طیف نور تراگیسیل همه نمونه های بازپخت شده در دمای اتاق. ۱۷۳
- شکل (۴۰-۵): نمودار $(\alpha h\nu)^2$ بر حسب انرژی نمونه های بازپخت شده با آلایش سه درصد از عناصر واسطه. ۱۷۴
- شکل (۴۱-۵): ضرایب شکست نمونه های بازپخت شده بر حسب تابعی از طول موج نور فرودی. ۱۷۵
- شکل (۴۲-۵): ضرایب خاموشی نمونه های بازپخت شده بر حسب تابعی از طول موج نور فرودی. ۱۷۵
- شکل (۴۳-۵): محاسبه عمق نفوذ نمونه های بازپخت شده بر حسب تابعی از طول موج نور فرودی. ۱۷۶
- شکل (۴۴-۵): حلقه پسماند اکسید روی خالص در دمای اتاق. ۱۷۸
- شکل (۴۵-۵): حلقه پسماند اکسید روی آلاییده شده با آهن در دمای اتاق. ۱۷۹
- شکل (۴۶-۵): حلقه پسماند اکسید روی آلاییده شده با کبالت در دمای اتاق. ۱۸۰
- شکل (۴۷-۵): حلقه پسماند اکسید روی آلاییده شده با نیکل در دمای اتاق. ۱۸۰
- شکل (۴۸-۵): حلقه پسماند اکسید روی آلاییده با منگنز در دمای اتاق. ۱۸۱
- شکل (۴۹-۵): حلقه پسماند اکسید روی خالص و آلاییده شده با آهن، کبالت و نیکل در دمای اتاق. ۱۸۲

فهرست جداول:

- جدول (۱-۱): نیمرساناهای تک عنصری A، و دو عنصری AB
- ۳۹ جدول (۱-۲): میزان حلالیت آلایش اتمهای منگنز، آهن و کبالت در مواد میزبان گروه II-VI.
- ۱۵۱ جدول (۱-۳): خواص فیزیکی اکسیدهای II-VI.
- ۵۲ جدول (۲-۳): نمایش پارامترهای مهم نیمرسانای آلیاژی اکسید روی با منیزیم و کادمیوم.
- ۵۴ جدول (۳-۳): محاسبه گاف نواری نمونه ها.
- ۱۰۳ جدول (۱-۴): پارامترهای فیزیکی و شیمیایی حلالهای استفاده شده در دمای ۲۰۰ °C.
- ۱۲۴ جدول (۲-۴): PH و ویسکوزیته برای حلالهای مختلف
- ۱۲۵ جدول (۳-۴): ویژگیهای ساختاری XRD همه نمونه ها.
- ۱۲۷ جدول (۴-۴): مشخصات مورفولوژی سطح
- ۱۷۰ جدول (۱-۵): بعضی از ویژگیهای سطح نمونه ها حاصل از تصاویر AFM.
- ۱۷۲ جدول (۲-۵): ثابتهای شبکه، اندازه دانه و موقعیت قله های طیف.
- ۱۸۲ جدول (۳-۵): ویژگیهای مغناطیسی اکسید روی خالص و آلائیده شده با آهن، کبالت، منگنز و نیکل در دمای اتاق.
- ۱۸۳ جدول (۴-۵): کمیتهای مغناطیسی نمونه پودری آلایش یافته با درصدهای مختلف نیکل.
- ۱۸۴ جدول (۵-۵): گشتاور مغناطیسی نمونه های آلایش یافته با درصدهای مختلف آهن در دماهای ۶۲ و ۲۹۵ کلوین مربوط به گروه جیون یانگ.
- ۱۹۲ جدول (۱-۶): نمایش عناصر ماتریسی $\langle \mathbf{k}' | H_1(\mathbf{r}) | \mathbf{k} \rangle$ برای یونهای گروه $3d$.
- ۱۹۵ جدول (۲-۶): ضریب جفت شدگی تبدیلی، عنصر ماتریسی و تحرک پذیری الکترون برای پتانسیلهای برهمکنشی گوناگون

فصل اول

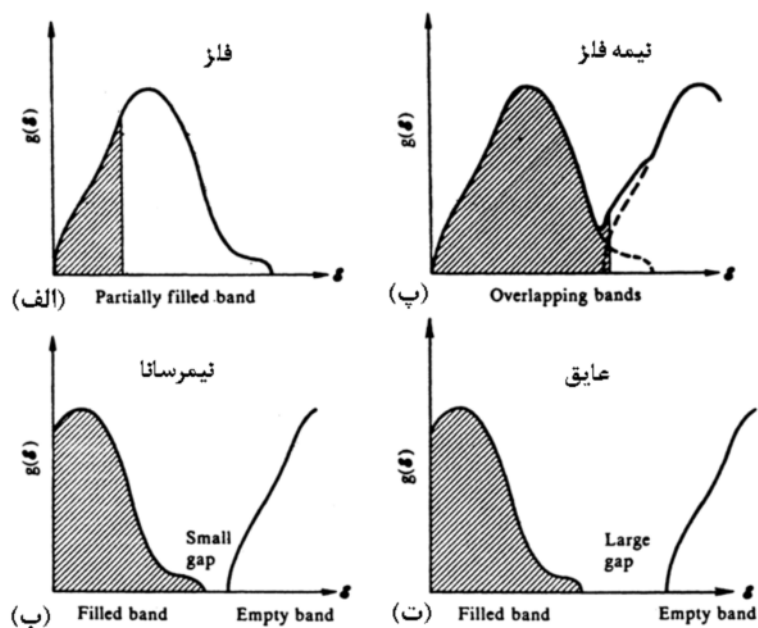
نیمرسانا

۱-۱) مقدمه

مواد موجود در طبیعت به شکل جامد، مایع، گاز (بی بار یا باردار همچون محیط پلاسما) و مایع بلوری هستند. فاز یک ماده شدیداً به دمائی که در آن قرار دارد وابسته است، مثلاً آب خالص در فشار یک اتمسفر در زیر صفر درجه سلسیوس در فاز جامد و بالای صفر درجه سلسیوس در فاز گازی است، در حالی که بین صفر و صد درجه سلسیوس در فاز مایع است. مایع بلوری از بلورکهای با نظم کوتاه برد تشکیل شده است و همچون مایع می تواند شارش پیدا کند. گازها و مایعات معمولی هیچ نظم کوتاه بردی ندارند و همچون سیالی روانند. ساختار جامدات می تواند به شکل بلوری (چند بلوری یا تک بلوری دارای نظم) و یا آمورفی (بدون نظم خاصی) باشد. مواد جامد از نظر الکتریکی می توانند فلز، نیمه فلز، عایق یا نیمرسانا باشند. مواد نیمرسانا که معمولاً ساختار بلوری دارند، بعلاوه کاربرد فراوان در صنایع اپتوالکترونیک و اسپینترونیک حائز اهمیت هستند. این دسته از مواد در دمای صفر کلوین عایق کامل هستند. در ادامه، ویژگیهای کلی آنها را مورد بررسی قرار می دهیم.

۲-۱) چگالی حالات

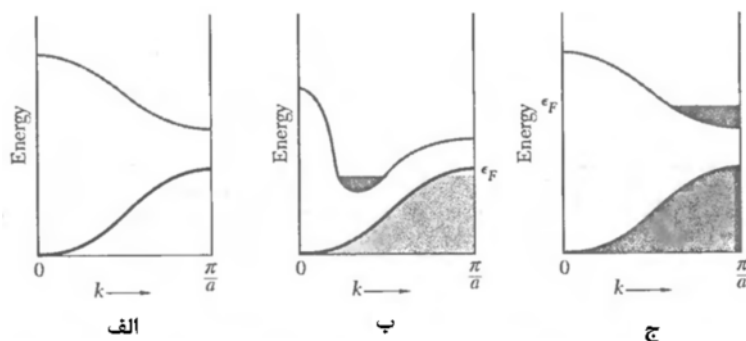
شکل (۱-۱) چگالی حالات را برای فلزات، نیمه فلزات، نیمرسانا و عایق نشان می دهد. در فلزات چگالی حالات برای ترازهای مجاز در نوار رسانش به طور جزئی پر است ولی در نیمه فلزات به طور جزئی خالی است و همچنین با چگالی حالت ترازهای بالاتر همپوشانی دارد. در عایقها و نیمرساناها، چگالی حالات مجاز نوار ظرفیت و رسانش با انرژی گاف از هم جدا شده و در دمای صفر درجه کلوین نوار رسانش و ظرفیت به ترتیب کاملاً خالی و پر است. از اینرو، نیمرساناها در دمای صفر درجه کلوین کاملاً عایق هستند. اختلاف اصلی بین عایق و نیمرسانا در گاف انرژی آنها است. گاف انرژی در عایق ها بزرگتر از نیمرسانا است [۱].



شکل (۱-۱): نمایش چگالی حالات برای الف) فلزات، ب) نیمه فلزات، ج) نیمرساناها و د) عایقها [۱].

۳-۱) ساختار نواری

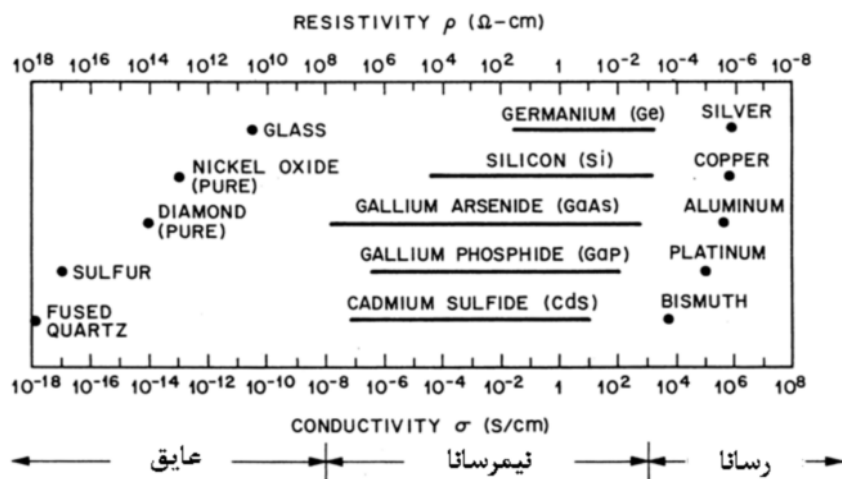
شکل (۲-۱) حالت‌های اشغال شده و ساختار نواری را برای یک عایق، نیمرسانا، فلز یا نیمه فلز نشان می‌دهد در مورد یک عایق و نیمرسانا در دمای صفر درجه کلوین نوار ظرفیت و رسانش به ترتیب کاملاً پر و خالی هستند. برای نیمرساناها اختلاف انرژی بین دو نوار زیاد نیست. شکل (ب) ساختار نواری فلز یا نیمه فلز را نشان می‌دهد که در این حالت نوارها همپوشانی دارند. لازم نیست این همپوشانی در منطقه بریلوئن در یک جهت رخ دهد. اگر همپوشانی کوچک باشد، ساختار مربوط به نیمه فلزات است. نمودار (ج) ساختار نواری فلزات در حالت تراکم الکترونی را نشان می‌دهد [۲].



شکل (۲-۱): حالت‌های اشغال شده و ساختار نواری الف) عایق یا نیمرسانا ب) فلز یا نیمه فلز و ج) فلزات [۲].

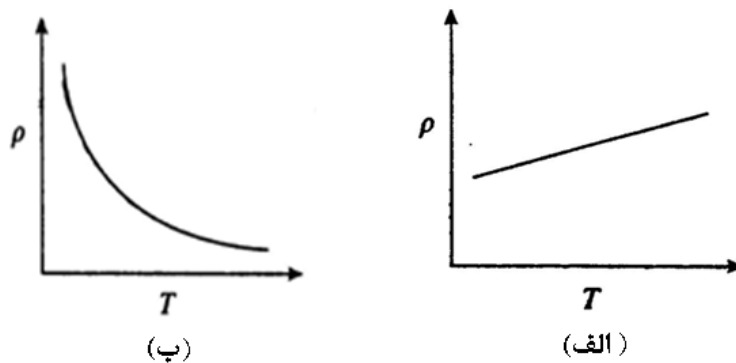
۴-۱) مقاومت الکتریکی

یکی از فاکتورهای مهم برای طبقه بندی مواد، استفاده از خواص الکتریکی نظیر مقاومت و رسانندگی ویژه آنها است. شکل (۳-۱) رسانندگی و مقاومت ویژه مربوط به بعضی از مواد مهم را نشان می دهد. مقاومت الکتریکی ویژه مواد رسانا کمتر از $10^{-4} \Omega \cdot m$ است. عایقها دارای مقاومت الکتریکی بیشتر از $10^8 \Omega \cdot m$ هستند. مقاومت الکتریکی نیمرساناها بین این دو حالت قرار دارند [۳].



شکل (۳-۱): نمایش مقاومت و رسانندگی الکتریکی مواد [۳].

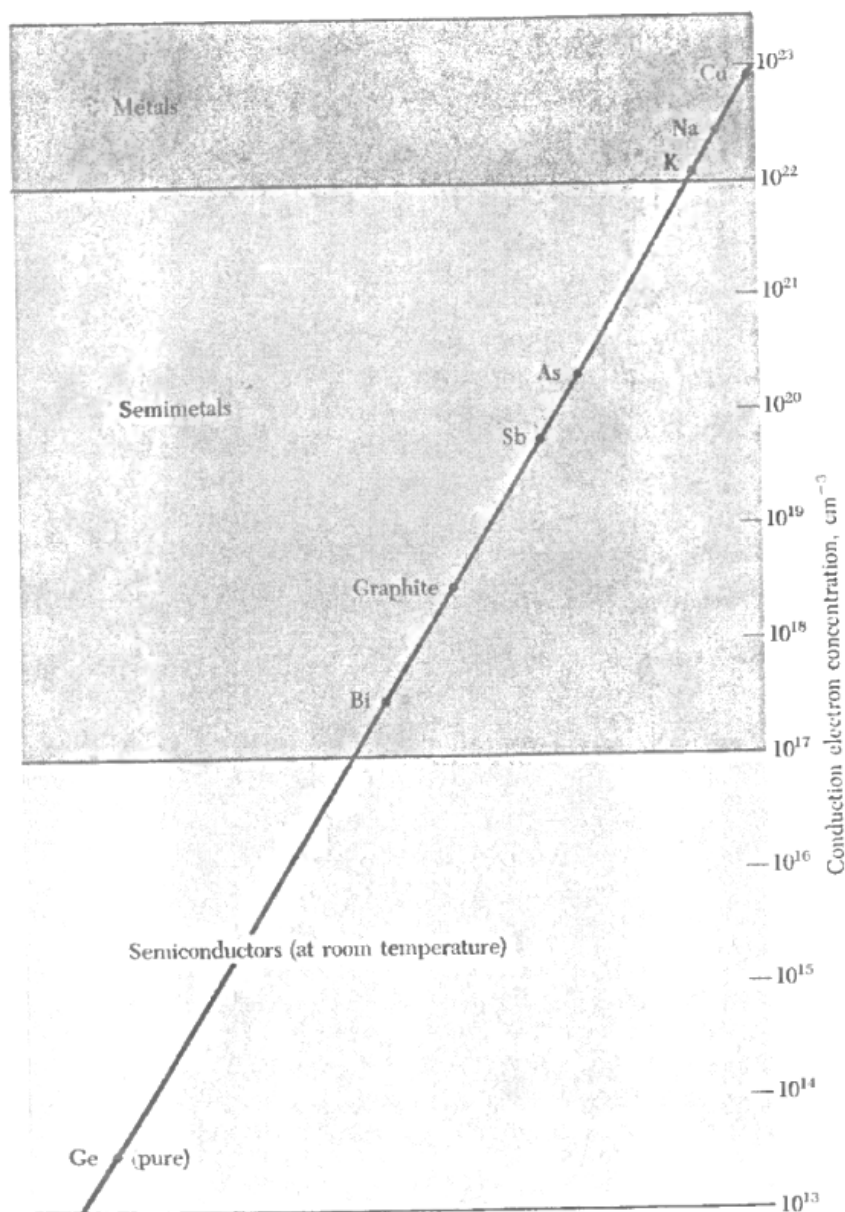
وابستگی مقاومت ویژه مواد خالص به دما در شکل (۴-۱) نشان داده شده است. برای فلزات این وابستگی دمائی با افزایش دما، افزایش می یابد. برای نیمرساناها این وابستگی دمائی با افزایش دما، کاهش می یابد.



شکل (۴-۱): وابستگی مقاومت الکتریکی به دما. الف) برای فلز ب) برای نیمرسانا [۳].

۵-۱) تراکم حاملها

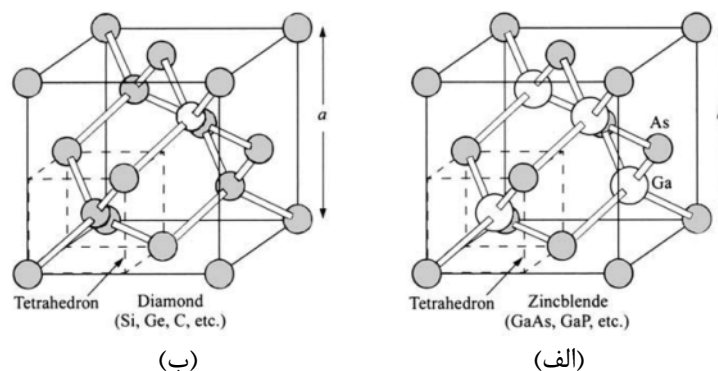
فاکتور مهم دیگر در طبقه بندی مواد جامد، تراکم حاملهای بار آنها است. شکل (۵-۱) تراکم حاملها را برای مواد در حالتهاى مختلف نشان می دهد. این تراکم قویاً به دما وابسته است. در شرایط ذاتی، تراکم حفره ها با تراکم الکترونها برابر است. هر چه گاف انرژی کوچکتر باشد تراکم ذاتی حاملها بیشتر است. آرایش نیمرساناها باعث تغییر تراکم حاملها در آنها می شود [۲].



شکل (۵-۱): تراکم حاملها برای مواد [۲].

۶-۱) ساختار بلوری

ساختار بلوری نیمرساناها عمدتاً به صورت شبکه مرکز سطحی (شکل ۶-۱) یا ششگوشی (شکل ۷-۱) است. پایه این شبکه ممکن است تک اتمی، دو اتمی یا بیشتر باشد. ساختار الماسی را می توان به صورت دو زیر ساختار fcc که در یکدیگر نفوذ کرده اند در نظر گرفت. بدین طریق که یک زیر شبکه به اندازه یک چهارم فاصله در راستای قطر نسبت به زیر شبکه دیگر جابجا شده است. ساختار زینک بلند^۱ شبیه ساختار الماسی است با این تفاوت که پایه شامل دو اتم متفاوت است. در ساختار زینک بلند هر اتم با چهار اتم دیگر پیوند چهار گوش می دهد که نتیجه آن خلق نیرویی است که ترازهای تبهگن را جدا می سازد. ساختار ششگوشی یک شبکه تنگ پکیده^۲ است که چینش لایه ها به صورت ABAB است. ساختار ورتسایت^۳ از دو شبکه تنگ پکیده که هر کدام با یک نوع از اتمها، که به اندازه $\frac{3}{8}c$ در هم فرورفته اند، تشکیل شده است [۴].

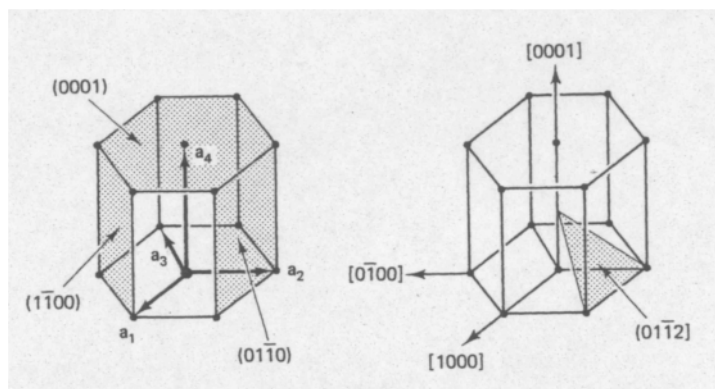


شکل (۶-۱): ساختار fcc با پایه دو اتمی. الف) ساختار زینک بلند، ب) ساختار الماسی [۴].

^۱ Zinc blend

^۲ Hexagonal Close Pack (hcp)

^۳ Wurtzite



شکل (۷-۱): ساختار ششگوش با اندیسه‌های میلر [۴].

(۷-۱) نیمرساناهای ترکیبی

نیمرساناها بصورت خالص یا بصورت آلائیده مورد استفاده قرار می‌گیرند. نیمرساناهای خالص، موادی هستند که ساختار بلوری آنها می‌تواند مثلاً بصورت تک‌عنصری A یا دو‌عنصری AB باشد. جدول (۱-۱) نمونه‌های از نیمرساناهای تک‌عنصری A، و دو‌عنصری AB را نشان می‌دهد.

جدول (۱-۱): نیمرساناهای تک‌عنصری A، و دو‌عنصری AB

تک‌عنصری	گروه IV-IV	گروه III-V	گروه II-VI	گروه IV-VI
Si	SiC	AlAs	CdS	PbS
Ge		AlSb	CdSe	PbTe
		Bn	CdTe	
		GaAs	ZnS	
		GaP	ZnSe	
		GaSb	ZnTe	
		InAs	ZnO	
		InP		
		InSb		

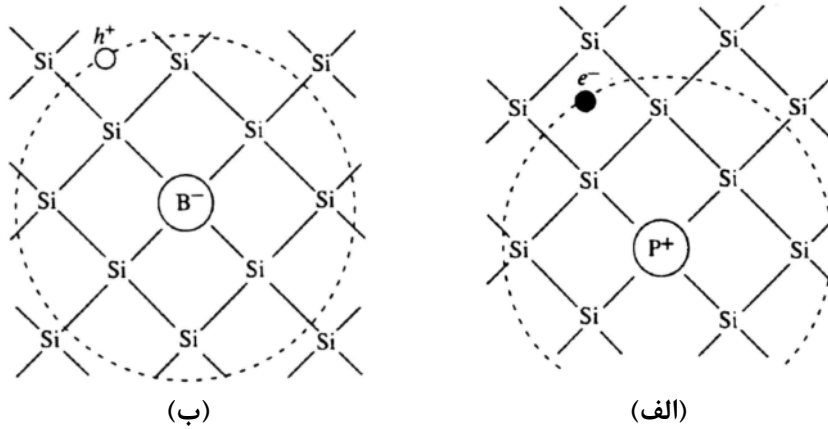
در دستگاههای فوتونیک که جریان الکتریکی را به نور تبدیل می کنند همچون دیودهای نورگسیل (LED)¹ و دیودهای لیزری، و نیز آشکارسازهای نوری و سلولهای خورشیدی که نور را به جریان الکتریکی تبدیل می کند، ممکن است از ترکیبات نیمرساناها با ساختار سه عنصری بصورت $A_xB_{1-x}C$ یا $AC_{1-x}D_x$ و نیز چهار عنصری $A_xB_{1-x}C_yD_{1-y}$ استفاده شود که A, B جز گروه III و C, D جز گروه V جدول تناوبی اند. مثلاً $Al_xGa_{1-x}As$ ، $GaAs_{1-x}P_x$ که در ساخت LED ها به کار می روند و $Al_xGa_{1-x}As_ySb_{1-y}$ ، $Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y}$ که در ساخت دیودهای لیزری استفاده فراوانی دارند [۵].

۸-۱) نیمرسانای غیر ذاتی

هرگاه یک نیمرسانا با ناخالصی اتمی آلاییده شود یک نیمرسانای غیر ذاتی از نوع n یا p بوجود می آید. اگر یک نیمرسانای تک عنصری مانند Si، با عناصر گروه V، نظیر فسفر آلاییده شود می تواند با چهار اتم همسایه اول Si در شبکه الماسی پیوند قوی کوالانسی تشکیل دهد. الکترون پنجم می تواند وارد نوار رسانش ماده شده و به راحتی در بلور حرکت کند. شکل الف (۸-۱) مکانیزم این عمل را نشان می دهد. در این حالت فسفر را یک ناخالصی بخشنده می نامند، بنابراین سیلیکون آلاییده با فسفر از نوع n است. در این حالت حاملهای اکثریت الکترونها می باشند ($n > p$)، و نقش مهمی را در رسانش ماده ایفا می کنند. عناصر دیگر گروه V، همچون As و Sb رفتار شبیه فسفر را در Si ایجاد می کند. در صورتی که Si با عنصری از گروه III نظیر بورون آلاییده شود، سه پیوند کوالانسی با آن تشکیل می دهد ولی الکترون چهارم پیوندی تشکیل نمی دهد. عدم تشکیل پیوند حفره را بوجود می آورد که به راحتی در نوار ظرفیت حرکت می کند. در این حالت اتم بور یک پذیرنده است. مکانیزم این عمل را در شکل (۸-۱) مشاهده می کنید. سیلیکون آلاییده شده با بورون را نیمرسانای نوع p گویند. در این حالت حاملهای اکثریت حفره ها می باشند ($p > n$)، و نقش مهمی را در رسانش ماده ایفا می کنند. عناصر دیگر گروه III همچون Al و Ga می توانند رفتاری

¹ Light Emitter Diode (LED)

مشابه با بورون را ایجاد کنند. در نیمرساناهای ذاتی گروه ترکیبی III-V، اگر اتمهای گروه V (III) توسط اتمهای گروه VI (II) آلائیده شوند می توانند منجر به نیمرسانای غیرذاتی نوع n (p) شوند [۶].



شکل (۸-۱): نیمرسانای آلائیده: الف) نوع n، ب) نوع p [۶].

۹-۱ ویژگیهای نیمرسانا

۱-۹-۱ حفره: اربیتال خالی در نوار ظرفیت (حفره) در نیمرساناها بعلت ویژگیهای زیر دارای اهمیت ویژه ای است:

الف) $k_h = k_e$ (بردار موج)	ب) $\varepsilon_h(k_h) = -\varepsilon_e(k_e)$ (انرژی)
ج) $v_h = v_e$ (سرعت)	د) $m_h = -m_e$ (جرم مؤثر)
خ) $s_h = s_e = \frac{1}{2}$ (اسپین)	ح) $q_h = -q_e$ (بار)

۲-۹-۱ خواص الکتریکی

چگالی جریان و مقاومت ویژه در نیمرسانا به شکل رابطه (۱-۱) و (۲-۱) است.

$$J = J_n + J_p = (n\mu_n + p\mu_p)qE \quad (1-1)$$

$$\rho = \frac{1}{\sigma} = \frac{1}{q(n\mu_n + p\mu_p)} \quad (2-1)$$

در نیمرساناها هم الکترون و هم حفره در فرآیند رسانش شرکت می کنند. الکترونها در نوار رسانش و حفره ها در نوار ظرفیت هستند.

۱-۹-۳) خواص اپتیکی

در حالت کلی وقتی امواج الکترومغناطیسی به یک ماده برخورد کنند، پدیده نوری جذب، انعکاس و عبور می تواند رخ دهد. مکانیزم میکروسکوپی پراکندگی در نیمرساناها بسیار پیچیده است. پراکندگی در نیمرسانا می تواند کشسان یا غیر کشسان باشد. پدیده جذب فقط در پراکندگی ناکشسان صورت می گیرد که می تواند باعث شود مقداری از انرژی نور ورودی جذب گردد. پراکندگی ممکن است ناشی از، حاملهای آزاد (الکترون/حفره)، فونونها (آکوستیک/نوری)، ناخالصیهای یونی (الکتریکی، مغناطیسی یا هر دو)، ناخالصیهای خنثی، زبری سطح، سطح مشترک و یا در رفتگیها باشد. قدرت جذب در ماده به نوع فرآیند بستگی دارد. اثر فوتوالکتریک، اثر پیزوالکتریک، پراکندگی رامان^۱ و رابلی^۲، جذب نوار به نوار، اثر کامپتون معمولاً منجر به جذب قوی در ماده می شوند.

۱-۹-۳-۱) گاف نواری مستقیم

آزمایشات تجربی نشان می دهد که نمودار جذب انرژی فوتون تابشی برای بعضی از بلورها در دماهای نزدیک صفر کلون به شکل نمودار (۱-۹) است. این نمودار نشان می دهد که برای فوتونهای با انرژی کمتر از $E_g = \hbar\omega_g$ هیچ جذبی وجود ندارد و برای چنین موج الکترومغناطیسی بلور شفاف است. برای فوتونهای با انرژی بزرگتر از $\hbar\omega_g$ جذب وجود دارد که نشان دهنده برهمکنش فوتون با بلور است. این برهمکنش به صورت فوتون- الکترون یا فوتون-فونون می باشد. در مواد با گاف نواری مستقیم تنها برهمکنش فوتون- الکترون در جذب مؤثر است. اگر انرژی و بردار موج اولیه و نهائی الکترون به ترتیب ϵ_i و ϵ_f ، k_i و k_f ، و برای فوتون به ترتیب $\hbar\omega_i$ و $\hbar\omega_f$ ، q_i و q_f باشند، طبق پایستگی انرژی و اندازه حرکت داریم:

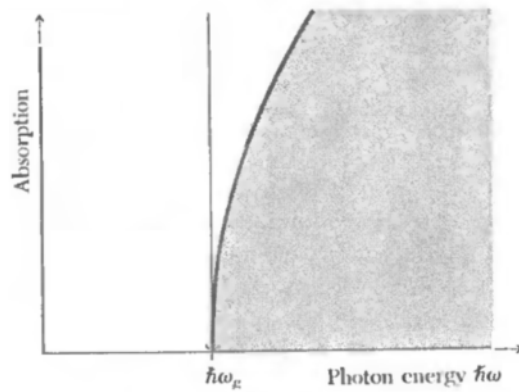
$$\epsilon_i + \hbar\omega_i = \epsilon_f + \hbar\omega_f \quad (۳-۱)$$

^۱ Raman Scattering

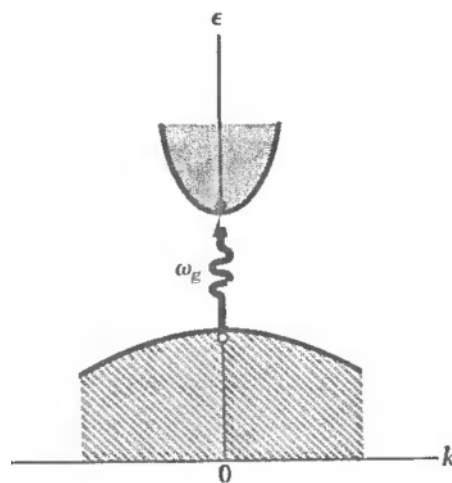
^۲ Rayleigh Scattering

$$\hbar\mathbf{k}_i + \hbar\mathbf{q}_i = \hbar\mathbf{k}_f + \hbar\mathbf{q}_f \quad (۴-۱)$$

برای کمینه جذب $\hbar\omega_f = 0$ و $\hbar\mathbf{q}_f = 0$ است. چون \mathbf{q}_f (به طور تقریبی برابر 10^5 cm^{-1}) در مقایسه با عدد موج الکترون در منطقه بریلوئن 10^8 cm^{-1} کوچک است معمولاً اندازه حرکت فوتون \mathbf{q}_i در مقایسه با اندازه حرکت الکترون نادیده گرفته می شود. در این صورت $\hbar\omega_i = \varepsilon_f - \varepsilon_i \geq E_g$ ، و $\mathbf{k}_f \approx \mathbf{k}_i$. شکل (۱۰-۱) نمودار پاشندگی انرژی برای نیمرسانائی با گاف نواری مستقیم را نشان می دهد [۲].



شکل (۱۰-۱): نمودار جذب اپتیکی در یک نیمرسانا با گاف نواری مستقیم در دمای صفر کلوین [۲].



شکل (۱۰-۱): جذب فوتونی برای یک نیمرسانا با گاف نواری مستقیم [۲].

۱-۹-۳-۲) گاف نواری غیر مستقیم

آزمایشات تجربی نشان می دهند که نمودار جذب انرژی فوتون تابشی بعضی از بلورها در دمای نزدیک صفر کلون بصورت شکل (۱-۱۱) است. در این حالت اگر فونون مورد نیاز جذب شده (+) یا تولید شده (-) دارای انرژی $\pm \hbar\Omega$ ، و اندازه حرکت $\pm \hbar\mathbf{K}$ باشد با توجه به معادلات پایستگی انرژی و اندازه حرکت می توان نوشت:

$$\varepsilon_i + \hbar\omega_i \pm \hbar\Omega = \varepsilon_f + \hbar\omega_f \quad (۵-۱)$$

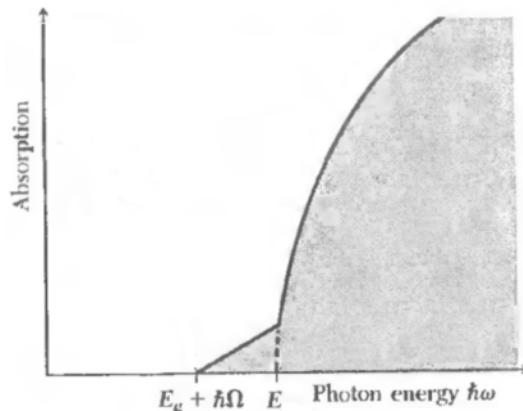
$$\hbar\mathbf{k}_i + \hbar\mathbf{q}_i \pm \hbar\mathbf{K} = \hbar\mathbf{k}_f + \hbar\mathbf{q}_f \quad (۶-۱)$$

برای کمینه جذب $\hbar\omega_f = 0$ و $\hbar\mathbf{q}_f \approx 0$ است.

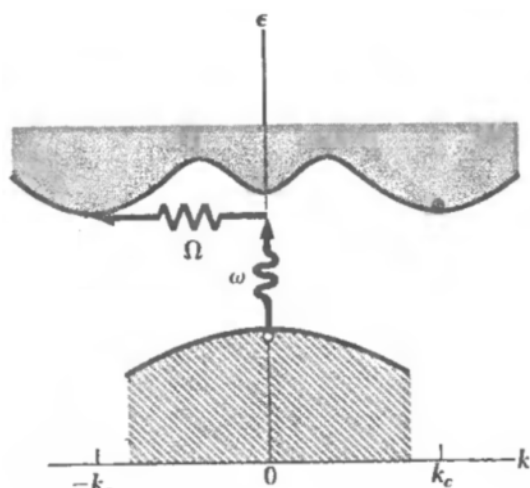
$$\hbar\omega_i \pm \hbar\Omega = \varepsilon_f + \varepsilon_i = E_g \quad (۷-۱)$$

$$\mathbf{k}_f = \mathbf{k}_i \pm \mathbf{K} \quad (۸-۱)$$

شکل (۱-۱۲) نمودار پاشندگی انرژی برای گاف نواری غیرمستقیم را نشان می دهد [۲].



شکل (۱-۱۱): نمودار جذب اپتیکی در یک نیمرسانای گاف نواری غیر مستقیم در دمای صفر درجه کلون [۲].



شکل (۱-۱۲): نمودار پاشندگی انرژی برای گاف نواری غیر مستقیم [۲].

۱-۱۰) رشد بلور

بلورهای نیمرسانا به دو شکل حجمی^۱ و روآراستی^۲ رشد داده می شوند. روش چوکراسکی^۳، بریجمن^۴، ورنیوئل^۵، کروپالز^۶، استپانو^۷ و شناور سازی^۸ نمونه های از روشهای رشد بلور به شکل حجمی هستند که در تمام این روشها از شکل مذاب استفاده می شود. حدود ۹۰٪ از بلورهای سیلیکون در صنعت نیمرسانا با استفاده از تکنیک چوکراسکی رشد داده می شوند. تکنیک چوکراسکی، روش مؤثری برای رشد بلور سیلیکون در ساخت مدارات مجتمع است. بلورهای حجمی GaAs و InP معمولاً توسط روش بریجمن رشد داده می شوند ولی برای رشد GaAs در قطرهای بزرگ، روش چوکراسکی متداولتر است.

در روشهای روآراستی یک لایه تک بلور بر روی یک بلور دیگر رشد داده می شود. فرآیندهای روآراستی ابزار مهمی در کنترل کردن مقادیر ناخالصی در نیمرساناها است، که توسط آنها می توان کارائی قطعات الکترونی را بهینه کرد. بعنوان مثال می توان یک لایه نیمرسانا با چگالی پائین را بر

¹ Bulk
² Epitaxy
³ Czochralski
⁴ Bridgeman
⁵ Verneuil
⁶ Kyropoulos
⁷ Stepanov
⁸ Float Zone

روی همان نیمرسانا با چگالی بالا رشد داد (یعنی نوع n را بر روی نوع n^+ رشد داد). در این روش، می توان مقاومت سری زیر لایه را به طور چشمگیری کاهش داد. بسیاری از قطعات اپتوالکترونیکی بخصوص قطعاتی که با میکروویو و دستگاههای فوتونی کار می کنند، با این روش رشد داده می شوند. روآراستی فاز بخار^۱، فاز مایع^۲، MBE^۳ و روش شیمیایی سل-ژل تکنیکهای مختلف روآراستی هستند. در ادامه با توجه به اینکه نمونه های مورد مطالعه در این رساله به روش سل-ژل است، این روش به تفصیل مورد بحث قرار می گیرد.

۱-۱۱) روش سل-ژل

سل-ژل^۴ یکی از روشهای متداول در ساخت لایه های نازک است. اولین گزارش از فرآیند سل-ژل در سال ۱۸۴۶ از هیدرولیز و چگالش اکسید سیلیکا بوده است. پس از آن در سال ۱۹۵۳ لایه های SiO_2 تهیه و در سال ۱۹۹۳ جهت استفاده در شیشه های اتومبیل به تولید رسیدند. پوشش های غیر انعکاسی نیز در سال ۱۹۶۴ ساخته شدند. اولین تلاش سودمند جهت تشکیل لایه های منظم و یکپارچه و پایدار با کمک روش سل-ژل در سال ۱۹۸۴ توسط دیوید لوی^۵ و دیوید آنیر^۶ انجام پذیرفت [۷].

۱-۱۱-۱) فرآیند سل-ژل

فرآیند سل-ژل روش پیشرفته و نوینی است، که در سالهای اخیر بسیار مورد توجه قرار گرفته است. توانمندیهای قابل توجهی این روش در کنار کم هزینه بودن آن باعث روی آوری روز افزون به این روش شده است. عبارت سل-ژل برای توصیف دسته گسترده ای از فرایندها که در آن ژل ها از تعلیق

¹ Vapor-Phase Epitaxy (VPE)

² Liquid-Phase Epitaxy (LPE)

³ Molecular-Beam Epitaxy (MBE)

⁴ Sol- Gel

⁵ David Levy

⁶ David Avnir

کلوئیدی^۱ سل ها، تولید می شوند، بکار می رود. فرآیند فوق قادر است ساختارهای پودری، کپه ای، و لایه های نازک را به طور موفقیت آمیزی به انجام رساند. سل- ژل روش شیمیایی-فیزیکی است که عمل لایه نشانی از فاز مایع صورت می گیرد. می توان پارامترهای موثر در این فرآیند را به دو دسته کلی، پارامترهای شیمیایی و پارامترهای فیزیکی تقسیم بندی کرد [۸].

۱-۱۱-۲) پارامترهای شیمیایی

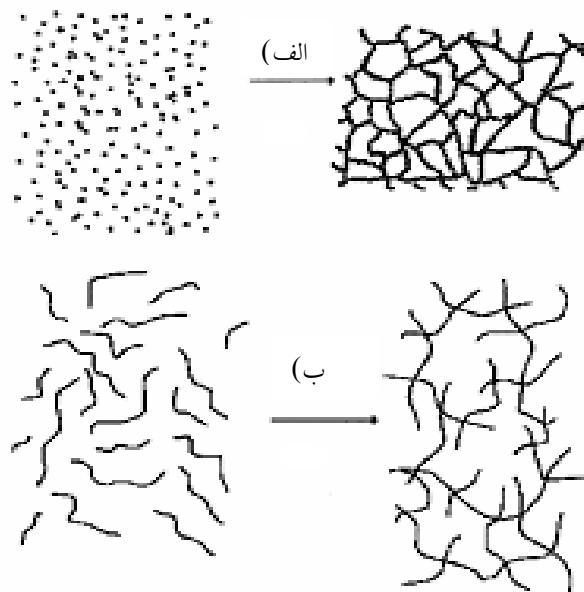
پارامترهای شیمیایی در این روش به طور مؤثر در مراحل تهیه سل که متناسب با پیش ماده های اولیه مورد نظر است، وارد می شوند. عوامل شیمیایی موثر در تهیه سل شامل هیدرولیز، چگالش، غلظت سل و pH محلول هستند.

۱-۱۱-۲-۱) تهیه سل

منظور از تهیه سل این است که پیش ماده در طی یک سری واکنشهای شیمیایی مانند هیدرولیز یا پلی مریزاسیون، قرار می گیرد و ذرات به صورت کلوئیدی و یا پلیمری در داخل مایعات پخش می شوند. کلمه سل طبق تعریف به پخش ذرات کلوئیدی و یا پلیمری در داخل مایعات اطلاق می شود. سل در این روش به دو سیستم سل کلوئیدی و سل پلیمری تقسیم می شود. شکل (۱-۱۳) فرآیند دو سیستم را نشان می دهد [۹]. در سیستم سل کلوئیدی، محلول تشکیل شده، غالباً شامل ذرات معلق کلوئیدی هستند. کلوئیدها دارای قطری در حدود $10^3 - 10^6$ A^o می باشند، که هر ذره کلوئید حاوی 10^3 تا 10^6 اتم می باشد [۱۰]. در سیستم سل پلیمری، محلول سل تشکیل شده غالباً شاخه های معلق پلیمری هستند که بیشتر در اثر واکنش بین آلکاکسیدها بوجود می آیند. در نهایت سل- ژل فرآیندی است که در طی خودآرایی و به هم پیوستگی خود، باعث تشکیل نانو مواد می شود. ویژگی محلول سل، شفاف بودن آن است که دلیل آن پراکنده بودن ذراتی با ابعاد نانو در درون محلول می باشد. مواد اولیه در روش سل- ژل اغلب شامل فلزات و یونهای فلزی هستند، ولی

¹ Colloidal Suspension

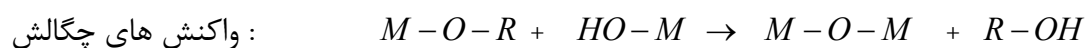
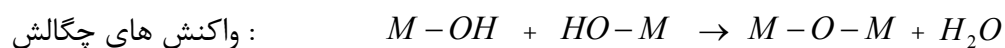
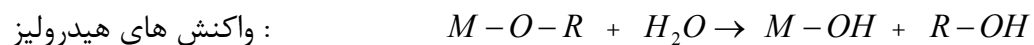
گاهی از عناصر دیگر که به وسیله یونها و رادیکالهای مختلف احاطه می شوند، نیز استفاده می شود.



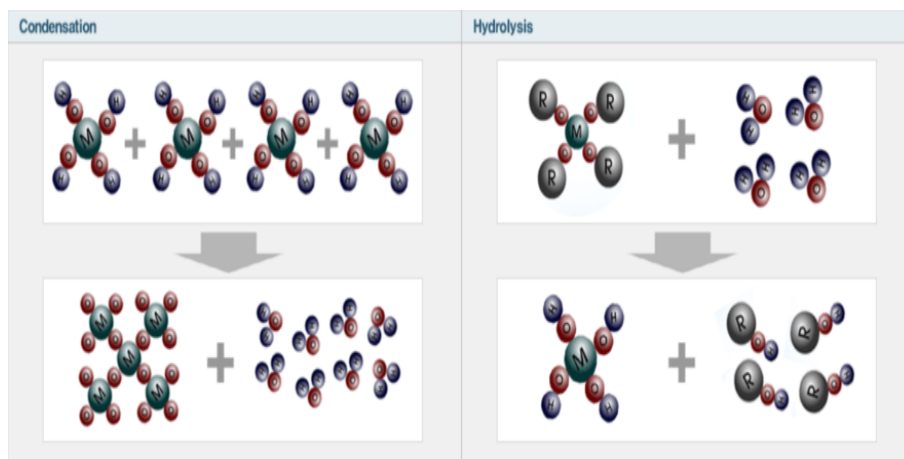
شکل (۱-۱۳): (الف) ژل کلوئیدی، (ب) ژل پلیمری [۹].

۱-۱۱-۲-۲ ژلاسیون

سل ها معمولاً با استفاده از آلکوکساید های فلزی تهیه می شوند. با توجه به اینکه مواد آلی فلزی^۱ غیر قابل حل در آب هستند، آلکوکساید ها در الکل بدون آب حل می شوند. با اضافه کردن آب به سل، واکنش های پلی مریزاسیون آغاز می شود [۱۱]. این فرایند به وسیله دو واکنش عمده هیدرولیز و چگالش انجام می شود. این واکنش ها عبارتند از:



فرآیندهای فوق در شکل (۱-۱۴) نشان داده شده است [۱۲]. در واکنش های فوق R از گروه آلکیل ها مانند متیل، اتیل، پروپیل و... می باشد. واکنش هیدرولیز با اضافه کردن آب به سل اتفاق می افتد. در طی این فرایند، گروه های آلکوکساید (OR) مرحله به مرحله به وسیله گروه های هیدروکسید جایگزین می شوند. در اینجا، نسبت هیدرولیز به چندین فاکتور بستگی دارد. در واقع واکنش می تواند به طور موفقیت آمیزی با افزایش در چگالی بار فلز، تعداد یون های فلزی متصل شده هیدروکسید-لیگاند و اندازه گروه های آلکیل به وجود آید. بر عکس، زمانی که تعداد هیدروکسید-لیگاند، با هماهنگ کردن M افزایش می یابد یا زمانی که PH، دما یا غلظت آب و حلال به تسهیل واکنش کمک می کنند، می توان از واکنش جلوگیری کرد.



شکل (۱-۱۴): واکنش هیدرولیز و چگالش [۱۲].

۱-۱۱-۲-۳) ماندگی^۱ سل

یک عامل مهم در میزان ویسکوزیته (چسبندگی) ماندگی سل است. بررسی های انجام شده نشان می دهد که چسبندگی سل با گذشت زمان، افزایش می یابد. این عامل مهمی برای افزایش مرحله ژلاسیون است. شبکه ژل در طی فرآیند پلیمریزاسیون بیشتر تثبیت می شود و دفع حلال ها به دلیل جمع شدگی ژل در طول ماندگی سل رخ می دهد و باعث ایجاد تراکم و چگالی بالاتر می گردد.

^۱Aging

۱-۱۱-۲-۴) واکنش چگالش

این واکنش شامل گروه های هیدروکسید و نتیجه به هم پیوستگی های M-O-M است که به ترتیب باعث ایجاد یک شبکه سه بعدی (ژل) و افزایش درجه اتصال عرضی^۱ می شود. سپس حالت ژل، به شکل یک ماده کشسان چسبنده، که ترکیبی از فازهای جامد و مایع است تبدیل می شود. این ساختار به طور قوی به میزان آب سیستم، اسید یا بازی که به عنوان کاتالیزور در سیستم به کار رفته است، بستگی دارد. به طور کلی واکنش چگالش در حضور آب یا الکل انجام می شود. مورفولوژی ژل متأثر از دما، نسبت آب و الکل و مقدار اسید و بازی است که به عنوان کاتالیزور در سیستم به کار می رود. برای تهیه اکسید روی با روش سل-ژل می توان از پیش ماده های پودر استات روی دو هیدراته $(Zn(CH_3COO)_2 \cdot 2H_2O)$ و نیترات روی هگزهیدرات $(Zn(NO_3)_2 \cdot 6H_2O)$ و پودر کلرید روی $(ZnCl_2)$ استفاده کرد. ولی در اکثر موارد از استات روی دو هیدراته و از الکل های مختلف به ویژه از الکل های مانند ۲- متوکسی اتانول $(CH_3OCH_2CH_2OH)$ و ایزوپروپانول $(CH_3CH(OH)CH_3)$ استفاده می شود. و همچنین برای پایدارسازی از مونواتانول آمین (NH_2CH_2OH) و یا دی اتانول آمین استفاده می شود [۱۶، ۱۵، ۱۴، ۱۳]. بعد از یک روز ماندن در شرایط محیطی کنترل شده، سل آماده لایه نشانی است.

۱-۱۱-۲-۵) اثر PH

PH فاکتور مهمی در فرآیند سل-ژل می باشد. سل های دارای PH بازی، ابتدا آب عامل بازی هیدروکسید (OH^-) را تولید کرده و بعد با جایگزین شدن این یونها با گروه آلکوکسی (OR^-) واکنش هیدرولیز را بوجود می آورد. این نوع ترکیبات دارای پیوند شاخه ای پلیمری بسیار زیاد می باشند. بعلاوه افزایش ویسکوزیته محلول، لایه ها دارای ضخامت بالاتری هستند. سل های اسیدی و یا آنهایی که از کاتالیزورهای اسیدی استفاده می کنند به علت وجود عامل اسیدی (H^+) گروه آلکوکسی به

^۱Cross linking degree

سرعت پروتون های H^+ را جذب کرده و چگالی ابر الکترونی M^+ کاهش می یابد و لذا محیط برای پیوستن گروه هیدروکسید (OH^-) در جایگاه آلوکسی مساعد می شود. بیشتر پیوند ها در این حالت به صورت پلیمری می باشند.

۱-۱۱-۳) پارامترهای فیزیکی

پارامترهای فیزیکی موثر در روش سل-ژل عبارتند از: روش انباشت، ویژگی ساختاری زیر لایه (آمورف، بلوری و چند بلوری)، چسبندگی و دما (خشک سازی و بازپخت) که در ادامه در خصوص بعضی از این فاکتورهای مهم بحث خواهد شد.

۱-۱۱-۳-۱) انباشت

یکی از امتیازات منحصر به فرد موجود در روش سل-ژل، وجود تکنیکهای گوناگون برای پوشش دهی بسترهای مختلف با سطوح متفاوت است. در مرحله سل، فیلم با استفاده از تکنیک های رایج ساخته می شود. بسته به ماهیت حلال، دما و روش لایه نشانی، بیشترین مقدار حلال از فیلم آزاد شده و ژلاسیون فیلم را تشکیل می دهد. انباشت از طریق سل-ژل با روشهای متعددی از قبیل غوطه وری^۱، چرخشی^۲، الکتروفورز^۳ و ترموفورز^۴ صورت می گیرد. چون در این رساله از تکنیک غوطه وری برای تهیه نمونه ها استفاده شده است، این روش به تفصیل بیان می شود.

این تکنیک یکی از مهمترین و اقتصادی ترین تکنیکهای پوشش دهی نمونه ها و قطعات بزرگ می باشد. ابتدا زیر لایه با سرعتی کنترل شده به داخل یک ظرف که حاوی سل است غوطه ور شده و با همان سرعت به طور یکنواخت خارج می شود و بدین صورت عملیات لایه نشانی اولیه انجام می گیرد. در این روش به دلیل حرکت عمودی زیر لایه در هنگام حرکت، امکان لرزش وجود دارد که

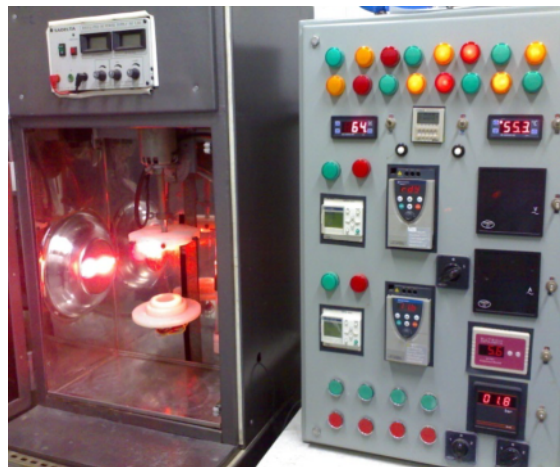
¹ Dip Coating

² Spin Coating

³ Electrophoresis technique (EP)

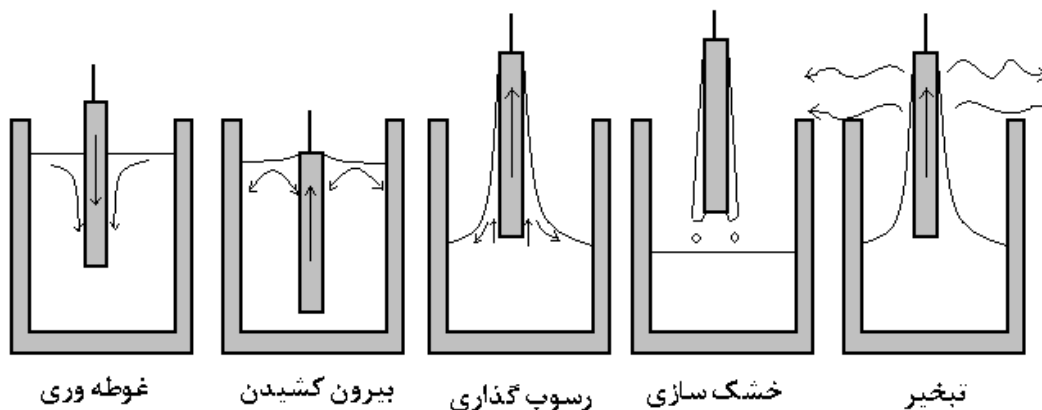
⁴ Thermophoresis

این لرزش می تواند کیفیت لایه ها را تحت تاثیر قرار دهد. روشی که ما در این رساله از آن استفاده کردیم اساسش بر ثابت نگه داشتن زیر لایه است. با حرکت ظرف حاوی سل در راستای عمودی، عمل انباشت صورت می گیرد. شکل (۱-۱۵) سیستم انباشت غوطه وری آزمایشگاه سل - ژل دانشگاه گیلان را نشان می دهد.



شکل (۱-۱۵): سیستم انباشت غوطه وری آزمایشگاه سل - ژل دانشگاه گیلان

بر اساس تقسیم بندی رایج، لایه نشانی با تکنیک غوطه وری شامل مراحل غوطه وری عمودی، بیرون کشیدن، رسوب گذاری، تبخیر و خشک سازی است. شکل (۱-۱۶) مراحل پنج گانه فوق را نشان می دهد [۱۷].

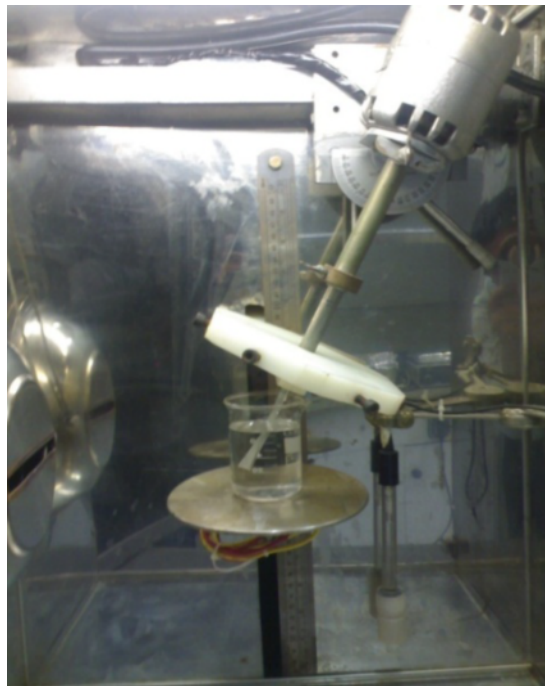


شکل (۱-۱۶): مراحل مختلف انباشت با تکنیک غوطه وری [۱۷].

سیال در حرکت زیر لایه در داخل سل به ویژه هنگام بیرون کشیدن، یک سطح مرزی ایجاد می کند که به سطوح مرزی داخلی و خارجی تقسیم می شوند. سطوح داخلی با حرکت زیر لایه

به آن چسبیده و به سمت بالا حرکت می کنند و لایه دیگر به طرف پایین و به ظرف حاوی سل بر می گردد. بررسی لایه نشانی غوطه وری اولین بار توسط لاندائو و لویچ^۱ ارائه شد و سپس این تحلیل بطور گسترده ای تعمیم یافت.

از جمله کاربردهای تکنیک غوطه وری می توان به تولید سیستمهای کنترل انرژی خورشیدی، پوششهای ضد انعکاسی به کار رفته در پنجره ها، پوششهای اپتیکی، پوششهای دی الکتریک و نیز ساختن چندلایه ایها اشاره کرد. لایه نشانی به کمک تکنیک غوطه وری را به شکل دیگر هم می توان انجام داد که به آن غوطه وری زاویه ای گفته می شود. در این روش، فرو بردن زیرلایه به درون محلول و نیز بیرون کشیدن آن، در زاویه ای خاص (غیر از حالت عمود) رخ میدهد. امتیاز این روش هم، امکان بیشتر برای کنترل ضخامت فیلم است که به کمک آن می توان خواص اپتیکی فیلم ها را به راحتی کنترل کرد. شکل (۱-۱۷) تکنیک غوطه وری زاویه ای را نشان می دهد.



شکل (۱-۱۷): تصویر روش غوطه وری زاویه ای آزمایشگاه سل-ژل دانشگاه گیلان.

^۱ Landau and Levich

۱-۱۱-۳-۲) خشک سازی

فرآیند خشک سازی شامل جداسازی حلال از سیستم ژل است، که همزمان با فروپاشی ساختار ژل انجام می شود. این فرآیند تحت شرایطی که دما، فشار و رطوبت ثابت است انجام می پذیرد. برای بدست آوردن پوششها، پودر های سرامیکی و یا نمونه های یکپارچه، ژل آمورف بایستی خشک شود. در فرآیند لایه نشانی به روش سل-ژل بیشترین دشواری ها در مرحله خشک کردن ایجاد می شود. زیرا در این فرآیند لایه ها برای عملیات لایه نشانی بعدی آماده می شوند و عمدتاً بوسیله جابجایی مقادیر زیادی از حلال در شبکه پلیمری بوجود می آیند. این فرآیند وابستگی زیادی به نوع حلالها، پیش ماده به کار گرفته شده و کاتالیزورهای مورد استفاده، دارد. در صورت درست صورت نگرفتن این فرآیند، رسوبات، ترکیبات آلی، کاتالیزورها و حتی حلالها باقی مانده در انباشت اول در هنگام لایه نشانی بعدی باعث کشیده شدن لایه قبلی به داخل محلول و نازک شدن لایه می شود. با انجام عملیات خشک سازی مناسب در هنگام گرمایش، تبخیر مواد از لایه های زیرین کمتر بوده و در پی آن لایه های سطحی یکدست تر با حفره های کمتری ایجاد خواهد شد. یک فرآیند خشک سازی مناسب باعث افزایش شفافیت و جهت گیری اولیه مناسب برای ساختار بلوری می شود [۱۸]. برای انجام عملیات خشک سازی می توان از دستگاههای مختلفی مانند کوره، تابش IR و امواج ماکروویو استفاده کرد. با توجه به مواد مورد استفاده و قابلیت هر یک از دستگاهها می توان بهترین روش خشک سازی را انتخاب نمود.

۱-۱۱-۳-۳) بازپخت

در این فرآیند لایه ها برای رسیدن به ساختار کریستالی مورد نظر در دماهای بالا قرار می گیرند. این فرآیند بیشتر برای مطالعه ساختار بلوری و رفتار آنها با اعمال دماهای مختلف بکار می رود. دما و زمان اعمال عملیات باز پخت بر ساختار بلوری ایجاد شده تاثیر گذاشته و به طبع موجب تغییرات در گاف نواری نمونه می شود.

۱-۱۱-۴) مزایا و کاربردهای روش سل-ژل

کاربردهای فرآیند سل-ژل به دلیل استفاده از شکل های متفاوتی است که مستقیماً از حالت ژل ترکیب شده (مونولیت ها، فیلم ها، فیبرها و پودرها) با کنترل فرآیند ساختاری بدست می آید. فیلم ها و پوشش های نازک نخستین کاربردهای تجاری تکنولوژی سل-ژل را ارائه می دهند. روش سل-ژل برای انباشت روی زیر لایه هائی که دارای تقارن محوری هستند مانند لوله ها، میله های نازک فلزی و فیبرها که نمی توان به آسانی با دیگر فرآیندهای لایه نشانی مرسوم کنترل شوند، قابل استفاده است. با توجه به امکان ایجاد ساختارهای متخلخل در این روش، می توان از آن در ساخت قطعات مورد استفاده در تصفیه کننده ها، عایق ها، حسگرها و سطوح ضد بازتاب استفاده نمود. در ادامه بعضی از کاربردهای این روش را اشاره خواهیم کرد.

الف) لایه های عایق کننده

مواد نانو کریستالی سنتز شده از طریق تکنیک سل-ژل دارای تخلخل زیادی هستند که باعث به دام انداختن هوا به داخل این منافذ می شود. از اینرو می توان در ساخت لایه هایی که مخصوص عایق بندی هستند مورد استفاده قرار داد و در نتیجه هزینه های گرمایش و سرمایش را به طور قابل توجهی کاهش داد.

ب) فسفرها یا مواد تابنده

قدرت تمایز یک نمایشگر تا حد زیادی وابسته به کوچکی جزء نشانگرهای آن است. این نشانگرها اساساً از موادی موسوم به مواد تابنده ساخته شده اند که با تابش جریان الکترونها به آنها شروع به تابش می کنند. بلورهای سلنید روی ($ZnSe$)، سولفید روی (ZnS) و تلورید سرب ($PbTe_2$) که از طریق سل-ژل سنتز می شوند قدرت تفکیک نمایشگرها را بهبود بخشیدند [۱۹].

ج) پنجره های اپتیکی

در مناطقی با آب و هوای گرم، اگر پنجره ها علاوه بر داشتن چشم اندازی با نور کافی بتوانند از ورود بیش از حد انرژی حرارتی خورشید و از تابش فرابنفش جلوگیری کنند، در مصرف انرژی صرفه جویی خواهد شد. با تکنولوژی سل-ژل می توان به آسانی و ارزان، پنجره هایی را با مشخصات مورد نظر و شرایط کاری خاص تهیه کرد. اکسید روی (ZnO) به دلیل عبور خوب تابش های مرئی و جذب تابش های فرابنفش در این پنجره ها کاربرد فراوانی دارد.

د) سلولهای خورشیدی

تبدیل نور خورشید به انرژی، جزء جدیدترین فناوری های روز جهان است. مهمترین فناوری موجود در زمینه انرژی خورشیدی فناوری فتوولتالیک است. سلولهای فتوولتالیک که غالباً از نوع نیم رسانای سیلیکونی است، مستقیماً با تابش فوتون و نفوذ آن در درون سلول می تواند با آزاد کردن الکترون منجر به ایجاد جریان الکتریکی گردد. در این فرآیند انرژی خورشیدی به انرژی الکتریکی تبدیل می شود. فیلم های نازک اکسید روی (ZnO) به دلیل داشتن پایداری در حضور محیط پلاسمای هیدروژن (پدیده انعکاس در طول موجهای بلند به دلیل لبه جذب پلاسمای) در فرآیند ساخت سلولهای خورشیدی سیلیکونی به عنوان پوشش های شفاف و ضد بازتابنده کاربرد فراوانی دارند.

ه) پوششهای حفاظتی

به عنوان یک لایه حفاظتی برای مقاوم شدن و کاهش فرسایش ماده مورد نظر می توان از پوششهای نازک که طی فرآیند سل-ژل ایجاد می شوند، استفاده نمود.

و) سدهای نفوذی

برای ممانعت از افت خواص مکانیکی و الکتریکی در مدارهای مجتمع می توان از لایه های نازک رشد یافته به روش سل-ژل استفاده نمود.

ز) پودر ها و دانه ها

با روش سل-ژل می توان به پودرهای اکسید فلزی با خلوص بسیار بالا دست یافت. به طور مثال پودر اکسید روی (ZnO) با خواص مناسب، یک رسانای نوری در الکتروفوتوگرافی بعنوان واریستور و در ساخت سرامیک ها محسوب می شود. همچنین از آن می توان در ساخت حافظه های فروالکتریکی و مدارات مجتمع مانند دیودها و خازنها استفاده نمود.

ح) فیلم های متخلخل

در فرآیند سل-ژل فیلم های تولید شده تخلخل بالایی دارند. این گونه فیلم ها می توانند کاربردهای گسترده و مؤثری در ساخت حسگرها و فیلترها داشته باشند. فیلم های اکسید روی (ZnO) تهیه شده با روش سل-ژل می توانند حسگر خوبی برای گازهای CH_3 ، CO و H_2 باشند.

فصل دوم

اسپینترونیک

در الکترونیک، خواص فیزیکی همچون ویژگیهای ترابردی، نوری، فونونی و غیره ناشی از بار الکترونهاست ولی در اسپینترونیک علاوه بر ویژگیهای بار از خواص اسپینی حاملها (الکترون/حفره) نیز استفاده می شود. دامنه کاربرد مواد مختلف از جمله فلزات، نیمرساناها و حتی عایقها (چه در ساختار همگون و چه در ساختار غیر همگون) در اسپینترونیک زیاد است. هدف اصلی در اسپینترونیک پیدا کردن روشی مؤثر برای کنترل خواص الکترونی مواد همچون جریان یا جمع کردن بار توسط اسپین یا میدان مغناطیسی است. کاربرد این ویژگی را امروزه در دیودها، ترانزیستورها (دو قطبی - اثر میدان) مدارات مجتمع (IC) و ... می توان مشاهده کرد. کمیات اسپینترونیک جنبه ماکروسکوپی و میکروسکوپی دارند. کمیات ماکروسکوپی به راحتی در آزمایشگاه قابل اندازه گیری هستند که باید توسط کمیات میکروسکوپی توصیف شوند و منشاء کمیات ماکروسکوپی هستند از جمله برهمکنشهای مغناطیسی همچون برهمکنشهای زیمنی (بهنجار و ناهنجار)، اسپین - مدار، فوق ریز و زمان واهلش اسپینی.

بطور خلاصه می توان گفت که اسپینترونیک یا اسپین-الکترونیک به مطالعه و نقش اسپین الکترون، حفره و حتی هسته در فیزیک حالت جامد بر می گردد، و دستگاههای احتمالی مشخصاً از خواص اسپینی علاوه بر بار الکتریکی استفاده می کنند. ترابرد اسپینی^۱ و واهلش اسپینی^۲ در فلزات و در نیمرساناها کاربرد فراوانی در تکنولوژی الکترونیک دارند. پیشرفت در صنعت الکترونیک آنچنان است که در هر ۱۸ ماه تعداد تراشه های مورد استفاده در کامپیوترها دو برابر می شوند، که این مستلزم پیشرفت علم است. عقیده بر این است که دستگاههای بر پایه اسپینترونیک که از انتقال اطلاعات بر اساس درجه اسپینی بهره می گیرند در مقابل الکترونیک معمولی، دارای مصرف انرژی کمتر و سرعت بالاتری هستند.

¹ Spin transport

² Spin relaxation

۲-۲) مقاومت مغناطیسی^۱

در فیزیک حالت جامد، یکی از مسائل بسیار مهم، پدیدهٔ ترابرد حاملها (الکترون/حفره) است که به صورت کلاسیکی یا کوانتومی بررسی می شود. تئوری کلاسیکی ترابرد بخصوص ترابرد مغناطیسی بارها توسط ویلسون و زیمن بررسی شده در صورتی که تئوری کوانتومی آنها توسط لوتینگر، کوهن و لیفشیت فرمولبندی شده است [۲۰، ۲۱]. بسیاری از مسائل جالب و البته پیچیدهٔ ترابرد در اندازه های میکروسکوپی و ماکروسکوپی از جمله مسیر آزاد میانگین، زمان واهلش، تحرک پذیری، رسانندگی و مقاومت توسط روابط کلاسیکی یا نیمه کلاسیکی قابل بررسی است. مقاومت مغناطیسی عبارت است از تغییر (افزایش/کاهش) مقاومت الکتریکی ماده (فلز یا نیمه رسانا و ...) وقتی که در داخل میدان مغناطیسی قرار می گیرد. میدان مغناطیسی اعمالی را می توان به دو مؤلفهٔ عمودی و موازی با جریان الکتریکی تصویر کرد. محاسبات تئوری و دادههای تجربی نشان می دهند که مؤلفهٔ موازی هیچ تاثیری بر روی مقاومت مغناطیسی ندارد و تنها مؤلفهٔ مؤثر، مؤلفهٔ عمودی آن است [۲۰]. مقاومت مغناطیسی عرضی طبق تعریف برابر است با $\Delta\rho/\rho_0 = (\rho(H) - \rho_0(H=0))/\rho_0$ که $\rho(H)$ و ρ_0 به ترتیب مقاومت ماده در حضور و عدم حضور میدان مغناطیسی است و مقاومت مغناطیسی طولی نمونه برابر صفر است. محاسبات تئوری نشان می دهد که در میدان مغناطیسی ضعیف که $\langle\omega\tau\rangle \ll 1$ ، مقاومت مغناطیسی برابر [۲۰]:

$$\Delta\rho/\rho_0 = (e/m^*)^2 \left(\frac{\langle\tau^2\rangle^2}{\langle\tau\rangle^2} \right) (A-1)B^2 \quad (1-2)$$

که B میدان مغناطیسی، τ زمان واهلش کل حامل و $A = \frac{\langle\tau^3\rangle\langle\tau\rangle}{\langle\tau^2\rangle^2}$ است. برای نمونه هایی که زمان واهلش در آنها مستقل از انرژی حاملها است، $A=1$ و مقاومت مغناطیسی برابر صفر است. در میدان مغناطیسی قوی $\langle\omega\tau\rangle \gg 1$ ، مقاومت مغناطیسی برابر است با:

$$\Delta\rho/\rho_0 = \langle 1/\tau \rangle \langle \tau \rangle - 1 \quad (2-2)$$

¹ Magnetoresistance (MR)

یکی از روشهای که می توان سطح فرمی را بررسی کرد، استفاده از اندازه گیری مقاومت مغناطیسی است. در میدان مغناطیسی قوی وقتی که $(\omega \tau \gg 1)$ است مقاومت مغناطیسی یک بلور ممکن یکی از حالت های زیر باشد:

۱) مقاومت مغناطیسی با چرخش بلور، به میدان مغناطیسی خارجی وابسته نیست به عبارت دیگر

مقاومت مغناطیسی به حالت اشباع می رسد (بلور همگن^۱ مغناطیسی است).

۲) مقاومت مغناطیسی با چرخش بلور، به میدان مغناطیسی خارجی وابسته است و با افزایش میدان

افزایش می یابد. به عبارت دیگر مقاومت مغناطیسی به حالت اشباع نمی رسد.

۳) مقاومت مغناطیسی بلور در بعضی از جهتها ممکن است به حالت اشباع برسد ولی در بعضی

جهت های دیگر نرسد، یا عبارتی به میدان مغناطیسی وابسته باشد یا نباشد. چنین بلوری را غیر

همگن^۲ مغناطیسی گویند.

بلورهای نوع اول دارای سطح فرمی بسته ای هستند همانند، Al, In, Na و Li. بلورهای نوع دوم دارای

تعداد الکترون و حفره^۱ یکسانی هستند همچون Bi, Sb, W و Mo. بلورهای نوع سوم دارای سطح فرمی

باز هستند که در بعضی از جهتها مدارهای حرکت حاملها باز است مثل، Cu, Ag, Au, Mg, Zn, Cd, Ga.

Pb و Sn, Tl. مقدار مقاومت مغناطیسی ابزاری است که نشان می دهد سطح فرمی یک بلور بسته است

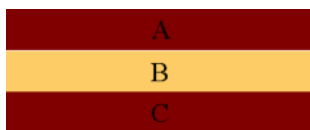
یا تعدادی از مدارات باز هستند و این مدارات باز در چه سمتی قرار دارند [۲۲].

¹ Isotropic

² Anisotropic

۳-۲) مقاومت مغناطیسی قوی (GMR)^۱

مقاومت مغناطیسی قوی در سال ۱۹۸۸ توسط دو دانشمند اروپائی بنامهای پیتر گرونبرگ^۲ (در مرکز تحقیقاتی KFA در جولیش^۳ در کشور آلمان) و آلبرت فرت^۴ (در دانشگاه پاری-سود^۵ در کشور فرانسه) به طور مستقل کشف شد [۲۳ و ۲۴]. آنها نشان دادند که مقاومت مغناطیسی در لایه های نازک چند لایه ای با اعمال میدان مغناطیسی افزایش می یابد و بدین صورت اسپینترونیک پدیدار شد. باید یاد آور شد که GMR صدها برابر از MR قوی تر است. شکل (۱-۲) ساختار ساده یک ماده GMR را نشان می دهد که از سه لایه تشکیل شده است. لایه ABC به ترتیب یک ماده فرومغناطیس-غیر مغناطیس-فرومغناطیس است. لایه B ضخامتهای مختلفی دارد و معمولاً کمتر از ۵۰ انگستروم است. بطور مثال NiFe - Au - NiFe ، Co - Cu - Co ، و Fe - Cr - Fe نمونه های از GMR هستند.



شکل (۱-۲): طرح شماتیک یک نمونه GMR

اگر جریان اعمالی موازی (عمود) با سطوح فصل مشترک باشد آن را به صورت CIP^۶ (CPP^۷) نمایش می دهند. بیشتر دادهای تجربی بر اساس آرایش هندسی CIP است که در صنعت کاربرد فراوانی بخصوص در ساختار هدهای مغناطیسی دارد و مقاومت مغناطیسی قوی را بوجود می آورد. ولی در CPP به خاطر اینکه ضخامت چند لایه ای بسیار کم است، مقاومت مغناطیسی کمتری نسبت به CIP دارد. از این رو آشکار سازی آن چندان کار آسانی نیست. شکل (۲-۲) طرح شماتیک GMR برای CIP و CPP را نشان می دهد.

^۱ Giant MagnetoResistance (GMR)

^۲ Peter Gruenberg

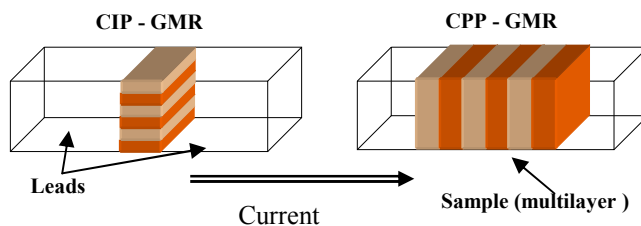
^۳ Julich

^۴ Albert fert

^۵ Pari-Sud

^۶ Current In Plan (CIP)

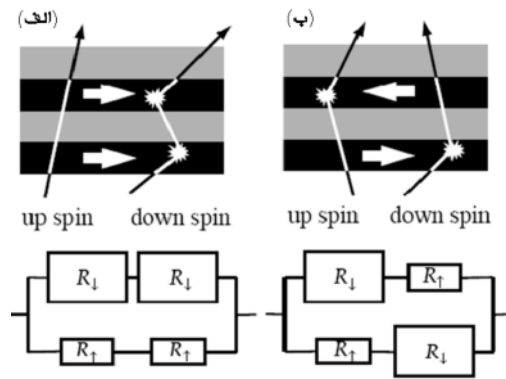
^۷ Current Perpendicular to Plan (CIP)



شکل (۲-۲): طرح شماتیک GMR برای CIP و CPP

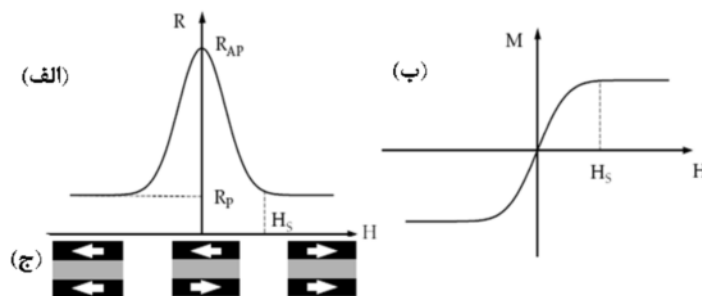
پدیده GMR بر اساس مدل مات^۱ قابل توضیح است. این تئوری در سال ۱۹۳۶ برای بیان چگونگی افزایش مقاومت فلزات مغناطیسی تا بالای دمای کوری ارائه شد [۲۵، ۲۶]. این مدل شامل دو اصل است. اصل اول به رسانندگی فلزات براساس مدل دو سیالی با اسپین بالا و اسپین پائین می پردازد. اگر همه شرایط یکسان باشد رسانندگی برای سیالات اسپین بالا و اسپین پائین یکسان خواهد بود و این دو سیال به هم تبدیل نمی شوند، یعنی اسپین بالا همیشه بالا و اسپین پائین همیشه پائین می ماند. اصل دوم در مورد فلزات مغناطیسی است. مقاومت الکتریکی ناشی از پراکندگی حاملها است. پراکندگی طبق قانون پلائی فرمی با تعداد حالات متناسب اند. می دانیم که حاملها در فضای فاز که ترکیبی از فضای حقیقی و انرژی است در حال حرکت هستند. اگر حاملهای تزریقی به فلز مغناطیسی حالت مجاز در فضای انرژی برای اشغال شدن پیدا نکنند طبق اصل طرد پائولی مکان ذرات در فضای حقیقی فاز باید مرتباً تغییر کند و در نتیجه پراکنده نمی شوند و جریان را بوجود می آورند. اگر حاملهای تزریقی، حالتی مجاز را در فضای فاز پیدا کنند پراکنده شده و مقاومت فلز زیاد می شود. در فلزات مغناطیسی تعداد اسپین بالا و پائین یکسان نیست. حاملهای تزریقی دارای اسپین هم جهت با مغناطش بعلت عدم دسترسی به حالت کوانتمی (که توسط الکترونهای ماده اشغال شده اند) پراکنده نمی شوند ولی حاملهای تزریقی با اسپین مخالف مغناطش ماده بعلت دسترسی حاملها به حالتی مجاز کوانتمی که فلز به حاملها می دهد پراکنده شده و مقاومت افزایش پیدا می کند. شکل (۲-۳) منشأ GMR رانشان می دهد.

^۱ Mott



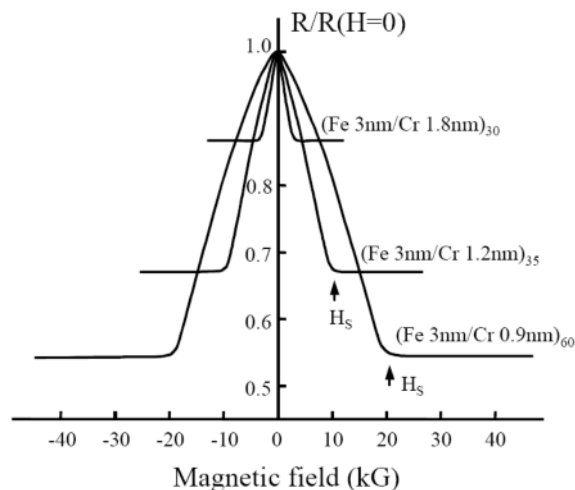
شکل (۲-۳): منشأ GMR بر اساس مدل دوسیالی. الف) اگر مغناطش دو لایه در یک جهت باشد، طبق قضیه دوم مات اسپین های موافق (مخالف) مغناطش پراکنده نمی شوند (می شوند). در نتیجه مقاومت کم (زیاد) است. ب) اگر مغناطش دو لایه مختلف جهت باشد، طبق قضیه دوم مات اسپین های بالا و پائین پراکنده شده و در نتیجه مقاومت فلز زیاد است [۲۵].

GMR به هر شکلی که مورد استفاده قرار گیرد دارای ویژگیهایی است از جمله وابستگی GMR به میدان مغناطیسی [۲۵]، دما [۲۷] و ضخامت ماده غیر مغناطیسی [۲۶]. شکل (۲-۴) وابستگی GMR به میدان مغناطیسی خارجی را نشان می دهد. شکل های (الف) و (ب) مقاومت مغناطیسی و مغناطش چند لایه را بر حسب میدان مغناطیسی خارجی نشان می دهند. شکل (ج) آرایش مغناطش نمونه را در حالت موازی همجهت و غیر همجهت نشان می دهد. H_s حداقل میدان مغناطیسی لازم برای اشباع نمونه است.



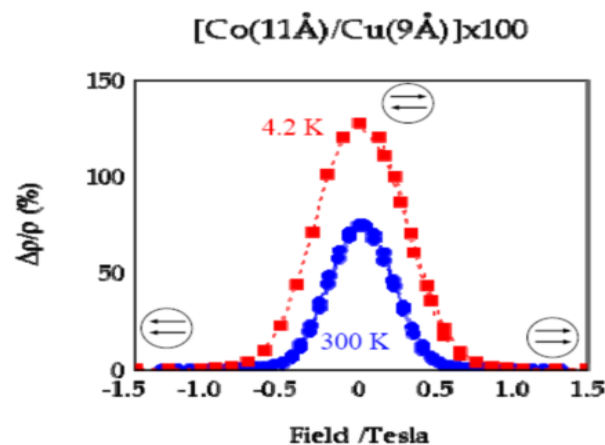
شکل (۲-۴): وابستگی GMR به میدان مغناطیسی و ماده مغناطیسی. الف) تغییر مقاومت الکتریکی برای ساختار مغناطیسی چند لایه بر حسب تابعی از میدان اعمالی. $GMR = (R_{AP} - R_P / R_P)$ به حدود ۲۰٪ نیز می رسد که خیلی از اثر MR بیشتر است. ج) آرایش مغناطش لایه ها بر حسب میدان خارجی. ب) منحنی پسماند ماده مغناطیسی. H_s میدان اشباع است [۲۵].

شکل (۵-۲) نشان می دهد که مقاومت مغناطیسی چگونه به ضخامت لایه میانی GMR وابسته است. این شکل نشان می دهد که در دمای ۴/۲ کلوین هر چه ضخامت لایه میانی بیشتر می شود مقاومت مغناطیسی کاهش می یابد زیرا در ضخامتهای زیاد احتمال چرخیدن اسپینهای پلاریزه شده بیشتر است.



شکل (۵-۲): وابستگی GMR به ضخامت لایه غیر مغناطیسی [۲۶].

شکل (۶-۲) وابستگی مقاومت مغناطیسی به دما را نشان می دهد. شکل نشان می دهد که هر چه دمای محیط کمتر باشد، مقاومت مغناطیسی نیز افزایش می یابد زیرا اثر پراکندگی مربوط به برهمکنش حاملها به میدان مغناطیس، قویتر از اثر پراکندگی برهمکنشهای دیگر همچون فونونها، ناخالصیها و در رفتگیها می شود و در نتیجه مقاومت نیز افزایش پیدا می کند (اثر کاندو^۱).



شکل (۶-۲): وابستگی GMR به دما [۲۷].

^۱ Kondo

لازم به ذکر است که GMR به پارامترهای دیگری نیز از جمله ضخامت ماده مغناطیسی [۲۸]، ترکیبات عنصری مواد مغناطیسی [۲۹]، زبری سطح [۳۰، ۳۱]، ناخالصیها [۳۲] و زاویه مغناطش [۳۳، ۳۴] نیز وابسته است.

۴-۲) مقاومت مغناطیسی تونلی (TMR)^۱

جولی ار^۲ در سال ۱۹۷۵ این پدیده را کشف کرد [۳۲، ۳۳]. ساده ترین شکل TMR به صورت یک سیستم سه لایه ای نازک A، B و C است، که لایه های نازک A و C ماده فرومغناطیس همانند آهن، کبالت در صورتیکه B یک عایق همانند Al_2O_3 و $SrTiO_3$ است. اولین TMR به صورت Co/Ge یا Fe/Ge ساخته شده است. روشهای مختلفی برای منشأ TMR وجود دارد که به رفتار حاملها در زمان تونل زنی بر می گردد. یکی از این مدلها روش جولی ار است که از هامیلتونی تونل زنی برای توصیف رفتار ماده استفاده شده است که توسط تدر^۳ و مسروی^۴ مطرح شده بود. این فرضیه بر دو اصل استوار است، اول اینکه اسپین حاملها در طول تونل زنی در ماده عایق که ممان مغناطیسی وجود ندارد تغییر جهت نمی دهد. بعبارتی اسپین حاملهای اکثریت (اقلیت)، به اسپین حاملهای اقلیت (اکثریت) تبدیل نمی شود. دوم اینکه، در سیستم لایه های نازک فرضیه دوسیالی وجود دارد سیالی با اسپین بالا (پائین) که جریان اکثریت (اقلیت) را تشکیل می دهد و اینکه چگالی جریان هر سیال به چگالی حالتیهای آن سیال رابطه مستقیم دارد. بنابراین اگر سیستم در حالت موازی و هم جهت باشد، چگالی جریان متناسب است با $D_1^\uparrow D_2^\uparrow + D_1^\downarrow D_2^\downarrow$ که D_n^σ چگالی جریان ناحیه (۱ یا ۲) با حامل اکثریت (\uparrow یا \downarrow) است. در حالت موازی و غیر هم جهت، چگالی جریان متناسب $D_1^\uparrow D_2^\downarrow + D_1^\downarrow D_2^\uparrow$ است. مقاومت مغناطیسی (تفاضل چگالی جریان موازی هم جهت با غیر هم جهت) برابر است با:

¹ Tunneling Magnetoresistance

² Julliere

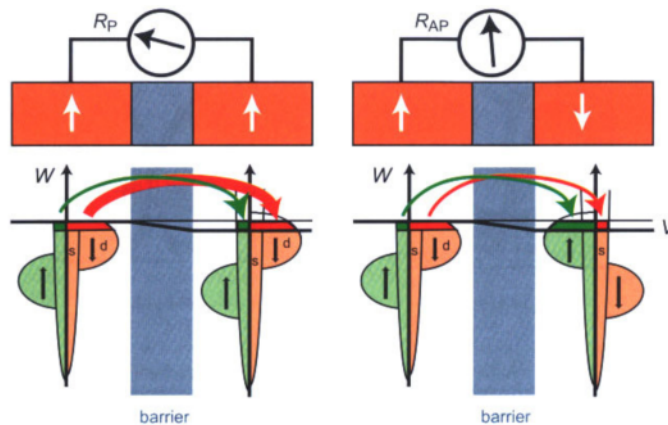
³ Tedrow

⁴ Meservey

$$(D_1^\uparrow D_2^\uparrow + D_1^\downarrow D_2^\downarrow - D_1^\uparrow D_2^\downarrow - D_1^\downarrow D_2^\uparrow) / (D_1^\uparrow D_2^\uparrow + D_1^\downarrow D_2^\downarrow) \quad (3-2)$$

با توجه به تعریف جریان پلاریزه اسپینی ماده مغناطیسی $(P_n = (D_n^\uparrow - D_n^\downarrow) / (D_n^\uparrow + D_n^\downarrow))$ ، مقاومت مقناطیسی برابر با $((2P_1 P_2) / (1 + P_1 P_2))$ است. همانند GMR، دو نوع TMR، CPP و CIP وجود دارد که نوع CPP آن مرسوم تر است. اثر TMR خیلی قوی تر از اثر GMR است و در دمای اتاق بین ۳۰ تا ۵۰ درصد است.

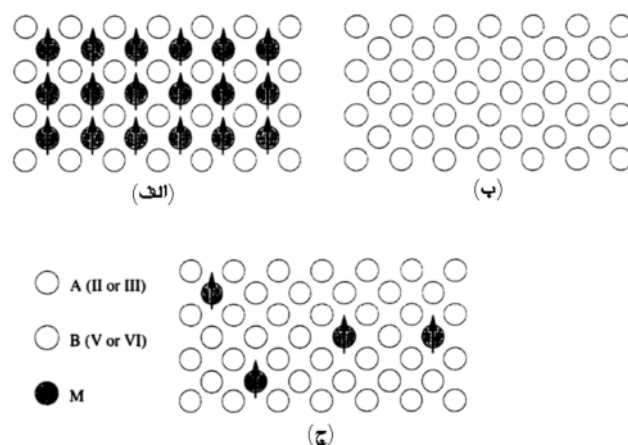
شکل (۷-۲) روش عملکرد یک CPP-TMR را نشان می دهد. تصویرساختار نواری را بر حسب چگالی حالت‌های مجاز اربیتالهای s و d نشان می دهد که حامل‌های اکثریت و اقلیت در اربیتال s یکسان ولی برای اربیتال d یکسان نیست و انرژی حامل‌های اکثریت پائینتر از انرژی حامل‌های اقلیت است و قطبش اسپینی وجود دارد. اگر مغناطش در TMR هم جهت باشد، حامل‌های اکثریت (اقلیت) بعد از تونل زنی وارد ترازهای مجاز اکثریت (اقلیت) شده و جریان را بوجود می آورد البته جریان حامل‌های اکثریت از اقلیت بیشتر است. اگر مغناطش TMR غیر هم جهت باشد حامل‌های اکثریت (اقلیت) ماده مغناطیسی اول، حامل‌های اقلیت (اکثریت) ماده مغناطیسی دومی هستند که بعد از تونل زنی وارد آن می شوند و چون چگالی حالت‌های مجاز کمی (زیادی) برای رسانش وجود دارد، حاملها پراکنده شده (نشده یا کمتر شده) و جریان کاهش می یابد (تقریباً ثابت می ماند). در این حالت مجموع جریان‌های اکثریت و اقلیت از حالتی که مغناطش دو ماده یکسان است کمتر می شود. که اختلاف آنها متناسب با مقاومت مغناطیسی است [۳۵].



شکل (۷-۲): روش عملکرد یک CPP-TMR [۳۵].

۵-۲) نیمرساناهای مغناطیسی رقیق

طیف وسیعی از مواد نیمرسانا با آرایش عناصر واسطه (اتمهای مغناطیسی) وجود دارند، که این مواد را عموماً بعنوان نیمرساناهای مغناطیسی رقیق DMS^۱ یا SMSC^۲ می شناسند. از زمان آغاز مطالعات در زمینه DMS ها در ترکیبات نیمرسانای گروه II-VI بیش از دو دهه گذشته است [۳۶]. از سوی دیگر DMS های حاصل از ترکیبات نیمرسانای گروه III-V، بعلاوه امکان کاربرد آنها در اسپینترونیک، توجه بسیاری از محققین را به خود جذب کرده است. اثبات بارز این ادعا، وجود انواع مقالات تحقیقاتی در مورد خواص فیزیکی این نوع نیمرساناها از جمله خواص الکتریکی، مغناطیسی و اپتیکی است که در مجلات جهانی (حتی در مجلات عمومی) به چاپ رسیده است. این تحقیقات نه تنها در برگیرنده موضوعات تجربی و تئوری در مورد منشأ DMS ها است، بلکه همچنین در برگیرنده چگونگی کاربرد آنها در اسپینترونیک است [۳۷]. آلیاژ ترکیبی DMS به شکل سه گانه $A_{1-x}TM_xB$ یا چهارگانه $A_{1-x-y}C_yTM_xB$ است. برای ماده میزبان از گروه II-VI (III-V)، A و C از گروه II (III) و B از گروه VI (V) است. TM^3 یک آرایش از گروه عناصر واسطه است. x و y کسر مولی آرایش را نشان می دهد. آرایش اتمی در DMS در شکل (۸-۲) نشان داده شده است.



شکل (۸-۲): آرایش اتمی برای آلیاژ سه گانه. (الف) نیمرسانای فرومغناطیسی (آرایش بالا). (ب) نیمرسانای غیر مغناطیسی. (ج) برای DMS [۳۶].

¹ Diluted Magnetic Semiconductors (DMS)
² Semi-Magnetic Semi-Conductors (SMSC)
³ Transition Metal (TM)

محققین فراوانی روی بهبود و افزایش کارایی GMR فعالیت دارند تا جریانهای اسپینی را در جهت کاربردی کردن و کنترل کردن، بهینه کنند. این امر محقق نمی شود مگر اینکه دانش کافی درباره ترابرد اسپینی در نیمرساناها داشته باشیم. تلاش می شود که جریانهای اسپینی را که پایه علم اسپینترونیک است، در نیمرساناها نیز ایجاد کنند. برای تولید دستگاههای اسپینی بر پایه نیمرسانا بجای فلزات، تحقیقات فراوانی در حال انجام است. با توجه به تکنولوژی پیشرفته تولید نیمرساناها، تلاش می شود که همزمان کارایی الکتریکی، نوری، و مغناطیسی آنها را افزایش دهند. اگرچه مزایای فراوانی برای استفاده نیمرساناها در کاربرد های اسپینترونیک وجود دارند، اما مسائل فراوانی از جمله چگونگی انتخاب ترکیبات مواد مغناطیسی در نیمرساناها وجود دارد. زیرا به طور کلی تمام نیمرساناها غیر مغناطیسی هستند. به همین دلیل ایجاد جریان اسپینی در این مواد مشکل می باشد. محققین، برای حل این مشکل از ترکیب مواد نیمرسانا با آلایش مواد مغناطیسی یعنی همان DMS ها استفاده می کنند. DMS ها را می توان بصورت بلور حجیم، پودری (نانو ذرات یا دانه ای) و لایه های نازک در حد نانو فیلم (تک لایه ای یا چند لایه ای) رشد داد. نانو لایه های چند لایه ای که کاربرد فراوانی در ساختار کوانتومی (چاه کوانتومی، سیم های کوانتومی و نقطه های کوانتومی که بصورت یک، دو و صفر بعدی تهیه می شوند) و ابرشبکه ها دارند می توانند به صورت همگون و یا ناهمگون رشد داد. خواص فیزیکی، ساختاری، ترابردی، نوری، مغناطیسی، فونونی و ترمودینامیکی منحصر به فرد DMS باعث شده است که بسیار مورد توجه فیزیکدانان قرار گیرند. برای دسته بندی DMS ها روشهای مختلفی وجود دارد. یکی از این روشها، دسته بندی براساس ماده میزبان است. اگر نیمرسانای میزبان از نوع گروه II-VI، III-V و V-V باشد، DMS را به صورت همان گروه بترتیب گروه II-VI، III-V و V-V می نامند. DMS های هر گروه با توجه به گاف نواری به DMS های با گاف نواری بزرگ یا کوچک تقسیم می شوند. روش دیگر، عکس روش اول است یعنی DMS ها را بر حسب گاف نواری بزرگ و کوچک تقسیم می کنند و سپس در گروه مربوطه ماده میزبان قرار می دهند.

خیلی از پدیده های فیزیکی از جمله آلیاژ کردن، ساختن ساختار ناهمگون، کرنش و دما می توانند خواص الکترونی ماده را تغییر دهند. آلیاژ عناصر TM یک نوع آلیاژ کردن است. محاسبه ساختار نواری آلیاژها کار آسانی نیست در اصل مواد آلیاژی بلورهای کاملی نیستند حتی اگر شبکه کاملی داشته باشند زیرا آلیاژ اتمها به طور تصادفی در شبکه قرار می گیرند که ممکن است تقارن انتقالی شبکه را از بین ببرند. برای محاسبه ساختار نواری مواد آلیاژی می توان از روشهای VCA¹، CPA² و غیره استفاده کرد. روش VCA بعلاوه ویژگیهای که دارد هم برای مواد آلیاژی دارای ساختار زینک بلند و هم ورتسایت چه در حالت سه گانه و چه در حالت چهار گانه مورد استفاده قرار می گیرد. وقتی عناصر TM به نیمرسانا اضافه شود، در اطراف خود هم میدان الکتریکی (اگر یونیزه شوند) و هم میدان مغناطیسی بوجود می آورد که هر یک خواص ماده را تحت تاثیر قرار می دهد. مطالعات نشان می دهند که آلیاژ عناصر TM در اتم میزبان بصورت یون مثبت است و نیز دارای حلالیت بالایی هستند[۳۷]. در ادامه بعضی از اثرات این آلیاژ توضیح داده خواهد شد.

۲-۵-۱) حلالیت

حلالیت یک آلیاژ در جایگاه اتم میزبان عبارت است از حد اکثر در صد آلیاژ که ساختار بلوری ماده میزبان تغییر نکند. جدول (۲-۱) بازه حلالیت آلیاژ اتمهای منگنز، آهن و کبالت را در بعضی مواد میزبان گروه II-VI نشان می دهد[۳۸]. لازم به ذکر است که میزان آلیاژ برای نیمرسانای اکسید روی نیز تا حدود ۲۵ درصد برای عناصر واسطه گزارش شده است.

¹ Virtual Crystal Approximation (VCA)

² Coherent Potential Approximation (CPA)

Compound	Crystal structure	Composition rang
$Zn_{1-x}Mn_xS$	zincblende	$0 < x < 0.1$
	wurtzite	$0.1 < x < 0.45$
$Zn_{1-x}Mn_xSe$	zincblende	$0 < x < 0.30$
	wurtzite	$0.3 < x < 0.57$
$Zn_{1-x}Mn_xTe$	zincblende	$0 < x < 1$
	zincblende	$0 < x < 0.86$
$Cd_{1-x}Mn_xS$	wurtzite	$0 < x < 0.45$
$Cd_{1-x}Mn_xSe$	wurtzite	$0 < x < 0.50$
	zincblende	$0 < x < 0.75$
$Cd_{1-x}Mn_xTe$	zincblende	$0 < x < 0.77$
$Hg_{1-x}Mn_xS$	zincblende	$0 < x < 0.37$
$Hg_{1-x}Mn_xSe$	zincblende	$0 < x < 0.38$
$Hg_{1-x}Mn_xTe$	zincblende	$0 < x < 0.75$
$(Cd_{1-x}Mn_x)_3As_2$	tetragonal	$0 < x < 0.12$
$(Zn_{1-x}Mn_x)_3As_2$	tetragonal	$0 < x < 0.15$
$Pb_{1-x}Mn_xS$	rocksalt	$0 < x < 0.05$
$Pb_{1-x}Mn_xSe$	rocksalt	$0 < x < 0.17$
$Pb_{1-x}Mn_xTe$	rocksalt	$0 < x < 0.40$
$Zn_{1-x}Fe_xS$	zincblende	$0 < x < 0.26$
$Zn_{1-x}Fe_xSe$	zincblende	$0 < x < 0.21$
$Zn_{1-x}Fe_xTe$	zincblende	$0 < x < 0.01$
$Cd_{1-x}Fe_xSe$	wurtzite	$0 < x < 0.20$
$Cd_{1-x}Fe_xTe$	zincblende	$0 < x < 0.03$
$Hg_{1-x}Fe_xSe$	zincblende	$0 < x < 0.20$
$Hg_{1-x}Fe_xTe$	zincblende	$0 < x < 0.02$
$Zn_{1-x}Co_xS$	zincblende	$0 < x < 0.15$
$Zn_{1-x}Co_xSe$	zincblende	$0 < x < 0.05$
$Cd_{1-x}Co_xSe$	wurtzite	$0 < x < 0.08$

جدول (۱-۲) میزان حلالیت آرایش اتمهای منگنز، آهن و کبالت در مواد میزبان گروه II-VI [۳۸].

۲-۵-۲) ثابت شبکه

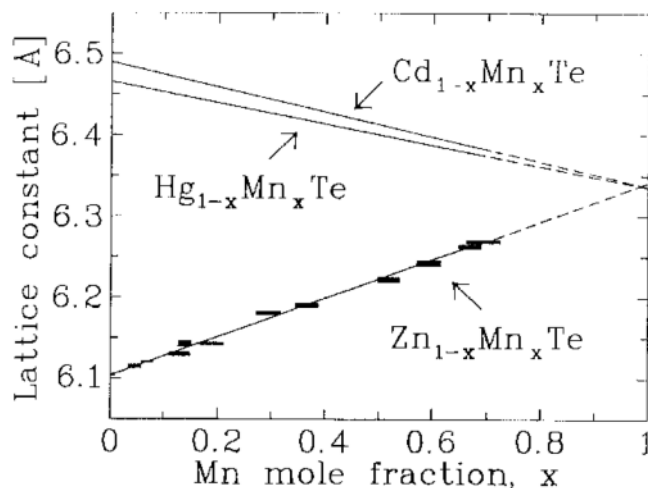
یکی از پارامترهای مهمی که با آرایش عناصر تغییر می کند، ثابت شبکه ماده میزبان است. مقدار این تغییرات بر اساس قانون وگارد^۱ است. اگر سه عنصر A، B و C ماده ترکیبی AC و BC را در دمای یکسان با ساختار بلوری پایدار بسازند ممکن است دارای ثابت شبکه و ساختار بلوری یکسانی نباشد. برای کسر مولی از عنصر B که در ماده AC آرایش داده شود، ماده حاصله $A_{1-x}B_xC$ خواهد بود، که x کسر مولی عنصر آلاییده B است. ساختار آن ممکن است یکی از ساختارهای بلوری AC یا AB باشد که به مقدار آرایش وابسته است. البته ممکن است ساختار بلوری AC و AB یکسان باشد در این

¹ Vegard's Law

صورت آرایش ساختار بلوری را تغییر نمی دهد ولی پارامتر شبکه را تغییر داده و ترکیب از AC به BC تبدیل خواهد شد و تغییرات پارامتر شبکه با فرض ساختار مکعبی برابر خواهد بود با:

$$a_{ABC} = (1-x)a_{AC} + xa_{BC} = a_{AC} + (a_{BC} - a_{AC})x \quad (۴-۲)$$

این رابطه ترکیب خطی ثابت شبکه بر حسب کسر مولی آرایش را نشان می دهد. اگر $a_{BC} > a_{AC}$ در این صورت ثابت شبکه ماده ترکیبی کوچکتر (بزرگتر) از ماده AC خواهد شد. شکل (۹-۲) چگونگی تغییر پارامترهای شبکه ZnTe, HgTe و CdTe را بر حسب در صد مولی آرایش منگنز نشان می دهد. همانطور که دیده می شود افزایش منگنز باعث افزایش (کاهش) ثابت شبکه نیمرسانا(ها)ی ZnTe (CdTe و HgTe) می شود [۳۹].



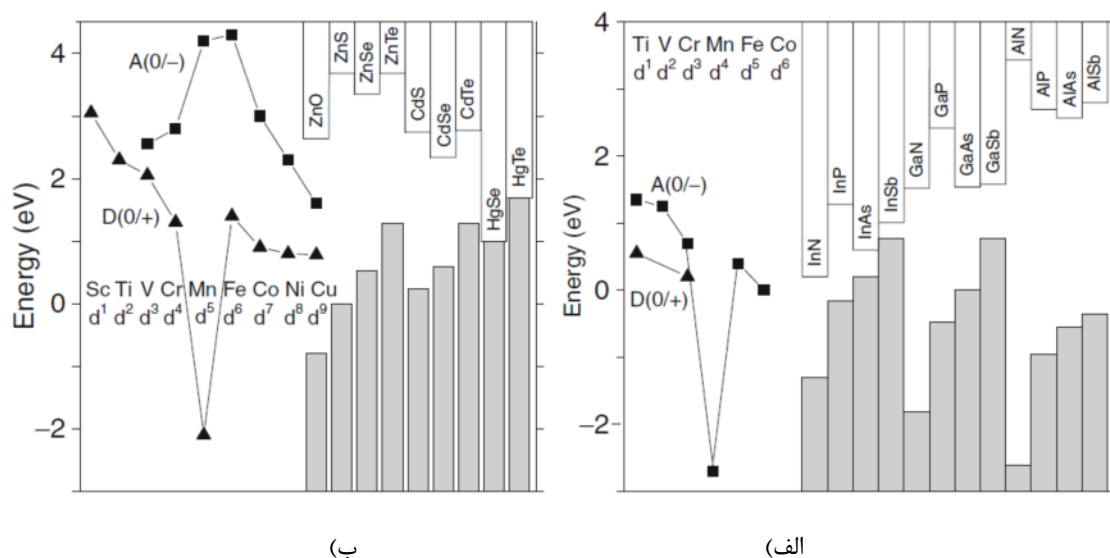
شکل (۹-۲): تغییر پارامتر شبکه بر اساس قانون وگارد [۳۹].

۳-۵-۲) تراز اتم TM در گاف نواری ماده میزبان

شکل (۱۰-۲) مکان تراز انرژی حالت پایه بدست آمده از لایه های اربیتال $3d$ اتم ناخالصی TM با تعدادی از الکترونها مختلف نسبت به انرژی نوار ماده میزبان گروه II-VI و III-V را نشان می دهد [۴۰]. عبارت دهنده (D)^۱ دلالت به حداقل انرژی یونیزاسیون الکترونها مغناطیسی نسبت به

^۱ Donor

حالت‌های نواری ماده میزبان دارد ($TM^{2+} \rightarrow TM^{3+}$ یا $d^n \rightarrow d^{n-1}$). عبارت پذیرنده (A)^۱ برابر با حداکثر انرژی الکترون خواهی است ($TM^{2+} \rightarrow TM^{1+}$ یا $d^n \rightarrow d^{n+1}$). اگر تراز دهنده (پذیرنده) با نوار رسانش (نوار ظرفیت) همپوشانی کند، حالت‌های شبه-دهنده (پذیرنده) کم عمق در گاف نواری تشکیل می‌شود. یک آرایش خاص می‌تواند برای یک ماده میزبان تراز کم عمق^۲ یا عمق^۳ بوجود آورد [۴۱].



شکل (۲-۱۰): مکان‌های تقریبی تراز انرژی حاصل از لایه d اتم TM نسبت به لبه باند ظرفیت و رسانش (الف) گروه II-VI و (ب) گروه III-V [۴۱].

۲-۵-۴) ناخالصی TM هم الکترون با ماده میزبان

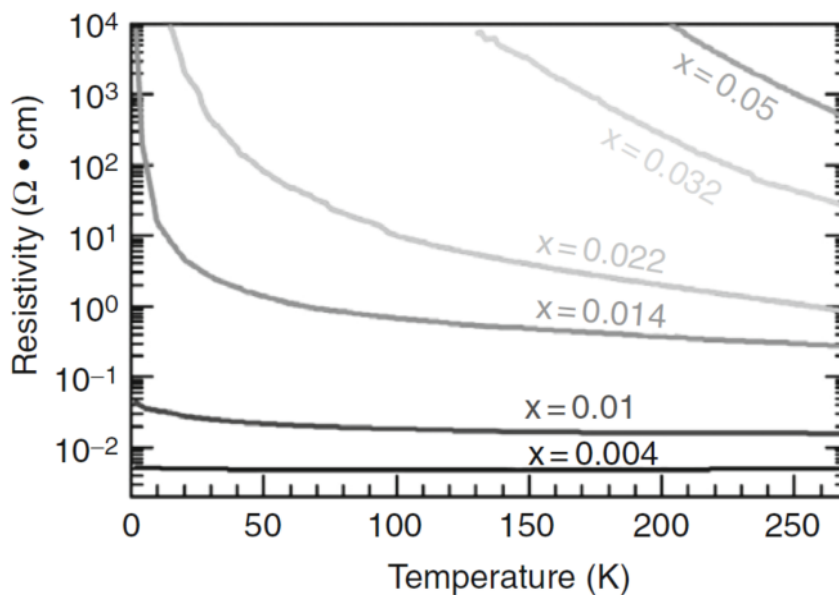
بعضی از ناخالصی‌های TM که وارد مواد میزبان می‌شوند تراز انرژی پذیرندگی و بخشندگی عمقی را بوجود می‌آورند به طوری که تراز انرژی آنها وارد نوار رسانش و یا نوار ظرفیت ماده میزبان می‌شود، نه الکترون از دست می‌دهند و نه الکترون می‌گیرند و تمام الکترون لایه d بدون تغییر می‌ماند. از این رو چون هیچ تراز در گاف نواری ماده میزبان بوجود نمی‌آورند. از اینرو هیچ نقشی در خواص ترابرد و خواص نوری ماده میزبان ایجاد نمی‌کنند. اما همه ناخالصیها در داخل ماده میزبان در هر دمائی،

¹ Acceptor
² Shallow Level
³ Deep Level

میدان مغناطیسی یکسانی را ایجاد کرده که قویاً بر اسپین حامل‌های سیار (الکترون/حفره) ماده میزبان اثر می‌گذارد و این اثر مستقل از عوامل محیطی است. بعنوان مثال Mn^{2+} در گروه II-VI دارای یک چنین ویژگی منحصر به فردی است (شکل (۲-۱۰)).

۲-۵-۵) مقاومت الکتریکی در DMS

شکل (۲-۱۱) وابستگی دمائی مقاومت ویژه در ترکیب $p\text{-Zn}_{1-x}\text{Cr}_x\text{Te}$ را نشان می‌دهد که دارای غلظت $p = 7 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ اتم نیتروژن می‌باشد [۴۲]. دیده می‌شود که هرچه دما کمتر و درصد آلایش بیشتر شود مقاومت بیشتر می‌شود که نشان می‌دهد احتمال پراکندگی در دماهای پائین بیشتر است. در دماهای پائین احتمال پراکندگی ناشی از فونونها و ناخالصیها کمتر می‌شود و انتظار می‌رود که مقاومت کمتر شود. افزایش مقاومت در دماهای پائین شاید به ترازهای مجازی که اتمهای TM در گاف نواری ماده بوجود می‌آورد و نیز بر همکنش قوی حاملها با اتمهای TM دانست که باعث پراکندگی حاملها شده و مقاومت الکتریکی را افزایش می‌دهند.



شکل (۲-۱۱): وابستگی دمائی مقاومت ویژه ترکیب $p\text{-Zn}_{1-x}\text{Cr}_x\text{Te}$ [۴۲].

۲-۵-۶) وابستگی گاف انرژی به ترکیبات

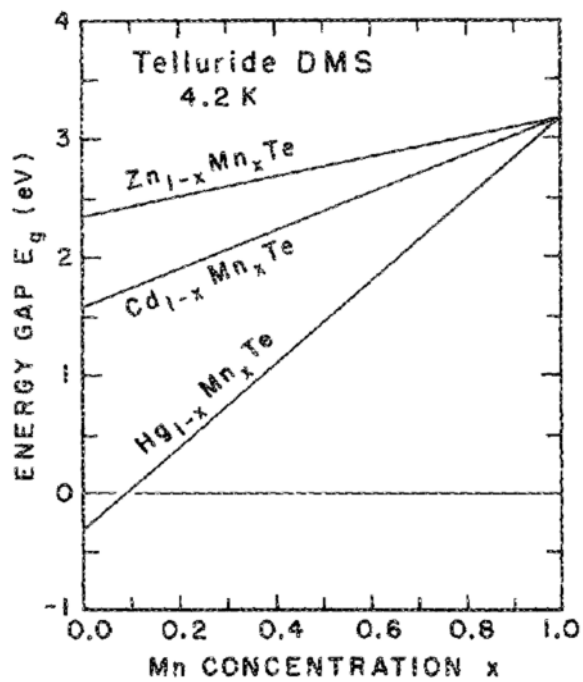
با استفاده از روش VCA هم برای مواد سه گانه و هم مواد چهارگانه می توان وابستگی گاف انرژی به ترکیبات از جمله پارامتر خمش را محاسبه کرد [۴۳]. در آلیاژ سه گانه اگر E_g^{AB} و E_g^{BC} نمایش گاف انرژی ماده AB و BC باشد در این صورت انرژی گاف برابر است با:

$$E_g^{ABC} = (1-x)E_g^{AB} + xE_g^{BC} \quad (۵-۲)$$

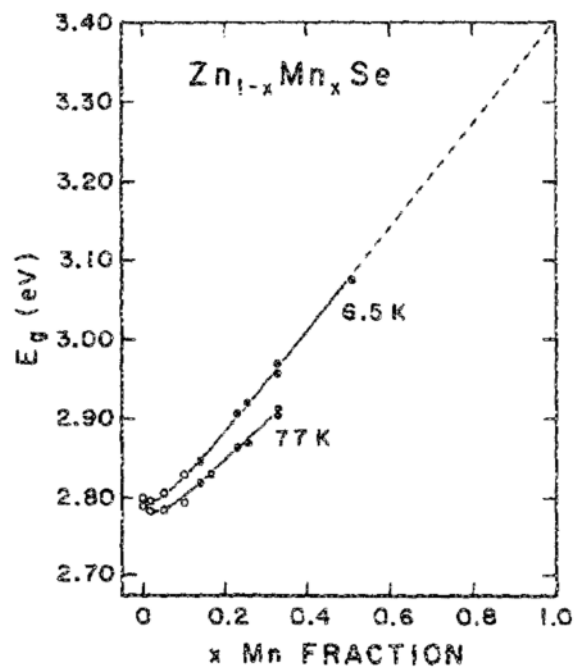
در اکثر آلیاژها اثری بنام اثر خمش وجود دارد که از بی نظمی حاصل از آلیاژ کردن بوجود می آید در این صورت $E_g^{alloy} = a + bx + cx^2$ است که c را پارامتر خمش گویند. این رابطه برای زمانی که آلیاژ به خوبی ترکیب نشده اند و یا آرایش به صورت تصادفی نباشد، درست نیست. زیرا ماده یا تغییر حالت می دهد یا حالت خوشه ای به خود می گیرد. البته با اشعه X قابل تشخیص است. در حالت چهارگانه $A_{1-x-y}C_yTM_xB$ با تقریب VCA، انرژی گاف آلیاژی برابر است با:

$$E_g^{alloy} = (1-x-y)E_g^{AB} + yE_g^{CB} + xE_g^{TMB} \quad (۶-۲)$$

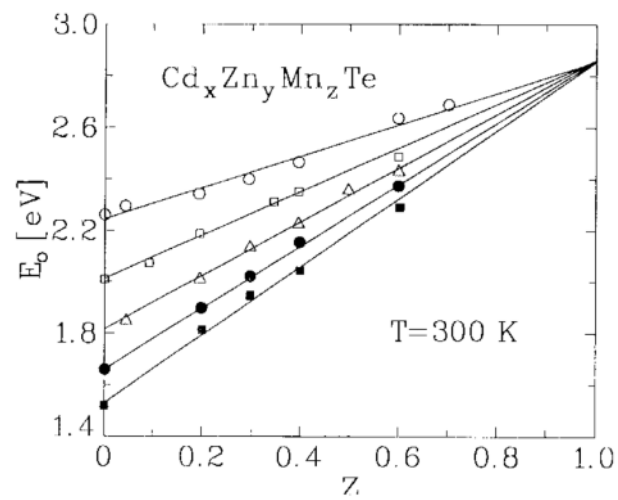
تغییرات گاف انرژی یک سری از DMS ها سه تایی ترکیبات تلوریم بر حسب غلظت منگنز در شکل (۲-۱۲) نشان داده شده است. مشاهده می شود با افزایش آرایش انرژی گاف زیاد می شود [۴۴]. شکل (۲-۱۳) نمایش اثر خمش در DMS گروه II-VI در حالت سه گانه است که با عمل برآزش می توان پارامتر خمش را محاسبه کرد [۴۵]. شکل (۲-۱۴) تغییرات گاف انرژی در DMS های چهارتایی را نشان می دهد که با افزایش درصد منگنز انرژی گاف افزایش می یابد [۴۶].



شکل (۲-۱۲): تغییرات گاف انرژی DMS سه تایی [۴۴].



شکل (۲-۱۳): نمایش اثر خمشی در DMS گروه II-VI [۴۵].



شکل (۲-۱۴): گاف انرژی در DMS گروه چهارگانه. علامت دایره سفید برای $x=0$ ، علامت دایره سیاه برای $x=3y$ ، علامت مربع سفید برای $y=3x$ ، علامت مربع سیاه برای $y=0$ و علامت مثلث برای $x=y$ می باشد [۴۶].

فصل سوم

ویژگیهای فیزیکی اکسید روی خالص و آلایش یافته با عناصر

واسطه

۳-۱) مقدمه

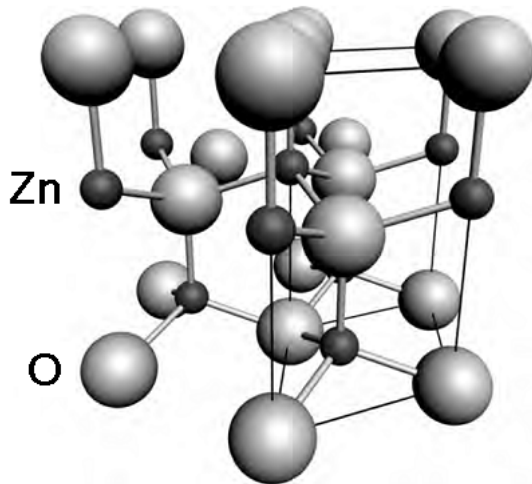
اخیراً نیمرسانای اکسید روی بعلت خواص فیزیکی و شیمیایی خاص مورد توجه زیادی قرار گرفته است. مطالعه وسیع خواص این ماده به سالهای ۱۹۳۵ بر می گردد [۴۷]. گاف نواری بزرگ، روشهای رشد گوناگون (حجمی، روآرستی و پودری)، شفافیت در ناحیه مرئی و خاصیت پیزوالکتریکی آن باعث شده که در صنعت کاربرد فراوانی داشته باشد. اکسید روی همانند گالیم نیترایت با گاف نواری $3/4 \text{ eV}$ و انرژی همبستگی اکسیتونی 60 meV در دمای اتاق برای تولید نور آبی در دستگاههای اپتوالکترونیک کاربرد دارد. اکسید روی نسبت به گالیم نیترایت دارای ویژگیهای مهمی است که مهمترین آن مقدار انرژی همبستگی اکسیتونی آن و توانایی رشد تک بلوری بر روی انواع زیر لایه ها است. از دیگر ویژگیهای مهم آن می توان به خواص شیمیایی آن در حکاکیهای محیط شیمیایی، آستانه پمپاژ پائین در پمپهای نوری و سازگاری آن با محیط زیست را نام برد. این ویژگیها باعث شده است که اکسید روی کاندید خوبی برای ساخت دیودهای نوری و حسگرها در صنعت نانو تکنولوژی شود [۴۸]. در این فصل به بررسی بعضی از ویژگیهای اکسید روی خالص و آلائیده با عناصر واسطه که توسط دیگران گزارش شده است، پرداخته ایم.

۳-۲) اکسید روی خالص

۳-۲-۱) ویژگیهای کلی

در فشار و دمای محدود، اکسید روی به شکل ساختار بلوری ورتسایت (نوع B4) متبلور می شود که در شکل (۳-۱) نشان داده شده است. این شبکه هگزاگونال به گروه فضائی $P6_3mc$ متعلق است که با دو زیر شبکه حاصل از Zn^{+2} و O^{-2} که هر یک با پیوند تتراهدرال از اتم نوع دیگر احاطه شده اند، تشکیل می شوند. مختصات تتراهدرال باعث تقارن قطبی در جهت محور هگزاگونال می شود. این قطبش باعث بروز بعضی از ویژگیهای خاص اکسید روی می شود از جمله خاصیت پیزوالکتریک و

قطبش خود به خودی که یک عامل کلیدی در رشد بلوری، حکاکی و تولید نقایص شبکه ای است [۴۹].



شکل (۳-۱): ساختار سلول واحد اکسید روی. اتمهای اکسیژن (روی) به صورت کره های بزرگ (کوچک) سفید (سیاه) مشخص شده اند [۴۹].

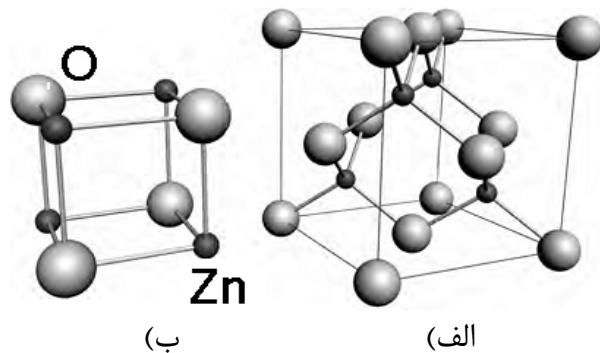
جدای از قطبیدگی ذاتی بلور اکسید روی، مختصات تتراهدرال آن بصورت یک پیوند از نوع sp^3 است. بهر حال، پیوند بانندی اکسیژن-روی یک مشخصه یونی خیلی قوی است. و بنابراین اکسید روی با قدرت پیوند یونی 0.616 در اندازه یونش در بین مرز پیوند یونی و کووالانسی قرار دارد [۵۰]. پارامترهای شبکه ای سلول واحد هگزاگونال آن برابر با $a = 3.2495 \text{ \AA}$ و $c = 5.2069 \text{ \AA}$ با چگالی 5.605 g/cm^3 است [۵۱]. در بلور ایده آل ورتسایت، نرخ تغییرات c/a و پارامتر u (جا به جایی اتمها

در امتداد محور c) به ترتیب برابر با $\left(\frac{8}{3}\right)^{\frac{1}{2}}$ و $\left(\frac{3}{8}\right)^{\frac{1}{2}}$ است. بلور اکسید روی واقعی از

حالت ایدآل خارج شده و تغییرات آن با توجه به ساختار بلوری بترتیب برابر با $\frac{c}{a} = 1.593 - 1.6035$

و $u = 0.3817 - 0.3856$ است [۵۲، ۵۳، ۵۴]. اکسید روی علاوه بر فاز ورتسایت، دارای ساختار زینک

بلند و سنگ نمک (NaCl) نیز است که در شکل (۳-۲) نشان داده شده است.

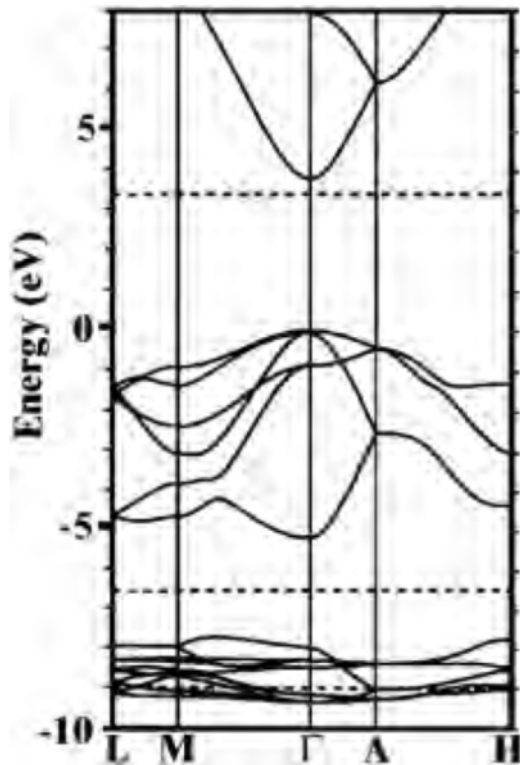


شکل (۳-۲): فازهای مختلف اکسید روی. الف) ساختار زینک بلند ب) ساختار سنگ نمک. اتمهای اکسیژن (روی) بصورت کره های بزرگ (کوچک) و سفیدند (سیاه اند) [۵۴].

ساختار زینک بلند بر روی زیر لایه های دارای ساختار مکعبی پایدار هستند [۵۵، ۵۶، ۵۷]، در صورتیکه ساختار سنگ نمک در فشارهای بالا (در حدود ۱۰ GPa) حالت شبه پایدار حاصل می شود و قادر به پایداری در حالت روآراستی نیست [۵۸]. محاسبات تئوری نشان می دهد که ممکن است فاز چهارمی با ساختار مکعبی کلرید سزیم در دماهای خیلی بالا وجود داشته باشد ولی هنوز در عمل تجربه نشده است [۵۹].

ساختار نوار الکترونی نیمرسانای اکسید روی توسط گروه های زیادی محاسبه شده است [۶۰، ۶۱]. نتایج محاسبات ساختار نواری که با روش تقریب دانسیته محلی^۱ (LDA) از طریق شبه پتانسیل محاسبه شده در شکل (۳-۳) رسم شده است. ساختار نواری نشان داده شده از نقاط پر تقارن در منطقه اول ناحیه بریلوئن هگزاگونال می گذرد. حداقل نوار رسانش و حداکثر نوار ظرفیت در نقطه گاما $k=0$ می گذرد و نشان می دهد که اکسید روی نیمرسانائی با گاف نواری مستقیم است.

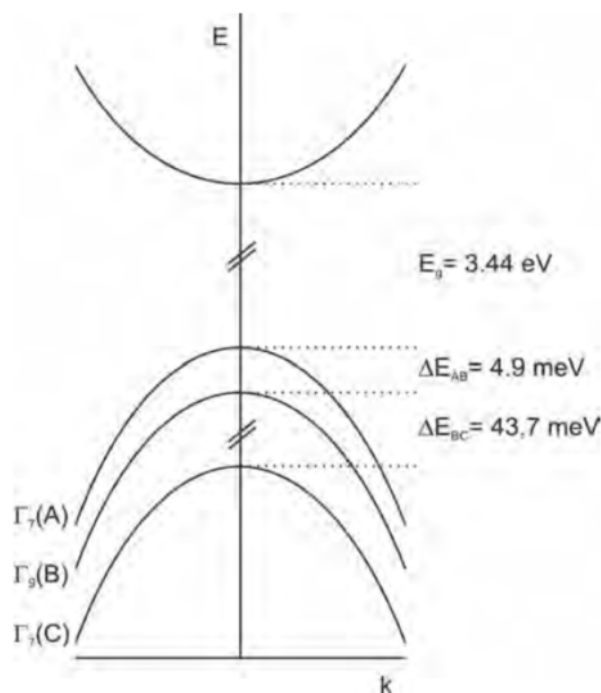
^۱ Local Density Approximation (LDA)



شکل (۳-۳): ساختار نواری اکسید روی محاسبه شده به روش LDA [۶۱].

ده باند زیرین (حدود ۹ eV -) مطابق با تراز الکترون $3d$ است. شش نوار بعدی (از صفر تا ۵ eV -) مربوط به تراز اتمی $2p$ اکسیژن است. اولین دو نوار رسانش مربوط به تراز $3s$ اتم روی است. نوارهای رسانش بالاتر که رسم نشده اند مربوط به حالت‌های مجار الکترون آزادند. نوار $2s$ اتم اکسیژن که کمتر از ۲۰ eV - است مقید به هسته ها است گاف نواری محاسبه شده چیزی در حدود ۳/۷۷ eV می باشد که در توافق با داده های تجربی است. بطور تجربی، نوار ظرفیت اکسید روی به سه تراز A، B و C ناشی از برهمکنش اسپین - مدار و میدان داخل بلور جدا می شود که شکل (۳-۴) آنرا نشان می دهد. نوارها بترتیب دارای تقارن Γ_7 ، Γ_9 و Γ_7 هستند. گاف نواری با رابطه

$$E_g(T)/E_g(T=0) = [5.05 + 10^{-4}T^2] / [900 - T] \quad [۶۲].$$



شکل (۳-۴): نمایش اثر میدان بلور و اسپین بر روی نوارهای انرژی اکسید روی [۶۲].

برای کاربرد نیمرسانا در ابزارهای اپتوالکترونیکی لازم است گاف نواری را با آلاشی از مواد دیگر تغییر داد. اکسید روی قادر به حل منیزیم و کادمیوم است که باعث افزایش و کاهش انرژی گاف نواری می شود و جدول (۳-۱) این تغییرات را نشان می دهد [۶۳، ۶۴، ۶۵]. جدول (۳-۲) پارامترهای آلیاژی اکسید روی را نشان می دهد.

جدول (۳-۱): خواص فیزیکی اکسیدهای II-VI [۶۵].

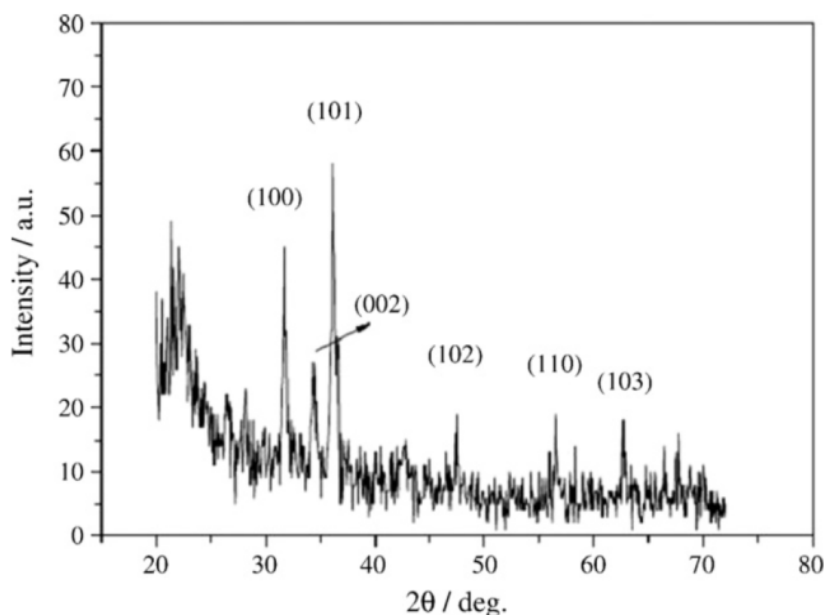
	ZnO	MgO	CdO
E_g (eV)	3.4	7.8	2.2
m_e^* (m_0)	0.28	0.35	-
m_{hh}^* (m_0)	0.78	1.60 [001], 2.77 [111]	-
m_{lh}^* (m_0)	-	0.35 [001], 0.31 [111]	-
a (Å)	3.2	4.2	4.7
c (Å)	5.2	-	-
Stable crystal structure	Wurtzite	Rocksalt	Rocksalt

جدول (۳-۲): نمایش پارامترهای مهم نیمرسانای آلیاژی اکسید روی با منیزیم و کادمیوم [۶۵].

Parameter	Zn _(1-x) Mg _x O	Zn _(1-y) Cd _y O
Typical energy range (eV)	3.37-4	2.9-3.37
Maximum percentage alloy incorporation	43%	70%
<i>a</i> -axis length expansion (Å)	3.250 + 0.036 <i>x</i>	3.252 + 0.143 <i>y</i> - 0.147 <i>y</i> ²
<i>c</i> -axis length expansion (Å)	3.34 - 0.063 <i>x</i>	5.204 + 0.956 <i>y</i> - 5.42 <i>y</i> ²
<i>E_g</i> (eV)	3.37 + 2.51 <i>x</i>	3.29 - 4.40 <i>y</i> + 5.93 <i>y</i> ²
$\Delta E_c/\Delta E_v$	70/30	-

۳-۲-۲) بررسی خواص ساختاری

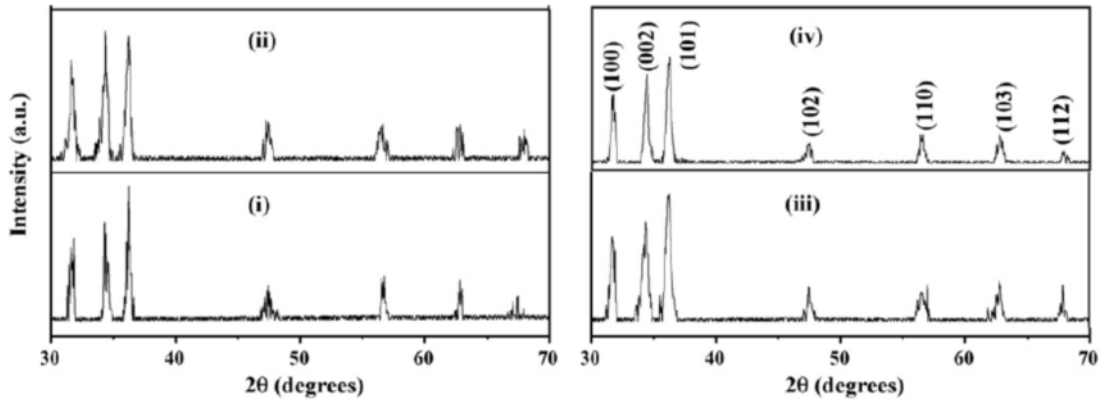
شکل (۳-۵) طیف XRD نوعی یک فیلم نازک اکسید روی رشد داده شده به روش سل-ژل در دمای بازپخت °C ۶۰۰ را نشان می دهد. همانطور که در این شکل دیده می شود در بازه ۲۰ تا ۷۰ درجه تمام صفحات ساختار ششگوشی این ماده قابل رویت است. اندازه دانه های محاسبه شده در جهت (۰۰۲)، ۴۸ نانومتر است [۶۶].



شکل (۳-۵): طیف XRD فیلم نازک اکسید روی در دمای بازپخت °C ۶۰۰ [۶۶].

شکل (۳-۶) طیف XRD چهار فیلم نازک اکسید روی که با محلولی بترتیب با غلظتهای ۰/۰۳، ۰/۰۵، ۰/۰۸ و ۰/۱ مولار در دمای بازپخت °C ۵۵۰ به روش سل-ژل تهیه شده است را نشان می دهد. محاسبات انجام شده نشان می دهد که هرچه غلظت محلول افزایش می یابد ضخامت لایه ها

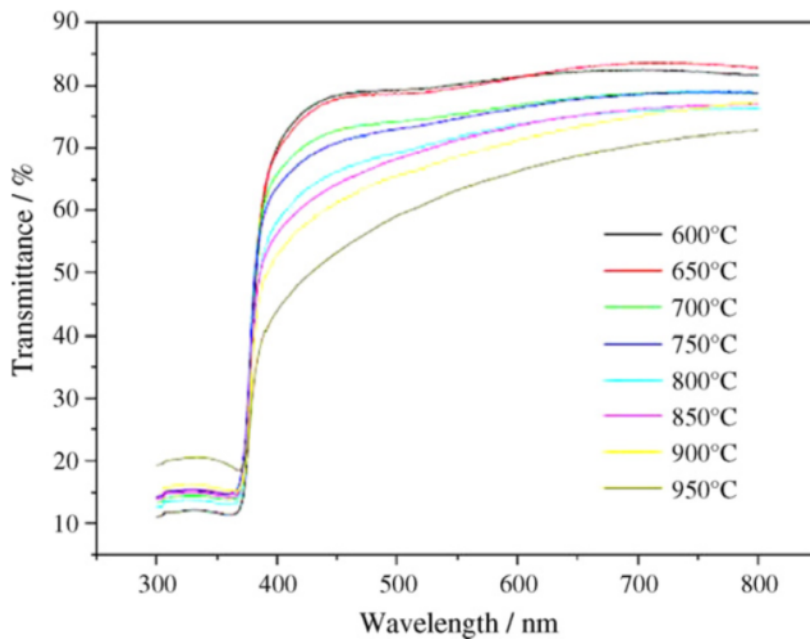
و اندازه دانه ها بزرگتر می شود. این شکل، در بازه ۳۰ تا ۷۰ درجه ساختار ششگوشی اکسید روی را نشان می دهد [۶۷].



شکل (۳-۶): طیف XRD چهار فیلم نازک اکسید بازپخت شده با غلظتهای مختلف [۶۷].

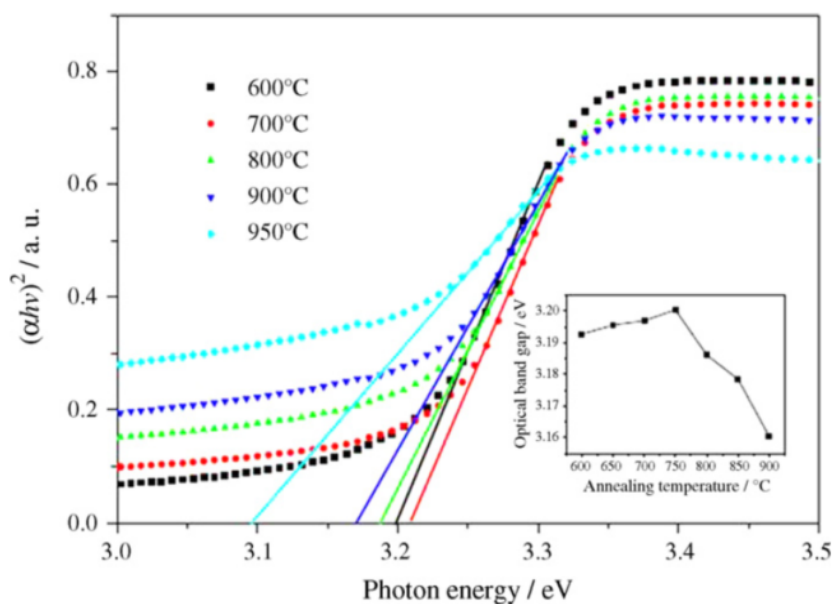
۳-۲-۳ بررسی خواص نوری

یکی از فاکتورهای مهم در تشکیل ساختار بلوری، دمای بازپخت است. اثر دمای بازپخت بر ساختار نوری نمونه های اکسید روی که به روش سل-ژل رشد داده شده اند در شکل (۳-۷) نشان داده شده است. همانطوریکه در این شکل دیده می شود هر چه دمای بازپخت زیاد می شود طیف تراگسیل کاهش می یابد [۶۶].



شکل (۳-۷): اثر دمای بازپخت بر ساختار نوری اکسید روی [۶۶].

نحوه محاسبه انرژی گاف مربوط به طیف تراگسیل شکل (۷-۳) در شکل (۸-۳) نشان داده شده است. شکل داخلی مربوط به نمودار انرژی گاف بر حسب دمای بازپخت است که بر اساس داده های جدول (۳-۳) رسم شده است. همانطوریکه دیده می شود تا دمای 750°C انرژی گاف افزایش می یابد و یک انتقال به سمت نور آبی را شاهد هستیم لیکن پس از آن انرژی گاف کاهش می یابد. علت اصلی آن ممکن است به ساختار بلوری اکسید روی بر گردد که با تغییرات دما تغییر می کند [۶۶].

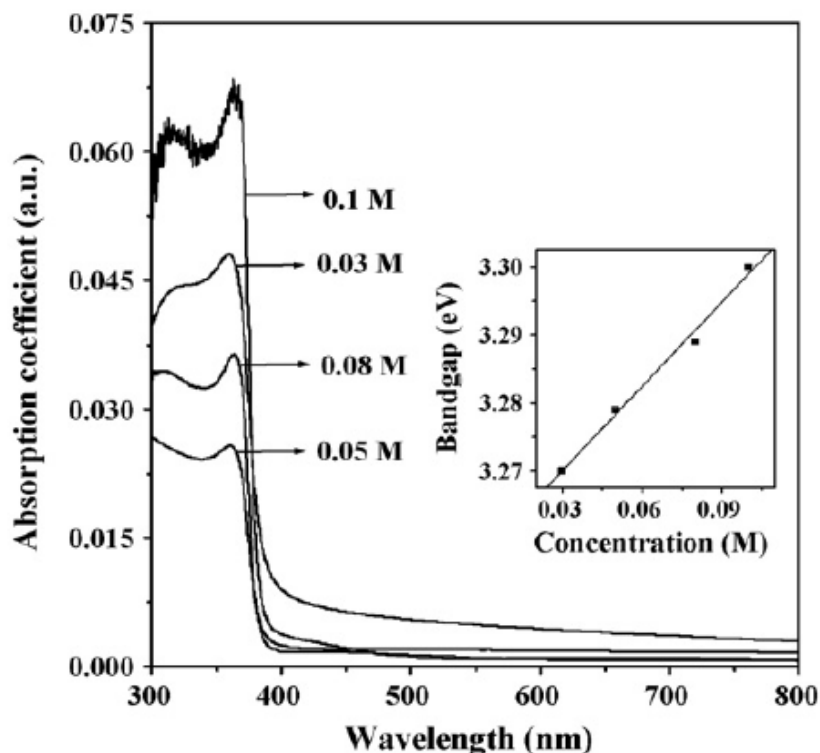


شکل (۸-۳): محاسبه انرژی گاف نمونه های اکسید روی. شکل داخلی تغییرات گاف انرژی را بر حسب دمای بازپخت نشان می دهد [۶۶].

جدول (۳-۳): محاسبه گاف نواری نمونه ها [۶۶].

Annealing temperature ($^{\circ}\text{C}$)	Optical bandgap (eV)
600	3.1927
650	3.1956
700	3.1970
750	3.2004
800	3.1861
850	3.1785
900	3.1604
950	3.1100

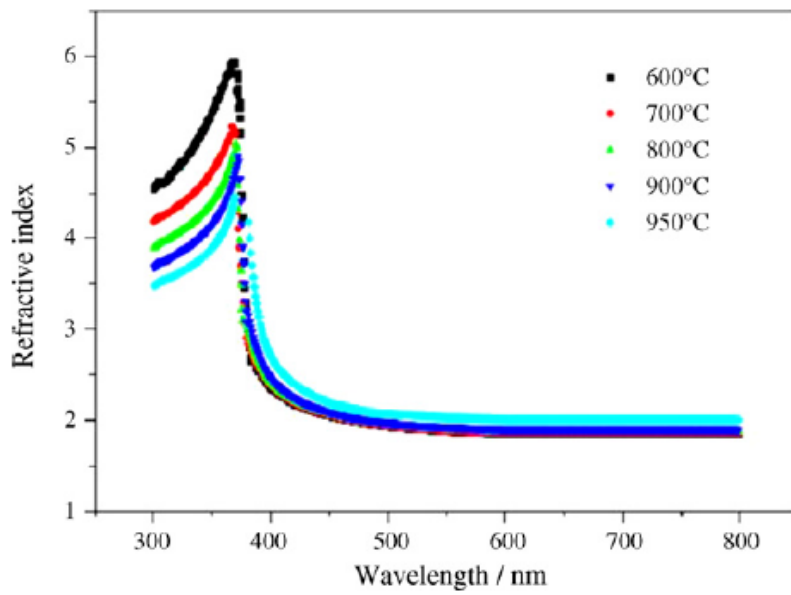
شکل (۳-۹) طیف جذبی چهار فیلم نازک اکسید روی که با محلولی بترتیب با غلظتهای مختلف ۰/۰۳، ۰/۰۵، ۰/۰۸ و ۰/۱ مولار در دمای بازپخت 550°C به روش سل-ژل تهیه شده است را نشان می دهد. شکل داخلی نمایش انرژی گاف بر حسب غلظت محلول است. این شکل نشان می دهد که هرچه غلظت محلول افزایش یابد انرژی گاف نیز بیشتر می شود [۶۷].



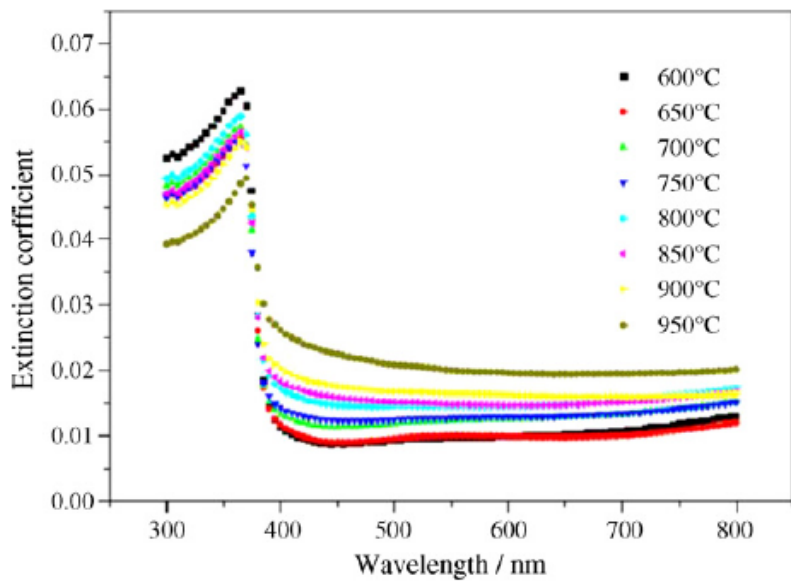
شکل (۳-۹): طیف جذبی چهار فیلم نازک اکسید روی. شکل داخلی نمایش انرژی گاف بر حسب غلظت محلول است [۶۷].

۳-۲-۴) محاسبه ضرایب اپتیکی

نتایج محاسبه ضرایب شکست و ضرایب خاموشی نمونه های بازپخت شده در دماهای مختلف در شکل (۳-۱۰) و (۳-۱۱) رسم شده است. همانطوری که مشاهده می شود در ناحیه امواج مرئی تغییرات قابل ملاحظه ای وجود ندارد ولی در لبه جذب بعلت برهمکنش قوی الکترون- فوتون تغییرات زیادی وجود دارد. محاسبات نشان می دهند که ضرایب اپتیکی نمونه ها با افزایش دما کاهش می یابند [۶۶].



شکل (۳-۱۰): نتایج محاسبه ضرایب شکست نمونه های اکسید روی بازپخت شده در دماهای مختلف [۶۶].

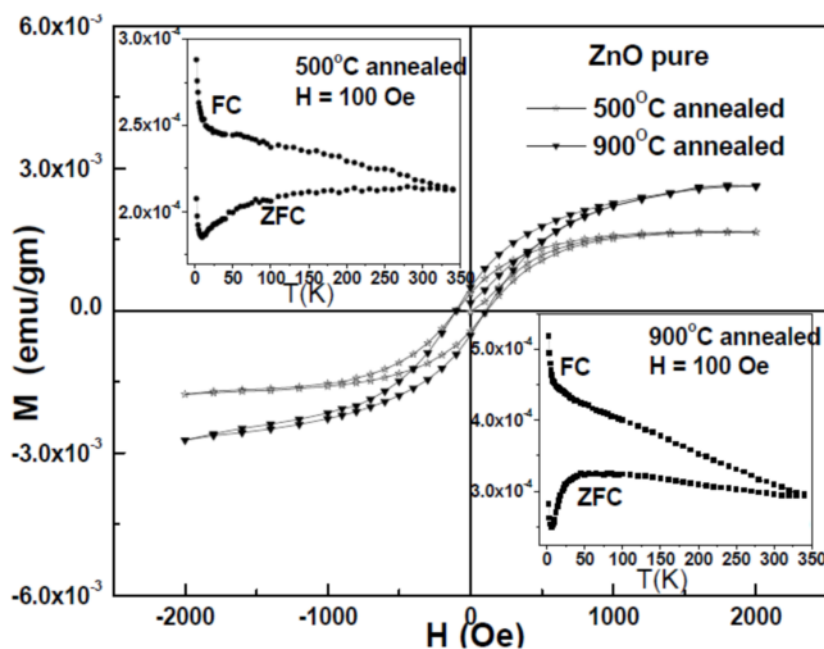


شکل (۳-۱۱): نتایج محاسبه ضرایب خاموشی نمونه های اکسید روی بازپخت شده در دماهای مختلف [۶۶].

۳-۲-۵) بررسی خواص مغناطیسی

شکل (۳-۱۲) خاصیت مغناطیسی اکسید روی خالص را نشان می دهد. خاصیت مغناطیسی اکسید روی به اوربیتال لایه d اتم روی برمی گردد. حضور حلقه پسماند نمونه ها در دمای بازپخت ۵۰۰ و

۹۰۰ درجه سلسیوس در دمای اتاق نشان دهنده خاصیت مغناطیسی نمونه ها است. وابستگی مغناطش به دما در حضور میدان مغناطیسی^۱ (۱۰۰ Oe) و عدم حضور^۲ آن در شکل داخلی رسم شده است که نمایانگر مغناطش نمونه ها در دمای اتاق است [۶۸].

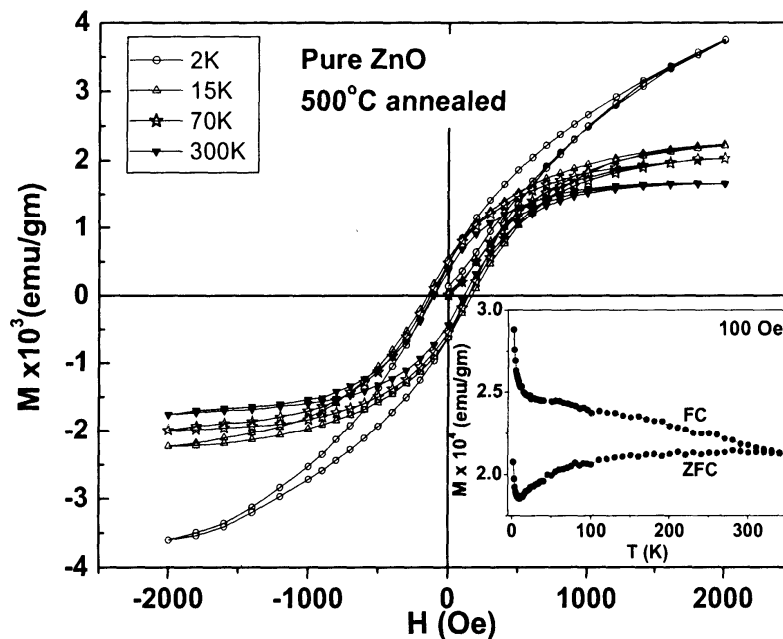


شکل (۳-۱۲): حلقه پسماند نمونه ها در دمای اتاق. شکل داخلی مربوط به وابستگی مغناطش نمونه ها به دما است [۶۸].

شکل (۳-۱۳) نمودار خاصیت مغناطیسی اکسید روی خالص باز پخت شده در دمای ۵۰۰ درجه سلسیوس را برای دماهای مختلف بر حسب میدان خارجی نشان می دهد. شکل داخلی وابستگی مغناطش به دما را در حضور (۱۰۰ Oe) و عدم حضور میدان مغناطیسی نشان می دهد. نمودار به خوبی نشان می دهد هرچه دما افزایش پیدا می کند مغناطش کاهش می یابد [۶۸].

^۱ Field Cooled (FC)

^۲ Zero Field Cooled (ZFC)

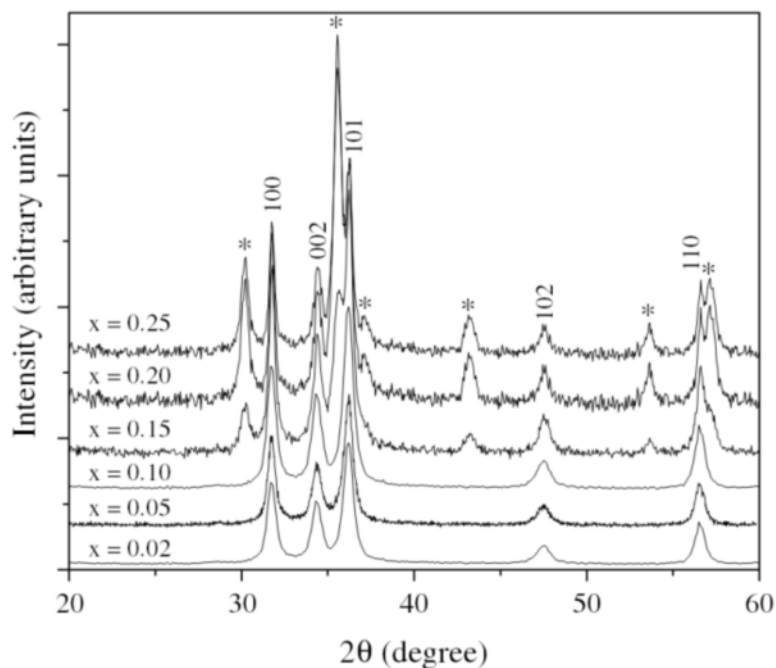


شکل (۳-۱۳): حلقه پسماند اکسید روی خالص برای دماهای مختلف. شکل داخلی، وابستگی مغناطش به دما را در حضور (۱۰۰ Oe) و عدم حضور میدان مغناطیسی نشان می دهد [۶۸].

۳-۳ آرایش اکسید روی با منگنز

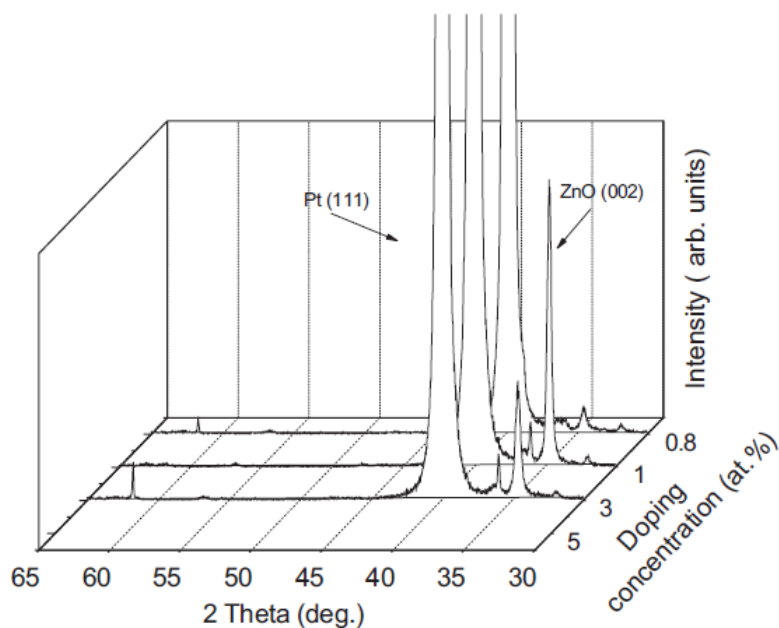
۳-۳-۱ بررسی خواص ساختاری

شکل (۳-۱۴) طیف XRD مربوط به $Zn_{1-x}Mn_xO$ در حالت پودری را نشان می دهد. مقدار آرایش منگنز در این نمونه ها در حدود ۰/۰۲، ۰/۰۵، ۰/۱، ۰/۱۵، ۰/۲ و ۰/۲۵ است. این طیف نشان می دهد که با افزایش درصد آرایش منگنز احتمال تشکیل فاز ثانویه $ZnMnO_3$ نیز بیشتر می شود. مقدار پارامتر c با افزایش آرایش منگنز افزایش می یابد زیرا شعاع یونی منگنز از روی بیشتر است [۶۹].



شکل (۳-۱۴): طیف XRD مربوط به $Zn_{1-x}Mn_xO$ در حالت پودری [۶۹].

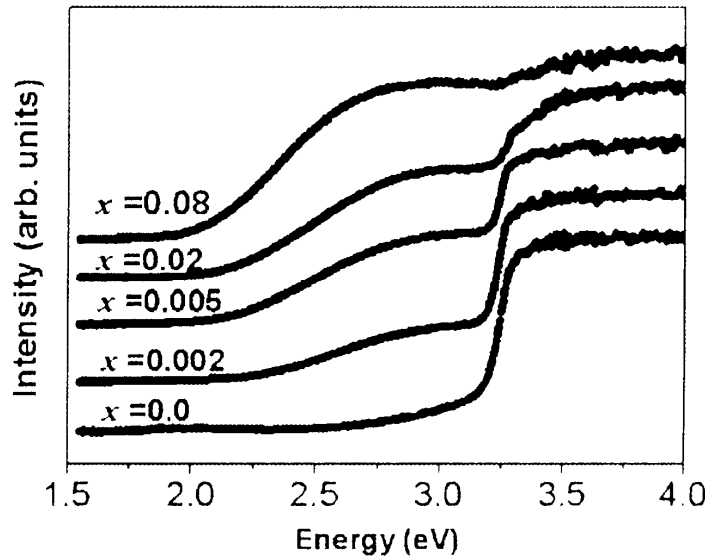
طیفهای XRD لایه های نازک $ZnO:Mn$ در شکل (۳-۱۵) نشان داده شده است. غلظت آلاینش منگنز در این نمونه ها بین ۰/۸ تا ۳ درصد است. قویترین قله مربوط به طیف زیرلایه پلاتین (Pt) در جهت (۱۱۱) است. الگوی طیف XRD نشان می دهد که ساختار شبکه ای مربوط به بلور اکسید روی بدون هیچ گونه فاز ثانویه است. راستای غالب رشد بلوری (۰۰۲) است [۷۰].



شکل (۳-۱۵): طیف XRD مربوط به $Zn_{1-x}Mn_xO$ بصورت لایه نازک بر حسب درصد آلاینش [۷۰].

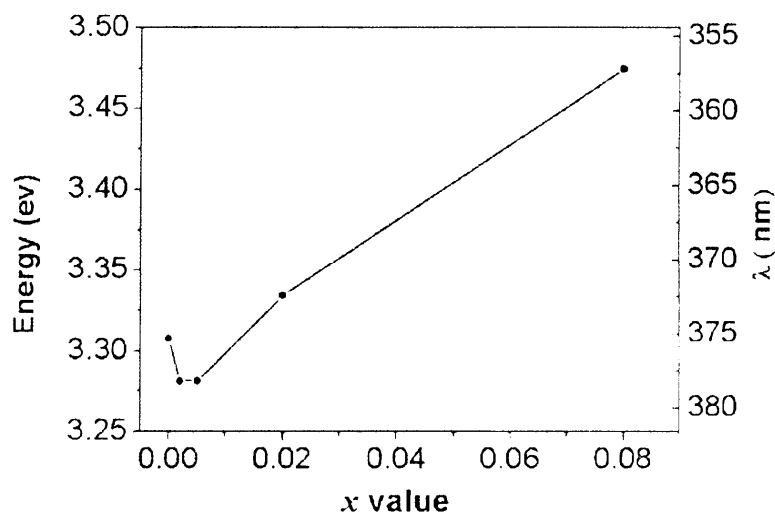
۳-۳-۲) بررسی خواص نوری

شکل (۳-۱۶) طیف جذبی اکسید روی آلائیده با درصدهای مختلف منگنز را نشان می دهد. این طیف نشان می دهد که در انرژیهای بالا جذب وجود دارد ولی در ناحیه مرئی طیف همه نمونه ها شفاف است و شفافیت با افزایش آرایش کمتر می شود [۷۱].



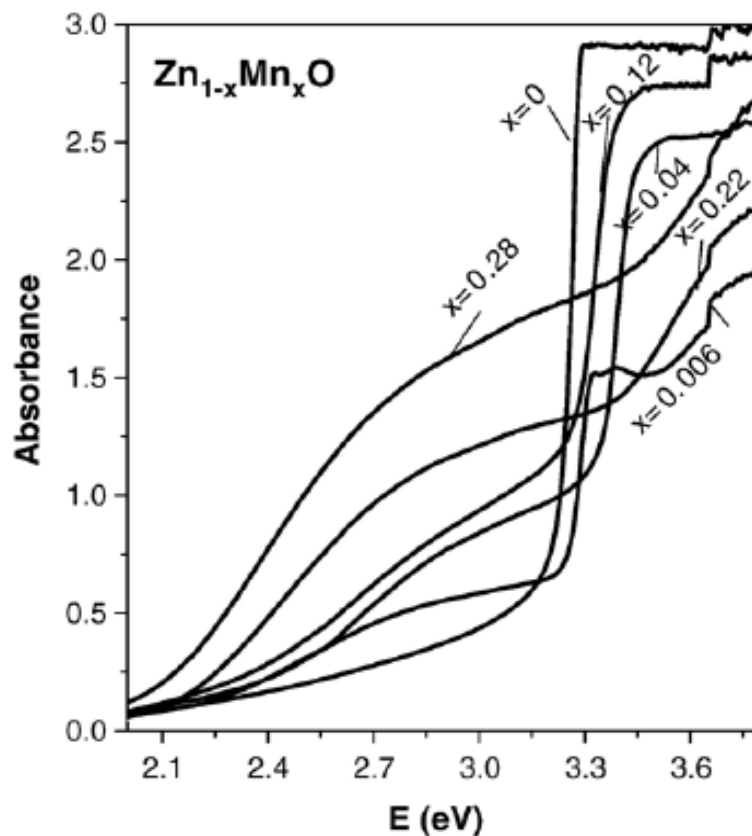
شکل (۳-۱۶): طیف جذبی اکسید روی آلائیده با درصدهای مختلف منگنز [۷۱].

شکل (۳-۱۷) انرژی گاف نمونه ها فوق را بر حسب درصد آرایش منگنز نشان می دهد. همانطوریکه دیده می شود برای آرایشهای کم، انرژی گاف کاهش می یابد ولی در آرایشهای بالا، انرژی گاف افزایش می یابد [۷۱].



شکل (۳-۱۷): انرژی گاف نمونه ها بر حسب درصد آرایش [۷۱].

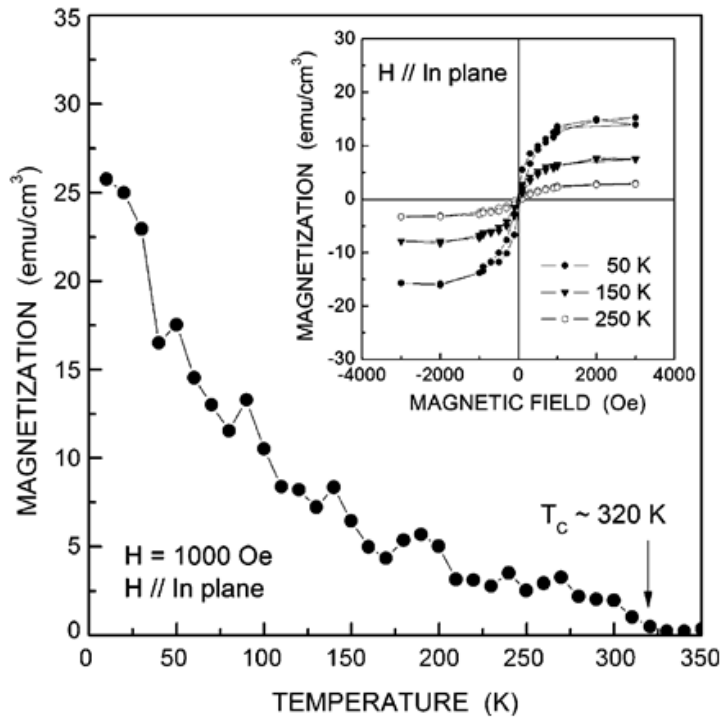
شکل (۳-۱۸) طیف جذبی نور تراگسیل در دمای اتاق را برای نمونه های که با درصدهای مختلف $Zn_{1-x}Mn_xO$ آلائیده شده اند را نشان می دهد. همانگونه که در این شکل دیده می شود برای نمونه خالص، جذب در طول موجهای حدود ۳۹۰ تا ۶۳۵ نانومتر از دیگر نمونه ها کمتر است که با افزایش درصد منگنز افزایش می یابد. انرژی گاف نمونه ها با افزایش مقادیر آلائش منگنز زیاد می شود [۷۲].



شکل (۳-۱۸): طیف جذبی اکسید روی آلائیده با درصدهای مختلف منگنز [۷۲].

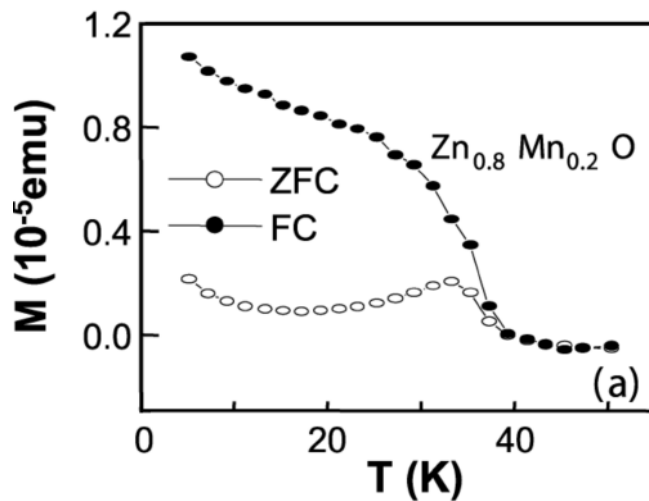
۳-۳-۳ بررسی خواص مغناطیس

شکل (۳-۱۹) منحنی مغناطش $M(T)$ را برای نمونه $Zn_{0.93}Mn_{0.07}O$ بعد از عملیات باز پخت در دمای $900^{\circ}C$ نشان می دهد. با توجه به شکل، مغناطش تا دمای $320K$ وجود دارد. این منحنی بخوبی نشان می دهد که افزایش دما باعث کاهش مغناطش ماده می شود [۷۳].



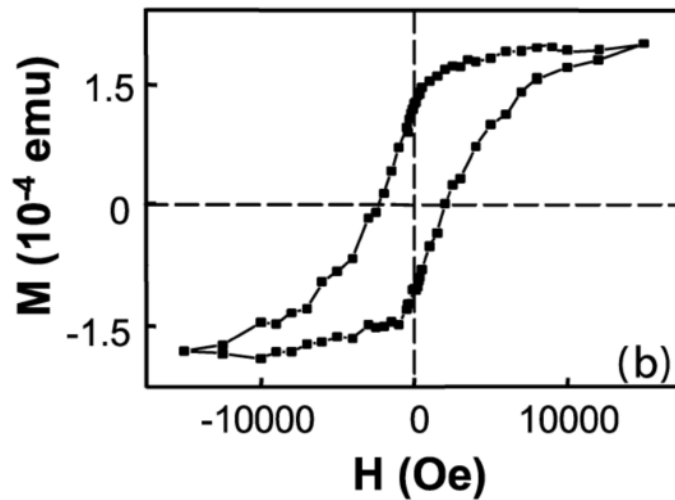
شکل (۳-۱۹): منحنی مغناطش بر حسب دما برای نمونه Zn_{0.93}Mn_{0.07}O. منحنی داخلی حلقه پسماند در دماهای ۵۰، ۱۵۰ و ۲۵۰ درجه کلوین برای این نمونه است [۷۳].

شکل (۳-۲۰) منحنی مغناطش نمونه Zn_{0.8}Mn_{0.2}O را در حضور و عدم حضور میدان مغناطیسی بر حسب تابعی از دما نشان می دهد. میدان مغناطیسی اعمالی در حدود ۴۰۰ Oe بوده است. در دمای حدود ۴۰ درجه کلوین رفتار منحنی مغناطش در حضور و عدم حضور میدان خارجی به یکدیگر نزدیک می شود. با توجه به این شکل، دمای کوری در حدود ۳۹ درجه کلوین است [۷۴].



شکل (۳-۲۰): مغناطش نمونه Zn_{0.8}Mn_{0.2}O در حضور و عدم حضور میدان مغناطیسی [۷۴].

شکل (۳-۲۱) حلقه پسماند همین نمونه را در دمای ۲۵ درجه کلون نشان می دهد. میدان اعمالی برای خنثی کردن مغناطش نمونه در حدود ۱/۲ کیلو اورستد است [۷۴].

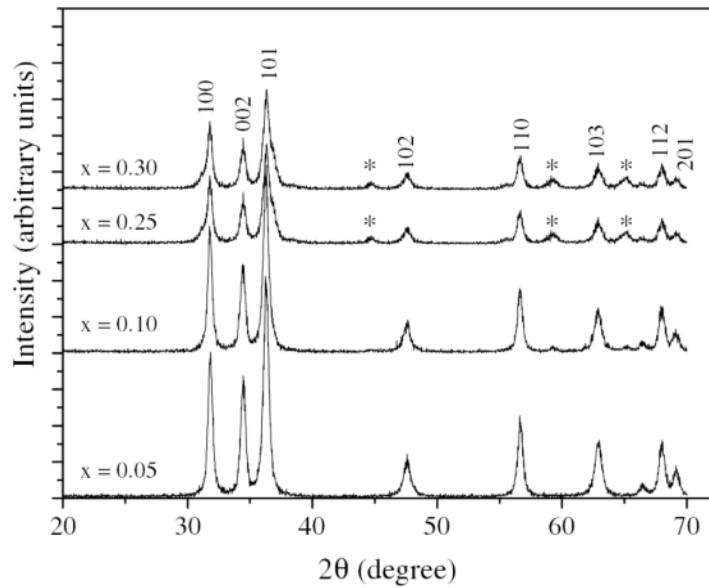


شکل (۳-۲۱): حلقه پسماند نمونه در دمای ۲۵ درجه کلون [۷۴].

۳-۴) آلیش اکسید روی با کبالت

۳-۴-۱) بررسی خواص ساختاری

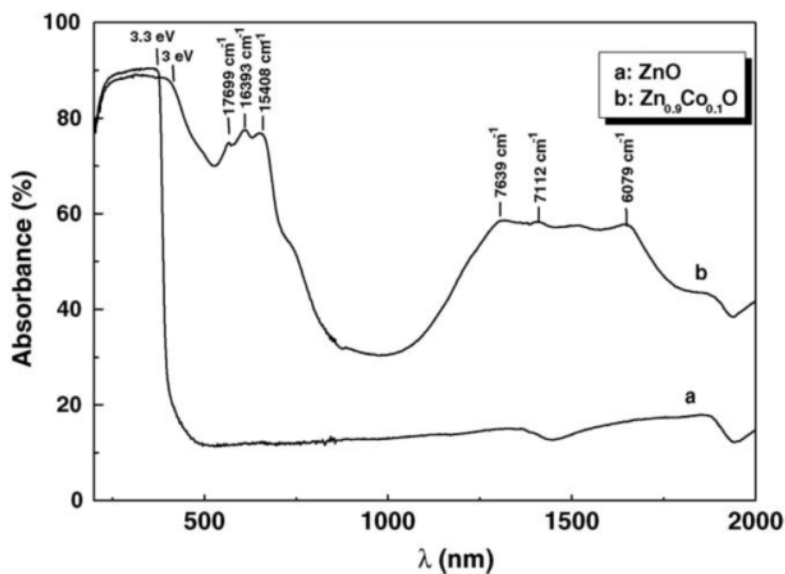
شکل (۳-۲۲) طیف XRD مربوط به نمونه های $Zn_{1-x}Co_xO$ در حالت پودری را نشان می دهد. مقدار آلیش کبالت در حدود ۰/۵۰، ۰، ۰/۱۰، ۰/۲۵ و ۰/۳۰ است. این طیفها نشان می دهند که با افزایش درصد آلیش، احتمال تشکیل فاز ثانویه $ZnCo_2O_4$ نیز افزایش می یابد. مقادیر پارامتر c بدست آمده نشان می دهد که با افزایش آلیش این پارامتر کوچکتر می شود که ممکن است بدلیل کوچکتر بودن شعاع یونی کبالت از روی باشد [۶۹].



شکل (۳-۲۲): طیف XRD کبالت با آلایشهای مختلف. علامت * قلهٔ مربوط به فاز ثانویه $ZnCo_2O_4$ است [۶۹].

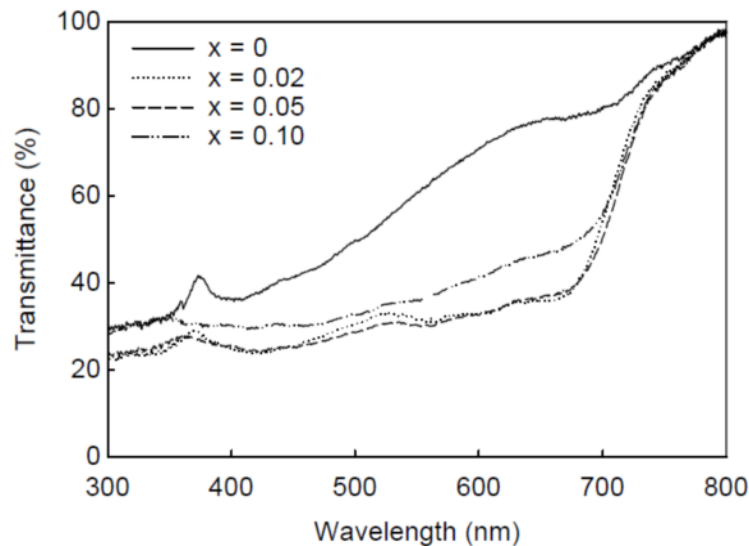
۲-۴-۳ بررسی خواص نوری

شکل (۳-۲۳) طیف جذبی نمونه های ZnO و $Zn_{0.9}Co_{0.1}O$ مورد مطالعه در حالت پودری را نشان می دهد. اکسید روی خالص تنها در انرژی $3/3 \text{ eV}$ دارای جذب قوی است که مربوط به جذب الکترونی است. همانطور که دیده می شود اکسید روی آلاییده با کبالت علاوه بر جذب الکترونی در انرژی 3 eV دارای جذب انرژیهای در دیگری نواحی نیز است که مربوط به جذب اتمی عنصر کبالت است. دیده می شود که آلایش کبالت انرژی گاف را کاهش می دهد [۷۵].



شکل (۳-۲۳): طیف جذبی در دمای اتاق برای نمونه ها [۷۵].

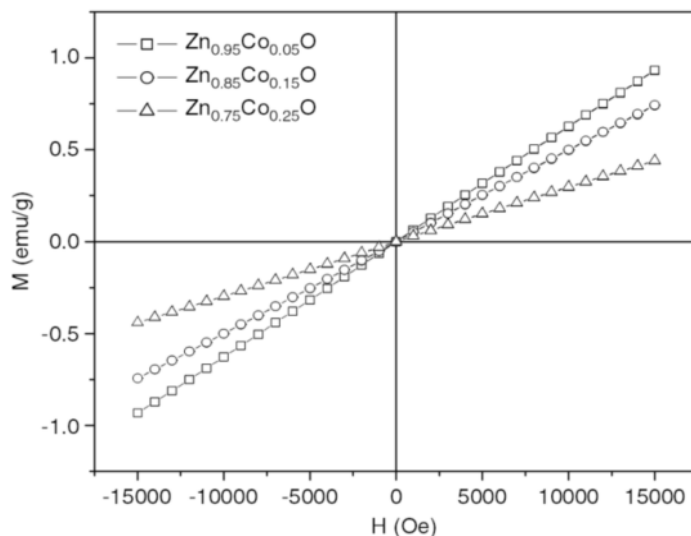
شکل (۳-۲۴) طیف تراگیسیل در دمای اتاق را برای نمونه های $Zn_{1-x}Co_xO$ نشان می دهد که کسر مولی x برابر با ۰، ۰/۰۲، ۰/۰۵ و ۰/۱ است. آرایش کبالت باعث کاهش طیف تراگیسیل می شود [۷۶].



شکل (۳-۲۴): طیف تراگیسیل نمونه ها در دمای اتاق برای نمونه ها [۷۶].

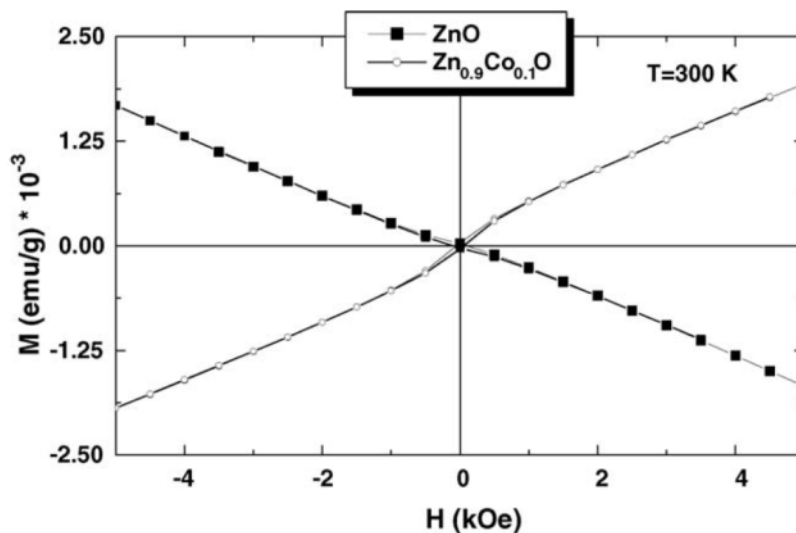
۳-۴-۳ بررسی خواص مغناطیسی

شکل (۳-۲۵) منحنی مغناطش نمونه های پودری $Zn_{1-x}Co_xO$ برحسب میدان اعمالی را برای آرایشهای ۰/۰۵، ۰/۱۵ و ۰/۲۵ نشان می دهد. این شکل بخوبی نشان می دهد که حلقه پسماندی برای نمونه ها وجود ندارد و نمونه ها خاصیت پارامغناطیسی دارند و هرچه درصد آرایش زیاد می شود مغناطش اشباع در هر میدان خارجی هم کمتر می گردد [۶۹].



شکل (۳-۲۵): منحنی مغناطش نمونه های پودری $Zn_{1-x}Co_xO$ برحسب میدان مغناطیسی اعمالی [۶۹].

شکل (۳-۲۶) منحنی حلقه پسماند نمونه های پودری ZnO و $Zn_{0.9}Co_{0.1}O$ در دمای اتاق را نشان می دهد. حلقه پسماند برای اکسید روی نشان می دهد که نمونه دیامغناطیس است در صورتی که نمونه آلاییده شده خاصیت پارامغناطیسی دارد [۷۷].

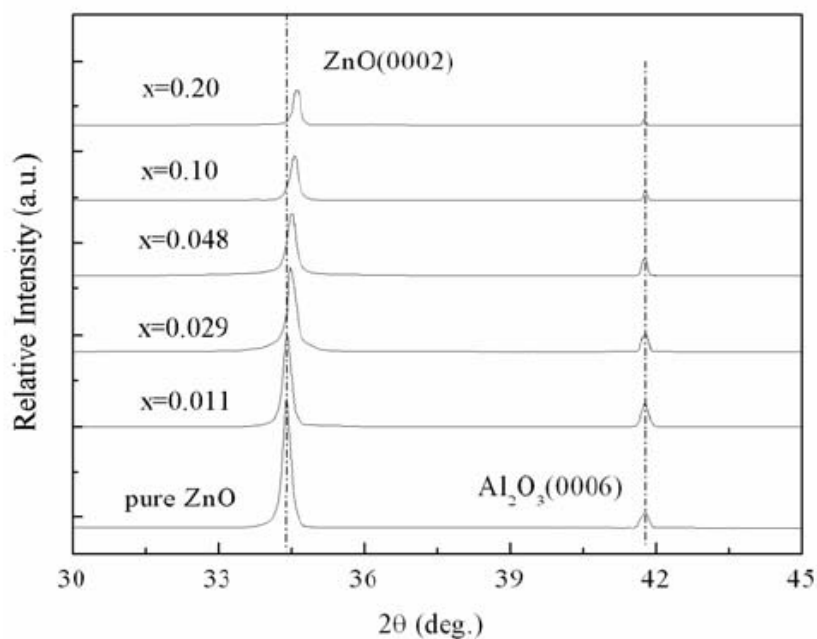


شکل (۳-۲۶): منحنی حلقه پسماند نمونه های پودری در دمای اتاق [۷۷].

۳-۵) آلایش اکسید روی با آهن

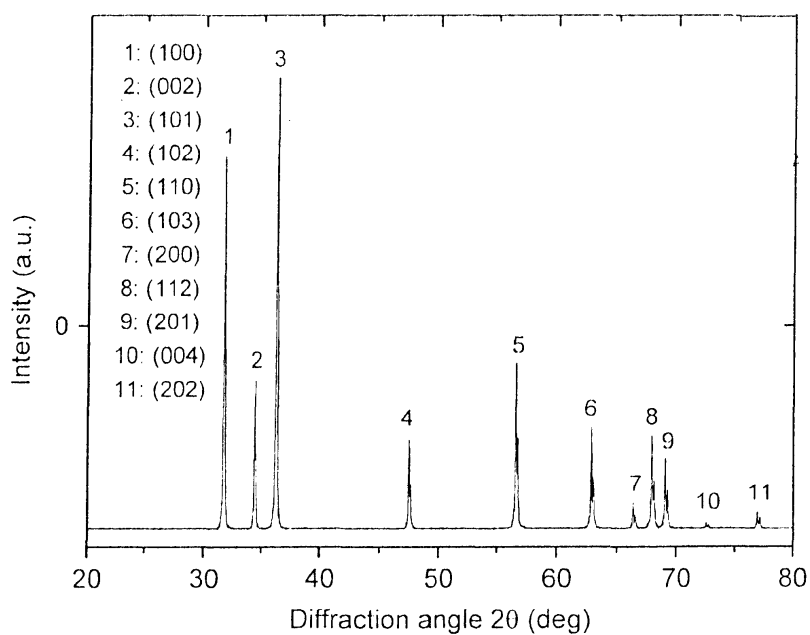
۳-۵-۱) بررسی خواص ساختاری

شکل (۳-۲۷) طیف XRD نمونه های $Zn_{1-x}Fe_xO$ با زیر لایه یاقوت را در دمای اتاق نشان می دهد. قله دومی، راستای (۰۰۰۶) مربوط به زیر لایه یاقوت است. این شکل نشان می دهد نمونه ها در جهت (۰۰۰۲) رشد یافته هستند. طیف به خوبی نشان می دهد که آلایش نمونه ها با آهن نه تنها زاویه پراش را به سمت زاویه های بالا جابجا کرده بلکه شدت طیف را نیز کاهش می دهد [۷۸].



شکل (۳-۲۷): طیف XRD نمونه های مورد مطالعه در دمای اتاق [۷۸].

طیف XRD در بازه ۲۰ تا ۸۰ درجه نمونه $Zn_{0.98}Fe_{0.02}O$ بصورت لایه نازک در شکل (۳-۲۸) نشان داده شده است. این طیف ساختار ششگوشی اکسید روی بدون تشکیل فاز ثانویه را نشان می دهد [۷۹].

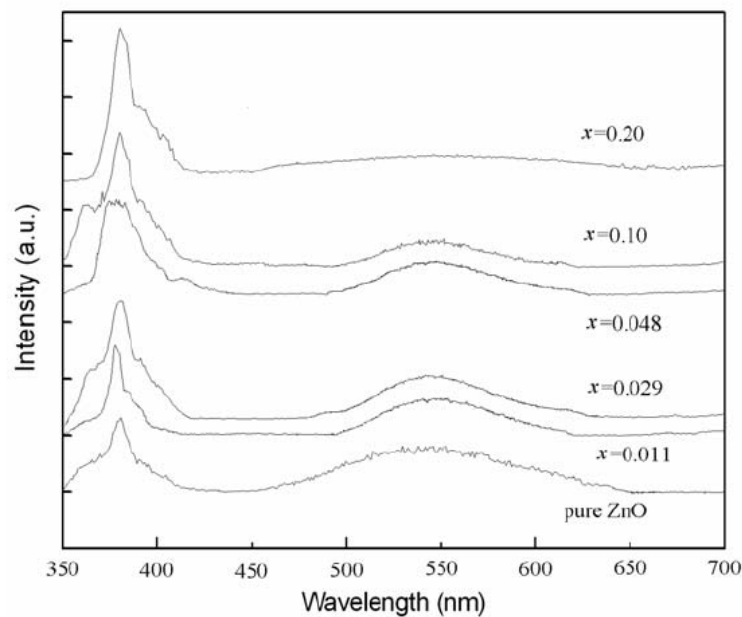


شکل (۳-۲۸): طیف XRD نمونه $Zn_{0.98}Fe_{0.02}O$ مورد مطالعه در دمای اتاق [۷۹].

۳-۵-۲) بررسی خواص نوری

شکل (۳-۲۹) اثر آهن بر طیف فوتولومینسانس^۱ اکسید روی را نشان می دهد. طیف بخوبی نشان

می دهد که آرایش نمونه به درصدهای مختلف آهن باعث انتقال به سمت نور قرمز می شود [۷۸].



شکل (۳-۲۹): اثر آرایش مختلف آهن بر طیف فوتولومینسانس اکسید روی [۷۸].

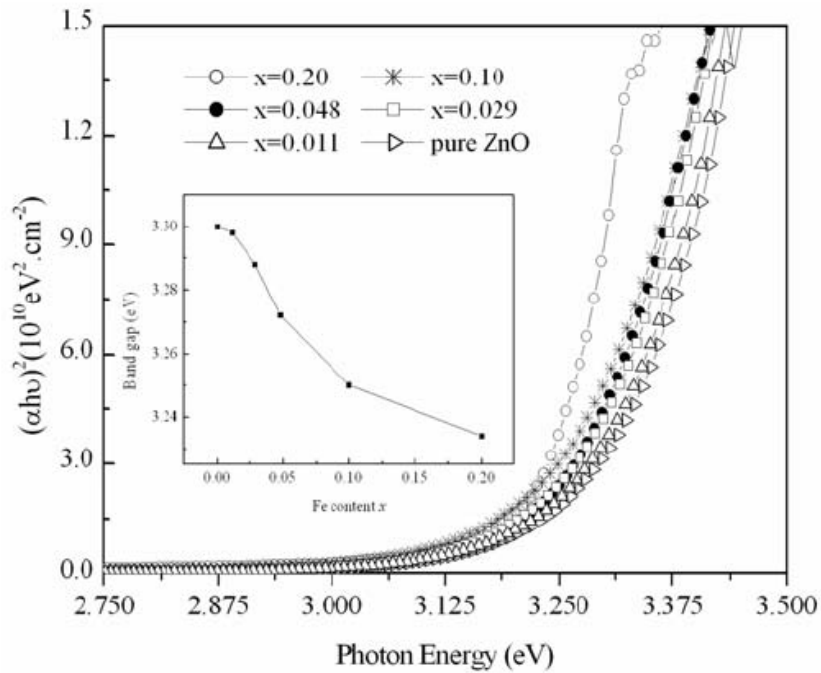
شکل (۳-۳۰) اثر آهن بر خواص نوری اکسید روی را نشان می دهد. انرژی گاف نمونه های

$Zn_{1-x}Fe_xO$ توسط روش بیضی سنجی^۲ و طیف فوتولومینسانس تعیین شده اند. نمودار داخلی شکل

(۳-۲۹) نشان می دهد که افزایش آرایش آهن باعث کاهش انرژی گاف نمونه ها می شود [۷۸].

¹ Photoluminescence

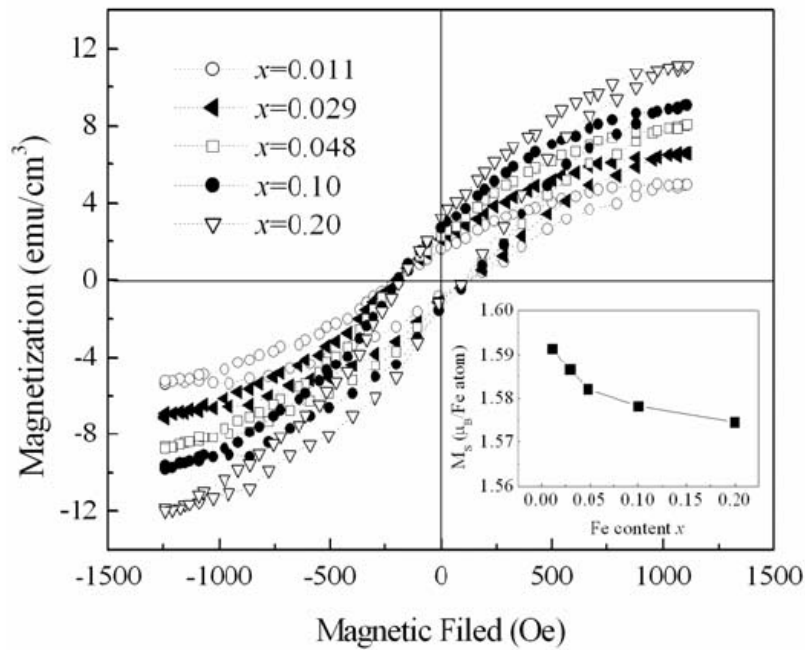
² Ellipsoidmeter



شکل (۳-۳۰): اثر آهن بر خواص نوری اکسید روی. شکل داخلی نمایش انرژی گاف نمونه های بر حسب درصد آلیش است [۷۸].

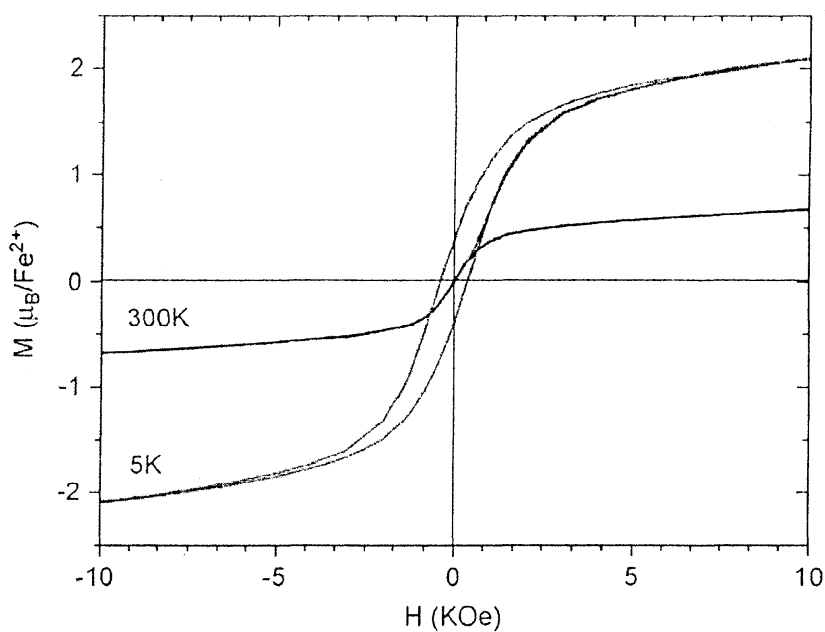
۳-۵-۳ بررسی خواص مغناطیسی

اثر آلیش آهن بر خواص مغناطیسی اکسید روی در شکل (۳-۳۱) نشان داده شده است. شکل داخلی وابستگی خاصیت مغناطیسی اکسید روی به درصدهای مختلف آلیش آهن را نشان می دهد. همانطوری که دیده می شود آلیش و افزایش آهن خاصیت مغناطیسی را در دمای اتاق کاهش می دهد [۷۸].



شکل (۳-۳۱): اثر آرایش آهن بر خواص مغناطیسی اکسید روی. شکل داخلی وابستگی خاصیت مغناطیسی اکسید روی به درصدهای مختلف آرایش آهن را نشان می دهد [۷۸].

حلقه پسماند نمونه $Zn_{0.98}Fe_{0.02}O$ در دمای ۵ و ۳۰۰ درجه کلوین در شکل (۳-۳۲) نشان داده شده است. نمودار به خوبی نشان می دهد که خاصیت مغناطیسی نمونه شامل آرایش دو درصدی آهن با افزایش دما کاهش می یابد [۷۸].

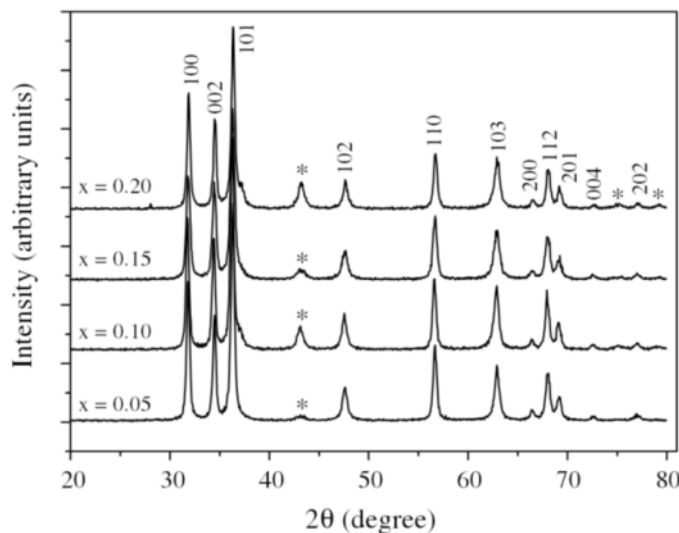


شکل (۳-۳۲): اثر آرایش آهن بر خواص مغناطیسی $Zn_{0.98}Fe_{0.02}O$ در دماهای ۵ و ۳۰۰ درجه کلوین [۷۸].

۳-۶) آرایش اکسید روی با نیکل

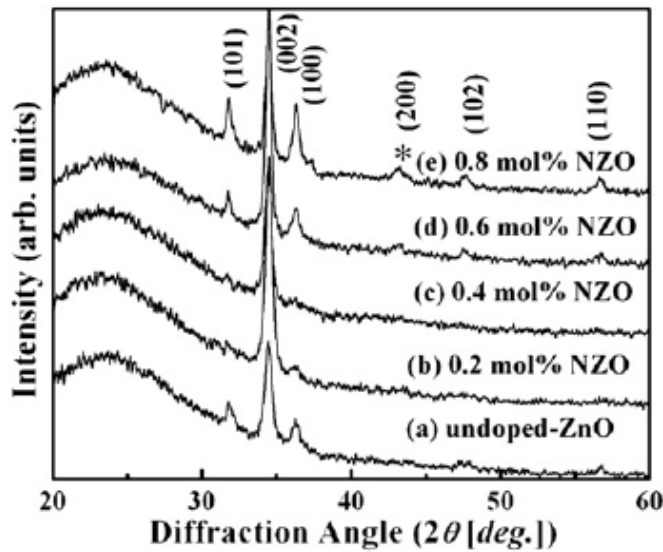
۳-۶-۱) بررسی خواص ساختاری

شکل (۳-۳۳) طیف XRD مربوط به نمونه های $Zn_{1-x}Ni_xO$ در حالت پودری را نشان می دهد. مقدار آرایش نیکل در حدود ۰/۰۵، ۰/۱، ۰/۱۵، ۰/۲ و ۰/۰۵ است. این طیف نشان می دهد که با افزایش درصد نیکل احتمال تشکیل فاز ثانویه NiO نیز افزایش می یابد. مقدار پارامتر c بدست آمده نشان می دهد که با افزایش آرایش نیکل این پارامتر کمتر می شود زیرا شعاع یونی نیکل از روی کمتر است [۸۰].



شکل (۳-۳۳): طیف XRD نمونه های ZnO شامل آرایشهای مختلف نیکل. علامت * قله مربوط به فاز ثانویه NiO است [۸۰].

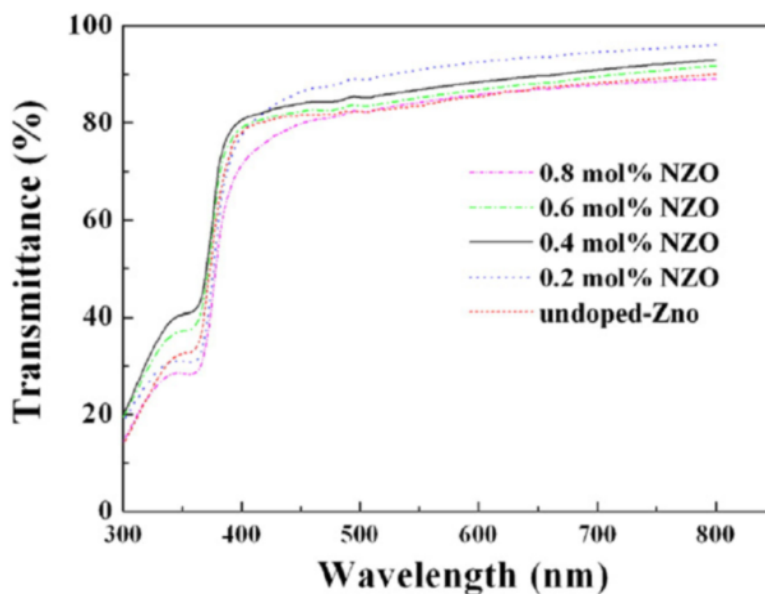
شکل (۳-۳۴) الگوی پراش طیف XRD نمونه های بازپخت شده اکسید روی شامل درصدهای مختلف نیکل را نشان می دهد. نرخ آرایش بین صفر تا هشت درصد مولی است. برای نمونه غیرآلاییده، زاویه پراش در زوایای ۱۶، ۱۷ و ۱۸ درجه رخ می دهد که به ترتیب متعلق به دسته صفحات (۱۰۱)، (۰۰۲) و (۱۰۰) است. این طیف یک ساختار بلور ششگوشی را نشان می دهد. همانطوری که از این شکل دیده می شود آرایش نیکل ساختار بلوری روی را از بین نمی برد و افزایش آن باعث بهبود شکل گیری جهت (۰۰۲) می شود. آرایش زیاد نیکل باعث بوجود آمدن فاز ثانویه اکسید نیکل می شود [۸۱].



شکل (۳-۳۴): طیف XRD اکسید روی با آلیشهای مختلف نیکل. علامت * قله مربوط به فاز ثانویه NiO است [۸۱].

۳-۶-۲) بررسی خواص نور

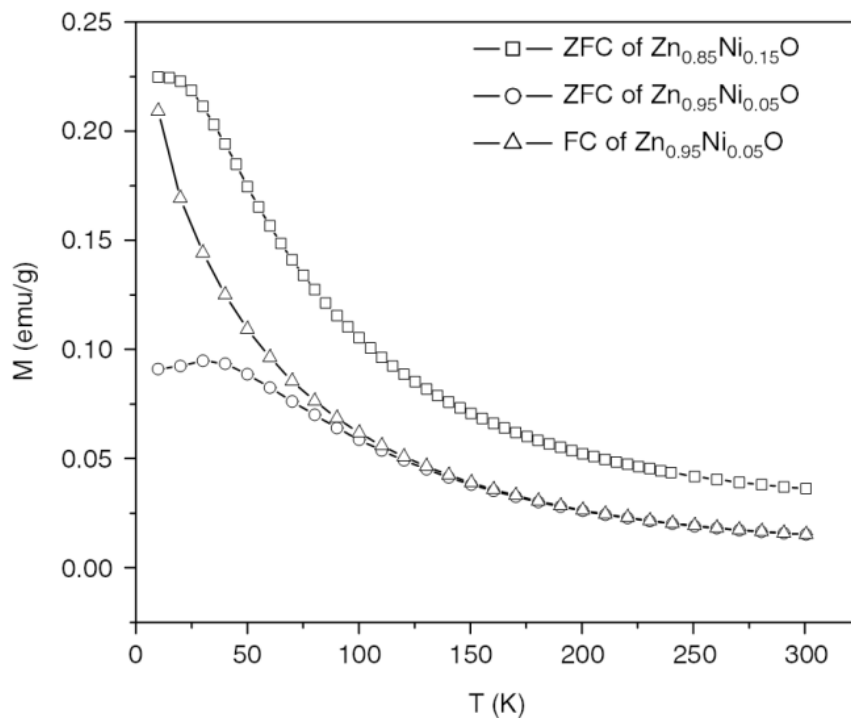
شکل (۳-۳۵) طیف تراگسیل لایه های اکسید روی آلائیده با درصدهای مختلف نیکل که بر روی زیر لایه شیشه ای کورنیک ۷۰۵۹ رشد داده شده اند، را نشان می دهد. همانطوری که دیده می شود همه نمونه ها در ناحیه مرئی شفاف هستند. کمترین مقدار طیف تراگسیل مربوط به بالاترین درصد آلیش است. نمونه های با پارامتر C بزرگتر دارای شفافیت بیشتری هستند [۸۱].



شکل (۳-۳۵): طیف تراگسیل لایه های اکسید روی آلائیده با درصدهای مختلف نیکل [۸۱].

۳-۶-۳ بررسی خواص مغناطیس

شکل (۳-۳۶) وابستگی دمائی مغناطش نمونه های پودری $Zn_{1-x}Ni_xO$ را نشان می دهد. مغناطش بدست آمده هم در حضور و هم در عدم حضور میدان مغناطیسی خارجی است. این منحنی ها به خوبی نشان می دهند که نمونه ها دارای دمای کوری بالائی هستند و نیز نشان می دهند که مغناطش با افزایش ناخالصی افزایش می یابد. حضور میدان مغناطیسی در دماهای بالاتر از ۱۱۰ درجه کلوین تاثیری روی مغناطش ماده ندارد ولی در دمای پائین تر از آن اختلاف قابل توجهی را نشان می دهد [۶۹].



شکل (۳-۳۶) وابستگی دمائی مغناطش نمونه های $Zn_{1-x}Ni_xO$ [۶۹].

فصل چهارم

بررسی شرایط محیطی بر روی خواص فیزیکی ZnO:Mn

۴-۱) مقمه

آلایش ZnO با منگنز باعث می شود که ویژگیهای ساختاری، نوری، مغناطیسی و تراپردی این ماده تغییر کند. ترکیبات $Zn_{1-x}Mn_xO$ به روشهای مختلفی از جمله تکنیک سل-ژل رشد داده می شوند. در این روش پارامترهای مختلفی برای کنترل فرآیند رشد وجود دارد. در این فصل تأثیر بعضی از پارامترهای محیطی بر فرآیند رشد از جمله ضخامت لایه ها، دمای بازپخت و انتخاب نوع حلال مورد مطالعه قرار گرفته است.

۴-۲) اثر ضخامت بر روی خواص فیزیکی ZnO:Mn

خواص فیزیکی مواد از جمله خواص نوری، مغناطیسی، تراپرد و ساختاری تابعی از ضخامت و ابعاد آن است. برای مطالعه اثر ضخامت، لایه های نازک ZnO با آلایش ۳ در صد منگنز و با ضخامت های متفاوت به روش سل-ژل تهیه شده و خواص نوری آنها بر حسب تابعی از ضخامت و دمای بازپخت مورد مطالعه قرار گرفته است. برای تهیه نمونه های ZnO:Mn از استات روی $[Zn(CH_3COO)_2 \cdot 2H_2O]$ برای منبع منگنز $[Mn(CH_3COO)_2 \cdot 4H_2O]$ برای منبع منگنز، مایع ۲- متوکسی اتانول (DME) $[C_3H_8O_2]$ برای حلال، مایع مونو اتانولامین (MEA) $[C_2H_7NO]$ برای پایداری محلول استفاده شده است. تمام مواد شیمیائی مصرفی با بهترین درصد خلوص از محصولات شرکت مرک می باشند. در این روش برای تهیه نانو فیلم های مورد نظر ابتدا در دمای اتاق، استات روی و منگنز را با نسبت اتمی $Mn/Zn = 3\%$ ، در محلول DME و MEA با نسبت $[MEA]/[Zn^{+2}] = 1$ حل نمودیم. محلول نهائی با همزن مغناطیسی در دمای $80^\circ C$ به مدت یک ساعت همزده شد، که در نهایت یک محلول یکنواخت و شفاف حاصل گردید. در دمای اتاق، بعد از ۲۴ ساعت به روش غوطه ورسازی عمل لایه نشانی صورت گرفت. پس از انجام عملیات تمیز کاری زیر لایه های شیشه ای، آنها را در جایگاه مربوطه به صورت عمودی قرار دادیم و سپس با سرعت یک میلیمتر بر ثانیه زیر لایه را از سل خارج کردیم و به مدت بیست دقیقه آن را در یک کوره با دمای اولیه $200^\circ C$ حرارت دادیم تا قسمتی از

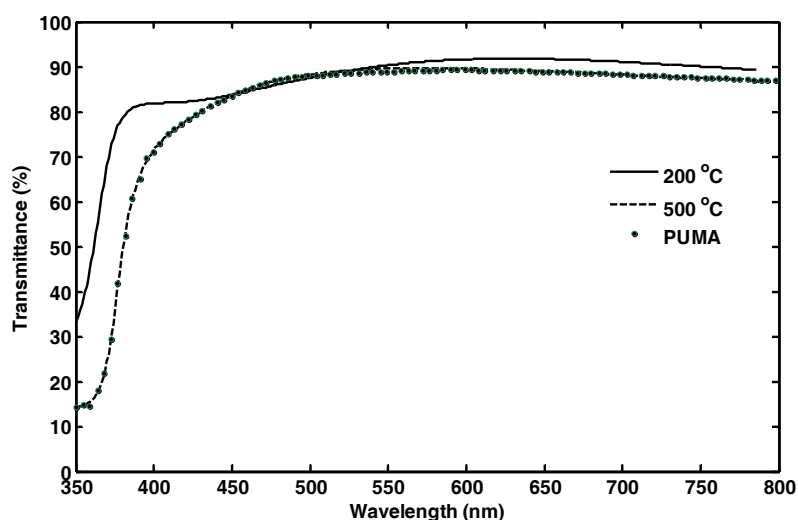
مواد آلی محلول در لایه تبخیر شوند. بدین ترتیب عمل خشک سازی اولیه صورت می گیرد. عملیات لایه نشانی را برای دو نمونه یکی با سه بار و دیگری با پنج بار تکرار انجام دادیم. در نهایت نانو فیلم های تهیه شده را برای عملیات بازپخت نهائی در کوره با دمای ۵۰۰ درجه سلسیوس به مدت یک ساعت و نیم حرارت دادیم. سپس نانو فیلم ها را برای انجام آزمایشهای فیزیکی تا دمای اتاق به طور طبیعی سرد کردیم (لازم به ذکر است که ضخامت نمونه سه لایه (پنج لایه) از روش پوما (پیوست الف) محاسبه شده است که برابر ۱۶۰ nm (۲۵۰) می باشد). برای تعیین PH و ویسکوزیته محیط سلی به ترتیب از PH متر مدل Jenway, 35.5 و NDJ-1 استفاده شده است. طیف تراگیل فیلم ها با استفاده از دستگاه طیف سنج مدل Cary 100 شرکت Varian بدست آمده اند. ثابتهای اپتیکی لایه ها با استفاده از فلوجارت روش کمینه کردن غیر مقید نقاط و برازش آن با روابط کوشی در لایه های نازک محاسبه شده است^[۸۲]. ضریب شکست محاسبه شده در کلیه نمونه ها در جهت محور C می باشد. مقدار PH متری محیط نشان داد که محیط سلی تقریباً قلیائی (۷/۶) با ویسکوزیته ۳/۱ mPa.s است.

۴-۲-۱) آنالیز نمونه اول با ضخامت سه لایه

۴-۲-۱-۱) طیف تراگیل

شکل (۴-۱) طیف تراگیل نمونه ها را در دماهای ۲۰۰ °C و ۵۰۰ °C نشان می دهد. طیف تراگیل نمونه در دمای ۲۰۰ درجه سلسیوس نه تنها از طیف تراگیل در ۵۰۰ درجه سلسیوس اندکی بیشتر است بلکه بعلاوه سطوح صاف و موازی کمی فرم نوسانی دارد. تغییرات طیف تراگیل در ناحیه مرئی بین ۸۰ تا ۹۰ درصد است. در لبه جذب کاهش شدید طیف دیده می شود که مربوط به برهمکنش الکترون و فوتون است. دمای باز پخت ۵۰۰ درجه سلسیوس نه تنها باعث تبخیر مواد آلی می شود بلکه ساختار بلوری را شکل می دهد. طیف تراگیل حاصل از محاسبات روش پوما^۱ در دمای ۵۰۰ °C به ازای ضخامت ۱۶۰ nm به عنوان پارامتر برازشی، توافق خوبی با داده های تجربی دارد.

^۱ Pointwise Unconstrained Minimization Approach (PUMA)



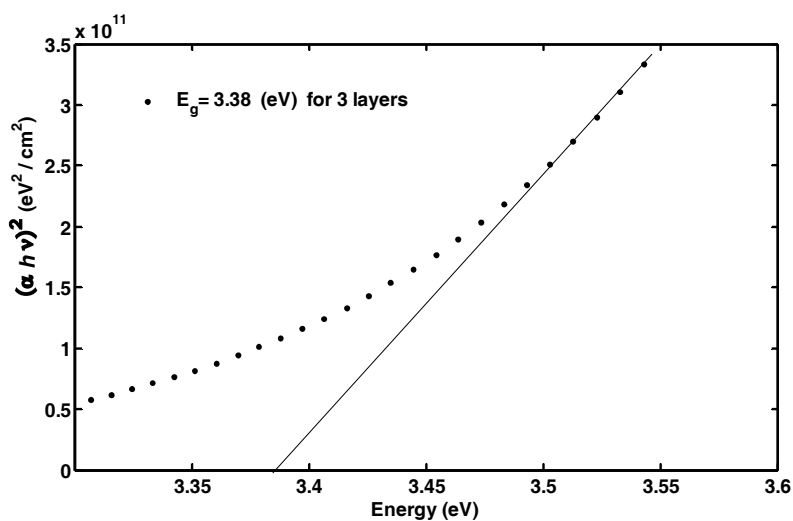
شکل (۱-۴): طیف تراگسیل نمونه‌ها در دمای خشک‌سازی و بازپخت شده.

۲-۱-۲-۴ انرژی گاف نواری

گاف انرژی مستقیم نمونه‌ها بر اساس تئوری کوانتومی جذب نوری در مواد به روش برون‌یابی از رابطه (۱-۴) محاسبه شده است.

$$(\alpha h\nu)^2 = M(h\nu - E_g) \quad (1-4)$$

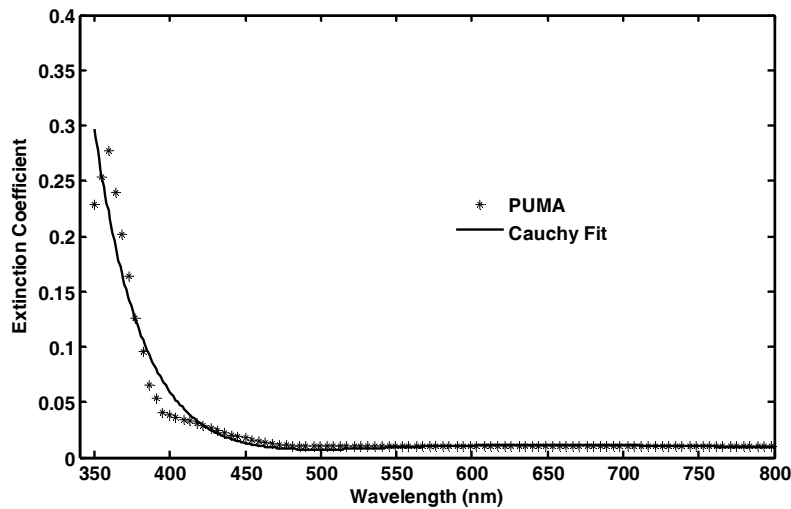
در این رابطه α ضریب جذب، $h\nu$ انرژی فوتون تابشی E_g انرژی گاف نواری نمونه است. در این رابطه M مقدار ثابت است. با توجه به رابطه (۱-۴)، گاف نواری نمونه بازپخت شده محاسبه شد که نتیجه آن در شکل (۲-۴) رسم شده است. مقدار محاسبه شده آن حدود 3.38 eV می‌باشد.



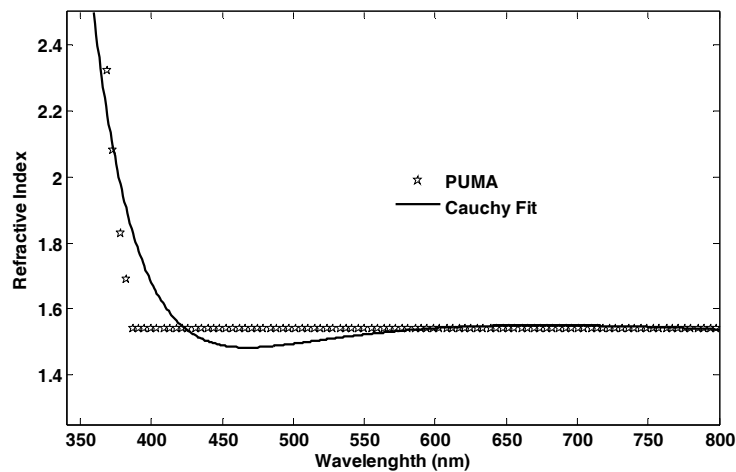
شکل (۲-۴): محاسبه انرژی گاف نواری نمونه بازپخت شده.

۳-۱-۲-۴ تعیین ثابتهای نوری

در شکل (۳-۴) ضریب خاموشی با روش محاسباتی پوما و برازش آن با مدل کوشی (پیوست-الف) را نشان می دهد. تغییرات ضریب خاموشی بین ۰/۰۱ تا ۰/۴ است که هر چه به لبه جذب نزدیک می شود مقدار آن افزایش می یابد که نشاندهنده برهمکنش قوی بین الکترون و فوتون است. شکل (۴-۴) نمودار ضریب شکست بر حسب تابعی از طول موج نور فرودی را نشان می دهد. ضریب شکست در طول موجهای بلند تغییرات چندانی ندارد و بیشتر تغییرات آن مربوط به لبه جذب است. حدود تغییرات آن بین ۱/۵ تا ۲/۴ است.



شکل(۳-۴): محاسبه ضریب خاموشی با روش پوما و برازش آن با روابط کوشی.

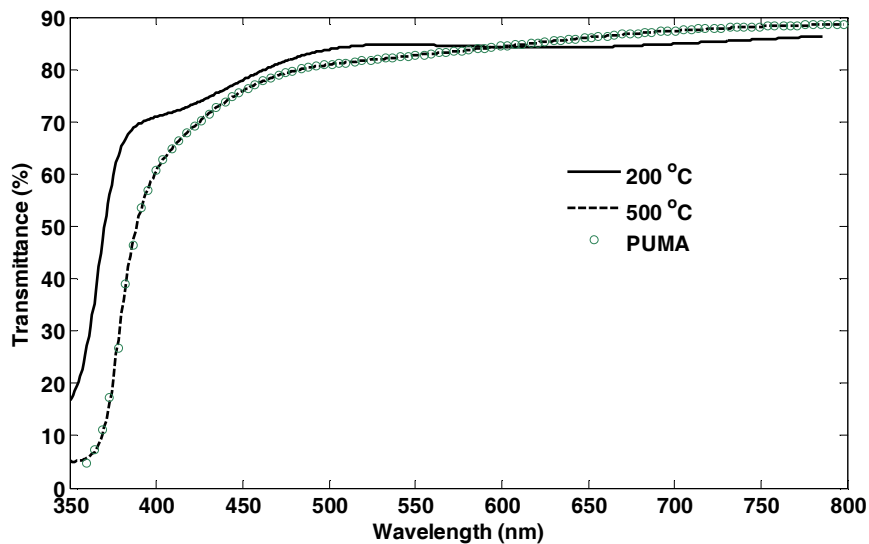


شکل(۴-۴): محاسبه ضریب شکست با روش پوما و برازش آن با روابط کوشی.

۲-۲-۴) آنالیز نمونه دوم با ضخامت پنج لایه

۱-۲-۲-۴) طیف تراگسیل

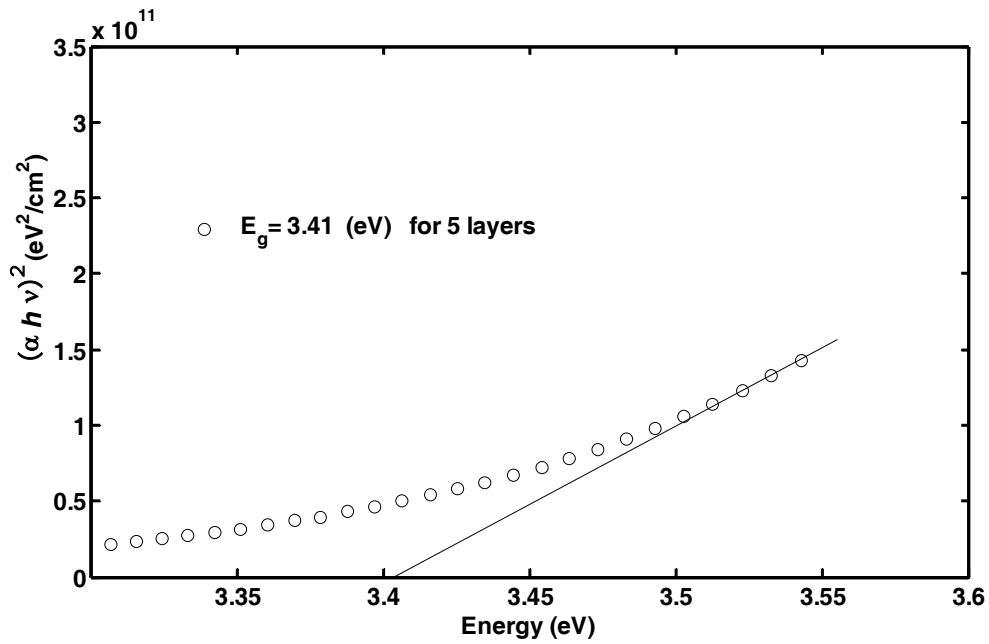
شکل (۴-۵) طیف تراگسیل نمونه در دمای خشک سازی 200°C و بازپخت 500°C را نشان می دهد. تغییرات طیف در ناحیه مرئی بین ۸۰ تا ۹۰ درصد است. طیف نمونه در دمای خشک سازی 200°C تا حدود 600 nm بخاطر وجود مواد آلی شفافتر از طیف در دمای باز پخت 500°C است زیرا در این دما تمام مواد آلی تبخیر شده و نمونه دارای ساختار بلوری کاملتر می باشد. بعلت سطح صاف و موازی نمونه در دمای خشک سازی نوار های تداخلی مشاهده می شود. چنین نوار تداخلی در دمای باز پخت 500°C مشاهده نمی شود. هر چه طول موج فرودی کوتاه تر می شود، درصد طیف تراگسیل کمتر می شود تا به حداقل خود در لبه جذب می رسد. طیف عبوری محاسبه شده با روش پوما توافق خوبی با داده های تجربی دارد.



شکل (۴-۵): طیف تراگسیل نمونه در دمای خشک سازی 200°C و بازپخت 500°C .

۲-۲-۲-۴) انرژی گاف نواری

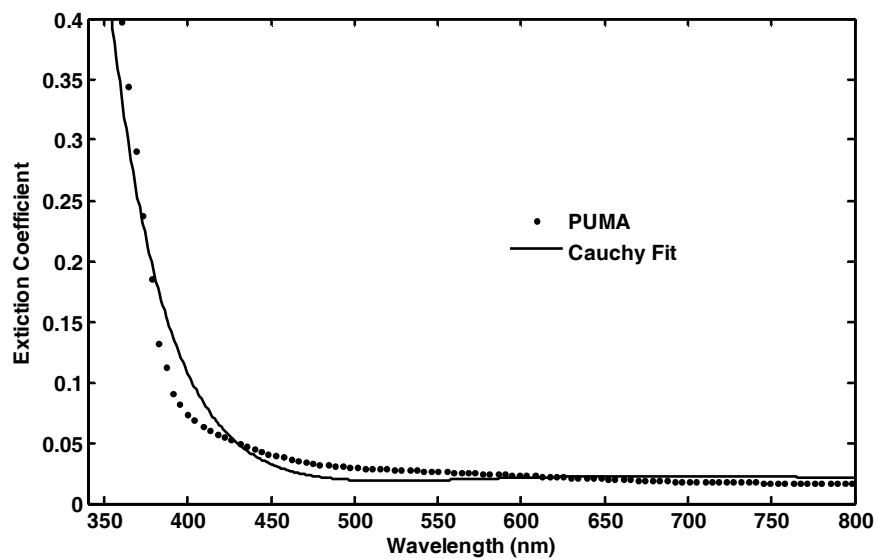
گاف نواری نمونه بازپخت شده با استفاده از رابطه (۴-۱) محاسبه گردید که نتیجه آن در شکل (۴-۶) رسم شده است. مقدار محاسبه شده آن حدود 3.41 eV می باشد.



شکل (۴-۶): محاسبه انرژی گاف نواری نمونه در دمای بازپخت 500°C .

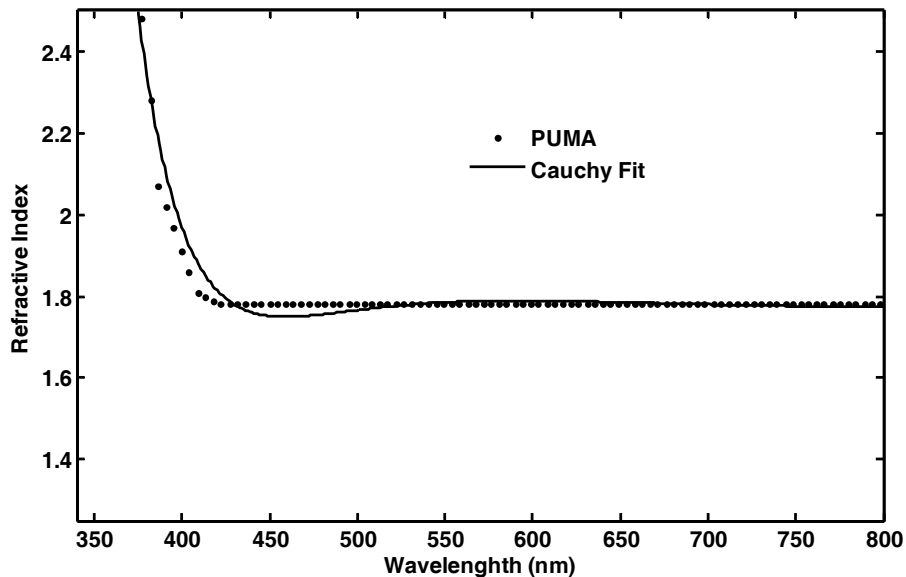
۳-۲-۲-۴ تعیین ثابتهای نوری

شکل (۴-۷) ضریب خاموشی محاسبه شده با روش پوما که با معادله کوشی برازش شده است را نشان می دهد. حدود تغییرات آن بین 0.1 تا 0.4 است و در طول موجهای بلند تغییرات قابل توجه ای ندارد ولی در طول موجهای نزدیک لبه جذب سریعاً افزایش می یابد.



شکل (۴-۷): ضریب خاموشی محاسبه شده با روش پوما و برازش آن با معادله کوشی.

در شکل (۸-۴) ضریب شکست محاسبه شده حاصل از روش پوما بر حسب تابعی از طول موج نشان داده شده است. حدود تغییرات آن بین ۱/۷ تا ۲/۵ است.

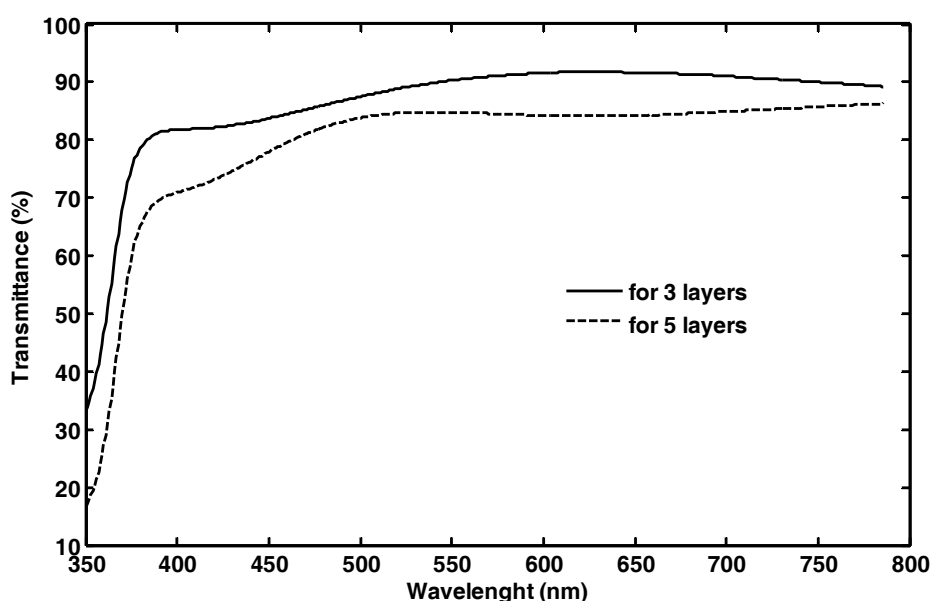


شکل (۸-۴): محاسبه ضریب شکست با روش پوما و برازش آن با روابط کوشی.

۳-۲-۴ بحث و نتایج

۲-۳-۲-۴-۱ طیف تراگسیل در دمای ۲۰۰ °C

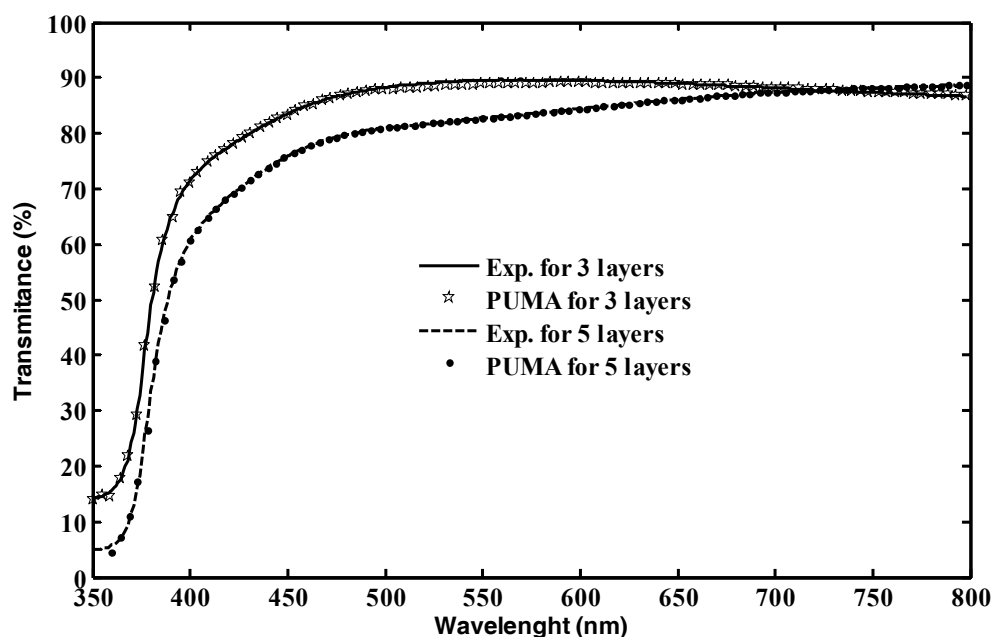
شکل (۹-۴) طیف نور تراگسیل نانو فیلم های سه و پنج لایه $Zn_{0.97}Mn_{0.03}O$ را که در دمای اتاق ثبت شده است به ازای دمای خشک سازی اولیه $200^{\circ}C$ نشان می دهد. این شکل به خوبی نشان می دهد که طیف تراگسیل مربوط به لایه با ضخامت بزرگتر کاهش بیشتری می یابد. علت این کاهش می تواند به دلیل افزایش ضخامت لایه و مسیر نور عبوری از ماده و در نتیجه برهمکنش بیشتر نور با آن باشد. این برهمکنش به شکل پراکندگی از اتمها یا حاملهای بار (الکترون/حفره)، انعکاس و جذب ظاهر شده و شدت نور ورودی را کاهش می دهد و انتظار کاهش طیف تراگسیل را داریم.



شکل (۴-۹): نمودار طیف تراگسیل تجربی در دمای خشک سازی اولیه 200°C .

۲-۳-۲-۴ طیف تراگسیل در دمای 500°C

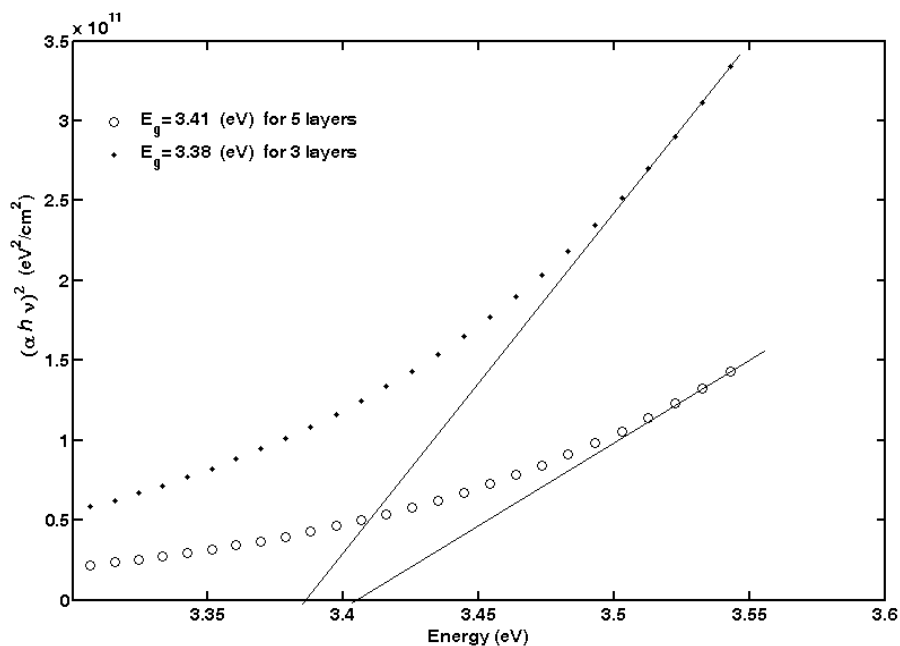
طیف نور تراگسیل نمونه های رشد داده شده به ازای دما خشک سازی نهائی 500°C ، در شکل (۴-۱۰) نشان داده شده است. همانطور که در شکل دیده می شود تغییر شفافیت در اثر افزایش ضخامت ممکن است به این دلیل باشد که سطوح لایه نشانی در این وضعیت با هم موازی نبوده و به دلیل انعکاس های داخلی و تشکیل نوار های تداخلی شفافیت کاهش یابد. بعلت تشکیل ساختار بلوری در دمای بازپخت 500°C و نیز تبخیر بیشتر مواد آلی انتظار داریم شفافیت اندکی کاهش یابد. مقایسه شکل های (۴-۹) و (۴-۱۰) این امر را نشان می دهد. تراگسیل کلی نمونه های تهیه شده در دمای 500°C در طول موجهای پایین تر از حدود ۴۵۰ نانومتر شروع به کاهش می کند. طیفهای تراگسیل نمونه به ازای طول موجهای بالاتر از حدود ۷۰۰ نانومتر جابجا می شوند که بررسی علت آن نیازمند مطالعات بیشتری است. با استفاده از روش پوما طیف تراگسیل نمونه ها بر حسب طول موج را محاسبه که نتایج آن در شکل (۴-۱۰) رسم شده است که توافق خوبی با داده های تجربی دارد.



شکل (۴-۱۰): نمودار طیف تراگسیل تجربی و تئوری نمونه ها در دمای بازپخت.

۴-۲-۳-۳ محاسبه گاف نواری

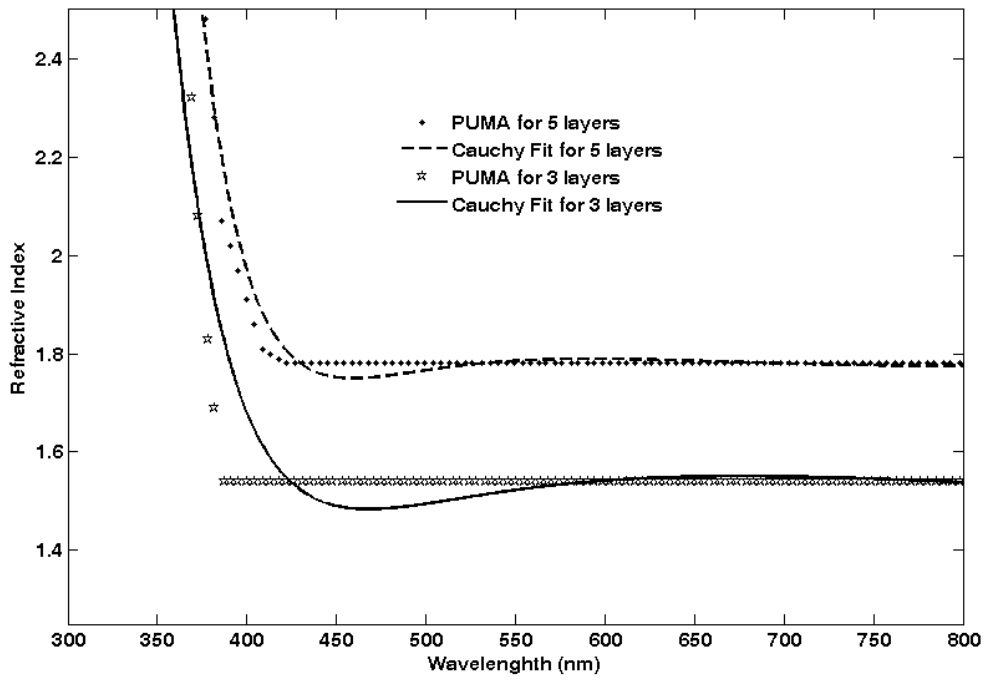
شکل (۴-۱۱) تغییرات $(\alpha h\nu)^2$ نمونه ها در دمای خشک سازی نهائی 500°C را برحسب انرژی نشان می دهد که α ضریب جذب و $h\nu$ انرژی فوتون ورودی است. از نمودار می توان نتیجه گرفت که انرژی گاف $\text{Zn}_{0.97}\text{Mn}_{0.03}\text{O}$ با تغییرات ضخامت از مقدار $3/38$ الکترون ولت به مقدار $3/41$ الکترون ولت تغییر می کند که نشان می دهد با افزایش ضخامت گاف انرژی افزایش می یابد. انرژی ساختار کپه ای MnO در حدود $4/2$ eV است، بنابراین انتظار می رود که با آرایش منگنز در ZnO طبق قانون وگارد (رابطه (۲-۵))، گاف انرژی تا حدودی بسته به میزان آرایش افزایش یابد. می توان گفت هرچه ضخامت نمونه کم باشد پتانسیل در رفتگی ناشی از کرنش و تنش در ناحیه فصل مشترک افزایش می یابد که نتیجه آن به شکل کاهش انرژی گاف نواری ماده ظاهر می شود [۸۳].



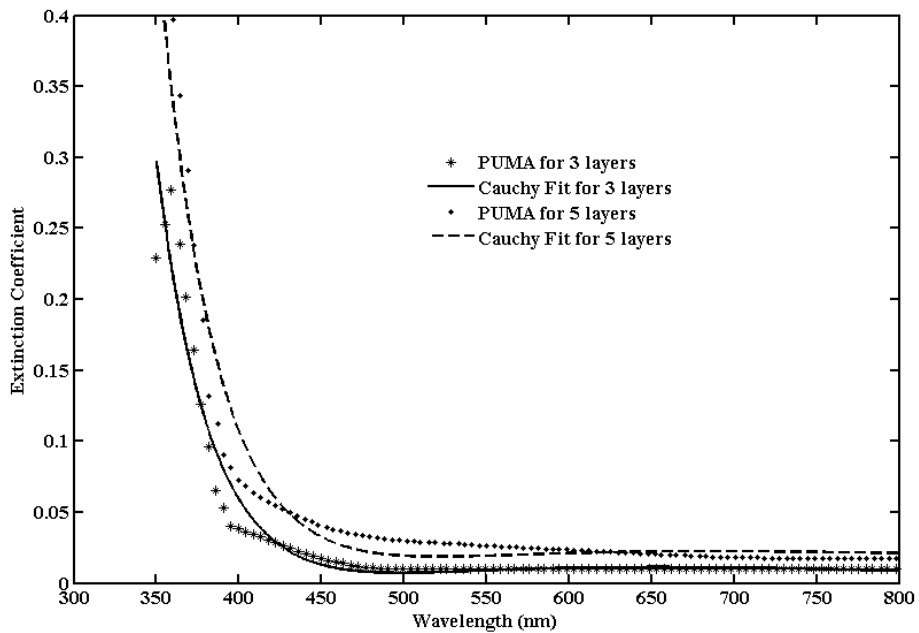
شکل (۴-۱۱): محاسبه انرژی گاف نانو فیلم های بازپخت شده $Zn_{0.97}Mn_{0.03}O$ با ضخامتهای مختلف.

۴-۳-۲-۴ تعیین ثابتهای نوری

شکلهای (۴-۱۲) و (۴-۱۳) نمودار تغییرات ضریب شکست و ضریب خاموشی بر حسب طول موج نمونه های سه و پنج لایه ای را نشان می دهند. برای هر دو نمونه، ضریب شکست و ضریب خاموشی در طول موجهای بزرگتر از حدود ۴۵۰ نانومتر ابتدا مقداری کاهش و سپس تقریباً ثابت است ولی در طول موجهای کوچکتر از آن مقادیر بزرگی به خود می گیرند (لبه های جذب). این شکل ها همچنین نشان می دهند که تعداد لایه های، لایه نشانی شده با ضریب شکست و ضریب خاموشی رابطه مستقیم دارد یعنی هر چه ضخامت نانو فیلمها بیشتر (کمتر) شود ضریب شکست و ضریب خاموشی بزرگتر (کوچکتر) می شود که می تواند به این دلیل باشد که بر همکنش نور با الکترون ها و اتم های ماده بیشتر (کمتر) می شود.



شکل (۴-۱۲): نمودار تغییرات ضریب شکست تئوری و برازشی نانو فیلمهای بازپخت شده $Zn_{0.97}Mn_{0.03}O$ برای نمونه هایی با سه و پنج لایه.



شکل (۴-۱۳): نمودار تغییرات ضریب خاموشی تئوری و برازشی نانو فیلمهای بازپخت شده $Zn_{0.97}Mn_{0.03}O$ برای نمونه هایی با سه و پنج لایه.

۴-۲-۳-۵) نتیجه‌گیری

در این مطالعه، دو نوع نانو فیلم ZnO:Mn با آرایش یکسان، با ضخامت‌های مختلف در دماهای باز پخت 200°C و 500°C ، به روش سل-ژل رشد داده شده‌اند. طیف تراگسیل نمونه‌ها اندازه‌گیری شد. با استفاده از طیف سنجی اپتیکی و محاسبات پوما، ثوابت اپتیکی را محاسبه کردیم. از مجموعه کارهای انجام شده به روش تجربی و تئوری می‌توان نتیجه گرفت که هرچه دمای بازپخت و ضخامت نمونه‌ها افزایش یابد ثوابت اپتیکی و گاف انرژی ماده افزایش و طیف تراگسیل اندکی کاهش می‌یابد.

۴-۳) اثر عملیات حرارتی بر روی خواص فیزیکی ZnO:Mn

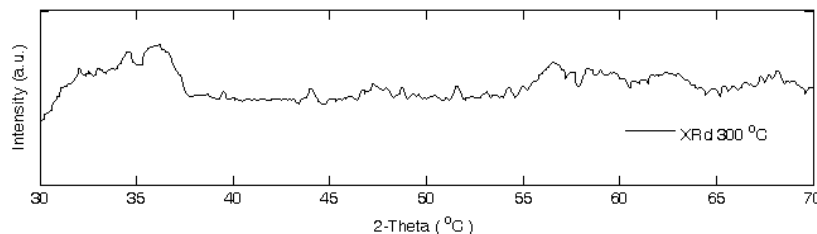
یکی از پارامترهای مهم و مؤثر در خواص فیزیکی ماده، دما است. تاثیر دما به پارامترهای مهم دیگر ماده از جمله روش رشد، ضخامت لایه‌ها و آرایش وابسته است. در این مطالعه، اثر عملیات حرارتی بازپخت بر روی خواص اپتیکی و ساختاری نانو فیلم های $\text{Zn}_{0.95}\text{Mn}_{0.05}\text{O}$ تهیه شده به روش سل-ژل مورد بررسی قرار گرفته است. مواد مصرفی در این روش عبارت هستند از: استات روی برای منبع روی، استات منگنز برای منبع منگنز، مایع ۲-میتا اکسیداتانول (DME) برای حلال، مایع مونو اتانول آمین (MEA) برای پایداری محلول. برای تهیه نانو فیلم های ZnO:Mn به روش سل-ژل، ابتدا در دمای اتاق، استات روی و منگنز را با نسبت اتمی $\frac{\text{Mn}}{\text{Zn}} = 5\%$ ، در محلول DME و MEA که $\frac{[\text{MEA}]}{[\text{Zn}^{+2}]} = 1$ است، حل می‌شوند. محلول نهائی با همزن مغناطیسی در دمای 70°C به مدت یک ساعت همزده می‌شود، که در نهایت یک محلول یکنواخت و شفاف حاصل می‌گردد. در دمای اتاق، بعد از ۲۴ ساعت به روش غوطه ورسازی عمل لایه گذاری صورت می‌گیرد. ابتدا زیر لایه های شیشه ای در آب جوش همراه با مواد شوینده به مدت نیم ساعت جوشانده می‌شوند و سپس با آب خوب شسته شده و با الکل و استون در آلتراسونیک تمیز می‌شوند. سپس در جایگاه مربوطه به صورت عمودی گذاشته و با سرعت یک میلیمتر بر ثانیه زیر لایه را از سل خارج کرده و به مدت

بیست دقیقه زیر لایه، لایه نشانی شده را در کوره در دمای اولیه 200°C حرارت می دهیم تا قسمتی از مواد آلی محلول در زیر لایه تبخیر شوند تا عمل خشک سازی اولیه صورت گیرد. عمل لایه گذاری را پنج بار تکرار می کنیم. در نهایت نانو فیلم های تهیه شده را برای عملیات بازپخت نهائی در دمای 300°C ، 400°C ، 450°C و 500°C درجه سلسیوس در کوره در هوای آزاد به مدت یک و نیم ساعت حرارت می دهیم. نانو فیلم ها برای انجام آزمایشهای فیزیکی تا دمای اتاق به طور طبیعی سرد می شوند. ضخامت لایه ها برای تمام نمونه ها در حدود 200 نانومتر محاسبه شده است. مقدار PH متری محیط نشان داد که محیط سلی تقریباً قلیائی ($7/5$) با ویسکوزیته $3/3$ mPa.s است.

۳-۴-۱ اثر دمای باز پخت 300°C

۳-۴-۱-۱ طیف XRD

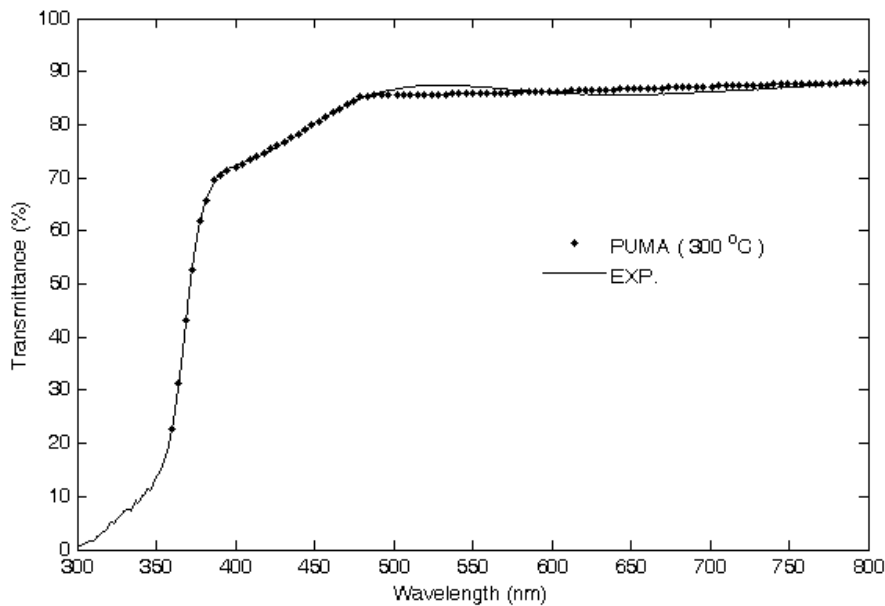
شکل (۴-۱۴) طیف XRD نمونه $\text{Zn}_{0.95}\text{Mn}_{0.05}\text{O}$ در دمای بازپخت 300°C را نشان می دهد. طیف XRD نمونه شکل بلوری خاصی را نشان نمی دهد و حالت آمورفی در آن غالب است.



شکل (۴-۱۴): طیف XRD نمونه $\text{Zn}_{0.95}\text{Mn}_{0.05}\text{O}$ در دمای بازپخت 300°C

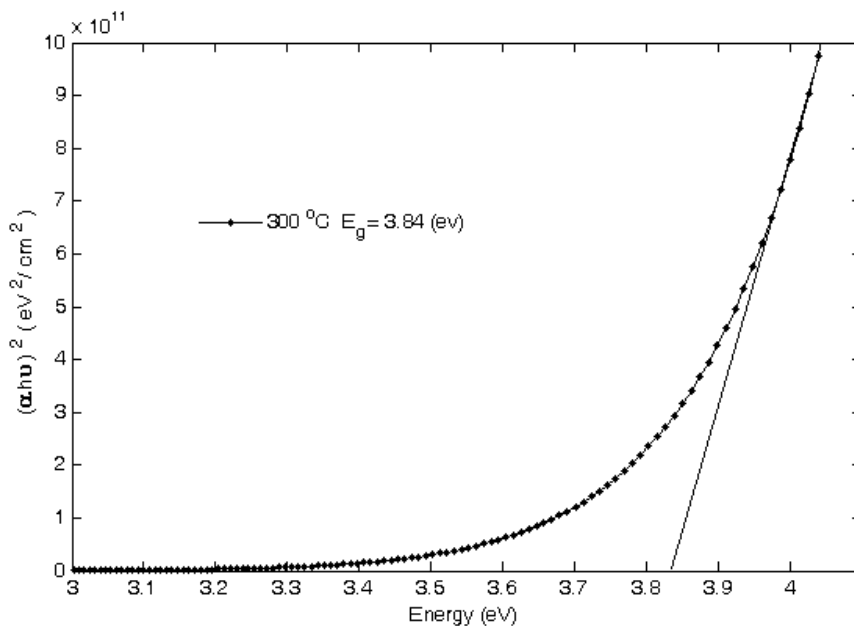
۳-۴-۲ طیف تراگسیل

شکل (۴-۱۵) طیف نور تراگسیل نانوفیلم $\text{Zn}_{0.95}\text{Mn}_{0.05}\text{O}$ در دمای اتاق به ازای دمای بازپخت 300°C را نشان می دهد. شکل توافق خوبی بین داده های تجربی و تئوری حاصل از روش پوما را نشان می دهد. میانگین شفافیت طیف در ناحیه مرئی حدود 85% است. کاهش طیف در ناحیه بنفش ناشی از برهمکنش قوی بین الکترون و فوتون است که انرژی گاف را بوجود می آورد.



شکل (۴-۱۵): طیف نور تراگسیل نمونه در دمای اتاق به ازای دمای بازپخت 300°C .

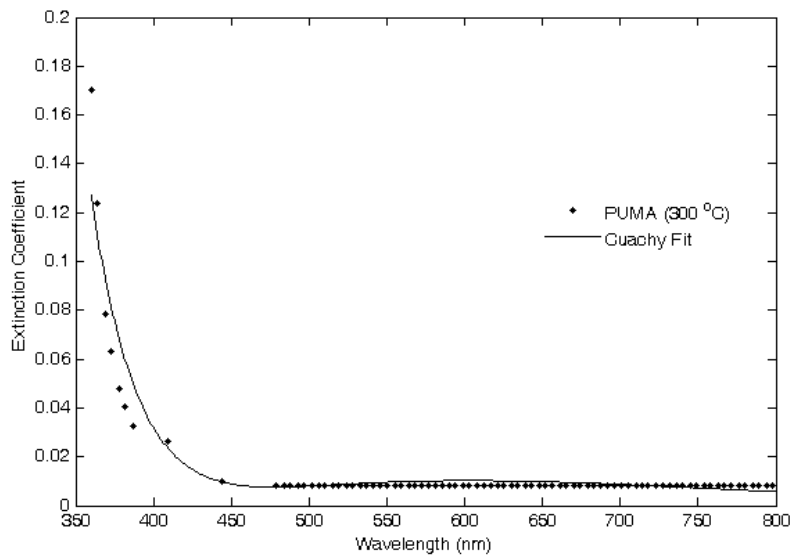
در شکل (۴-۱۶) تغییرات $(\alpha h\nu)^2$ برحسب انرژی فوتون رسم شده است. α ضریب جذب و $h\nu$ انرژی فوتون ورودی است. با برونیابی قسمت خطی منحنی گاف نواری مستقیم نمونه محاسبه که حدود $3/84$ eV است. گاف نواری حالت کپه ای MnO در حدود $4/2$ eV است که بزرگتر از گاف نواری اکسید روی خالص می باشد [۸۴]. انتظار می رود که با افزایش منگنز گاف نواری اکسید روی افزایش یابد.



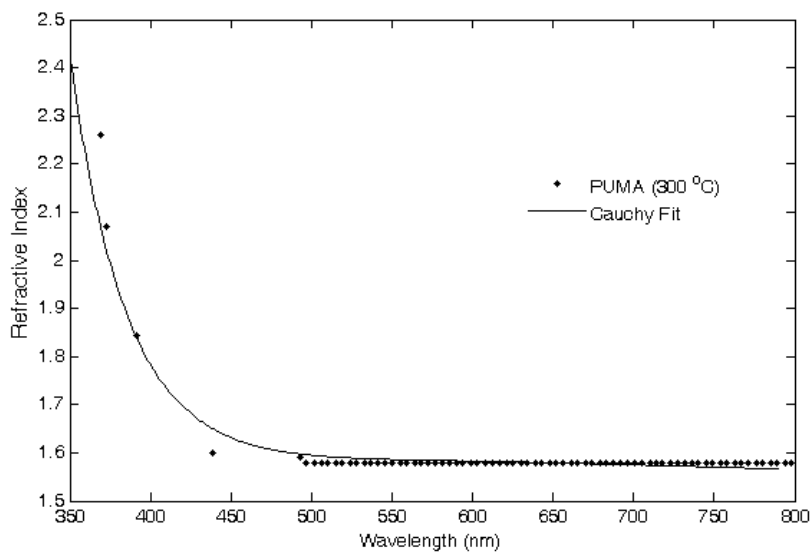
شکل (۴-۱۶): محاسبه انرژی گاف نانوفیلم باز پخت شده در دمای 300°C .

۳-۳-۱-۳) تعیین ثابت های اپتیکی

تعیین ثابتهای اپتیکی همچون ضریب شکست و ضریب خاموشی در لایه های نازک مسئله بسیار مهمی است که می توان به روش تجربی یا به روش تئوری آنها را تعیین کرد. در اینجا به روش پوما و با استفاده از برازش داده ها با رابطه کوشی تغییرات آنها بر حسب طول موج نور فرودی محاسبه شد. شکل های (۴-۱۷) و (۴-۱۸) تغییرات ضریب خاموشی و ضریب شکست را بر حسب طول موج نور نشان می دهند. در طول موجهای بیشتر از حدود ۵۰۰ nm تقریباً ثابت است ولی در نزدیکی لبه جذب مقادیرشان افزایش می یابند.



شکل (۴-۱۷): نمودار تغییرات ضریب خاموشی تئوری و برازشی با روابط کوشی در دمای باز پخت ۳۰۰°C.

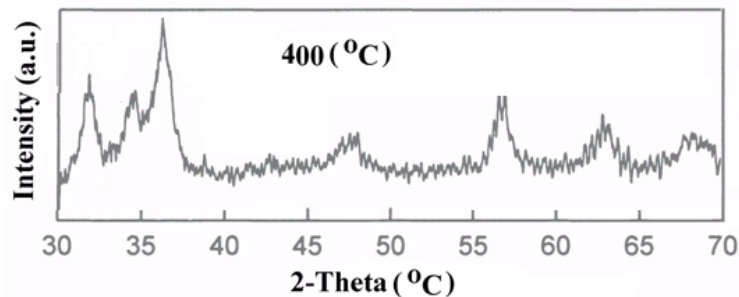


شکل (۴-۱۸): نمودار تغییرات ضریب شکست تئوری و برازشی با روابط کوشی در دمای باز پخت ۳۰۰°C.

۴-۳-۲) اثر دمای باز پخت 400°C

۴-۳-۱) طیف XRD

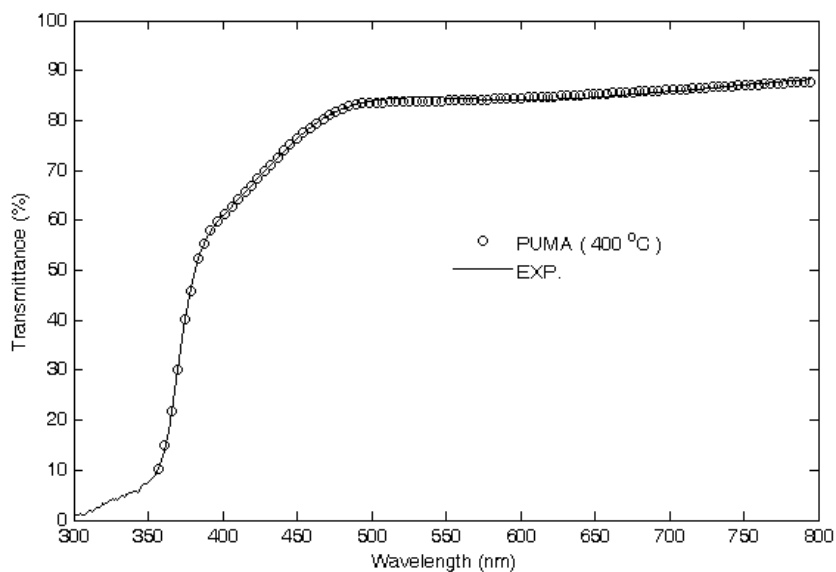
شکل (۴-۱۹) طیف XRD نمونه بازپخت شده در 400°C را نشان می دهد. همانطور که مشاهده می شود قله های پراش بخوبی قابل مشاهده هستند. این طیف مربوط به اکسید روی بدون هیچگونه فاز ثانوی است. دمای 400°C می تواند حداقل دما برای بازپخت باشد که ساختار بلوری ششگوشی اکسید روی را بوجود می آورد.



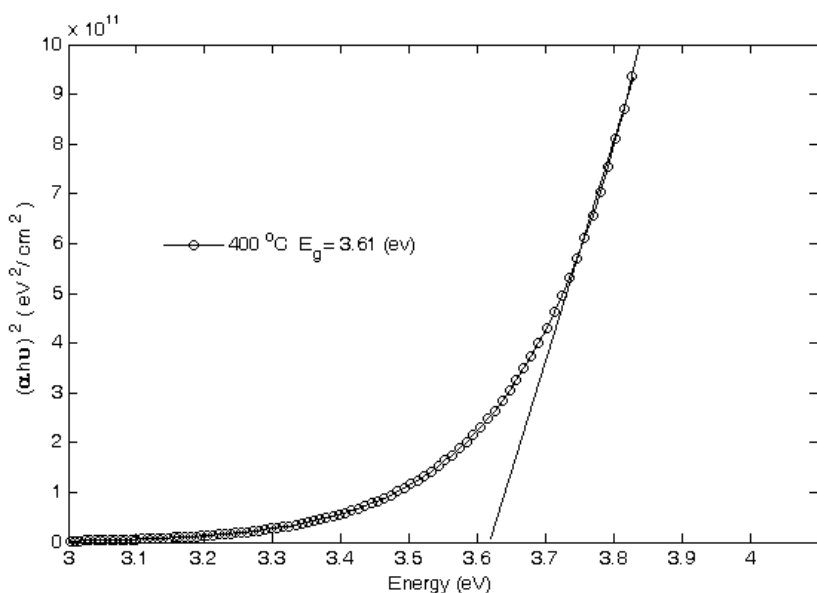
شکل (۴-۱۹): طیف XRD نمونه در دمای باز پخت 400°C .

۴-۳-۲) طیف تراگیل

شکل (۴-۲۰) طیف نور تراگیل نمونه در دمای اتاق به ازای دمای بازپخت 400°C را نشان می دهد. میانگین طیف تراگیل بیش از ۸۵٪ است. هرچه انرژی نور تابشی بیشتر می شود، طیف تراگیل نیز کاهش می یابد زیرا برهمکنش نور با الکترون های ماده بیشتر شده تا طیف نور تراگیل به حداقل خود برسد. طیف تراگیل محاسبه شده با استفاده از روش پوما توافق بسیار خوبی با مقادیر تجربی دارد. شکل (۴-۲۱) مربوط به تعیین انرژی گاف نواری نمونه است. محاسبات نشان می دهند که انرژی گاف نمونه در حدود 3.61 eV می باشد.



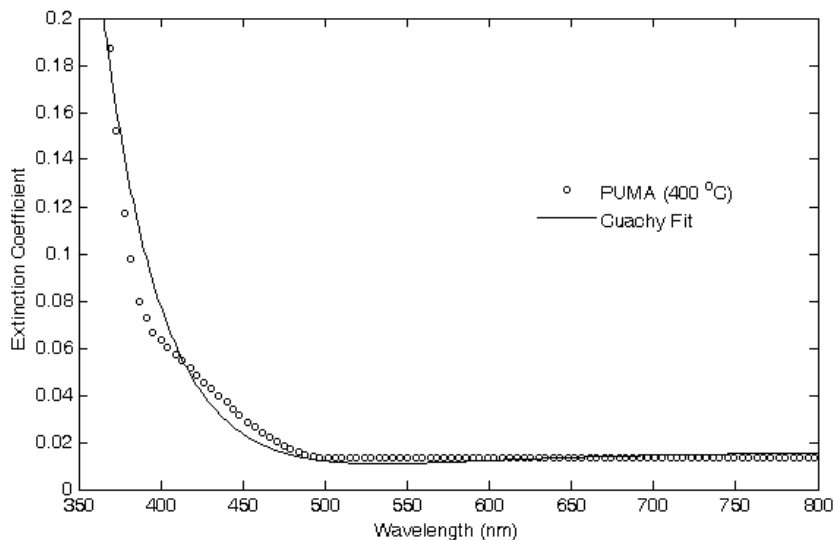
شکل (۴-۲۰): طیف نور تراگسیل نمونه در دمای اتاق به ازای دمای بازپخت 400°C .



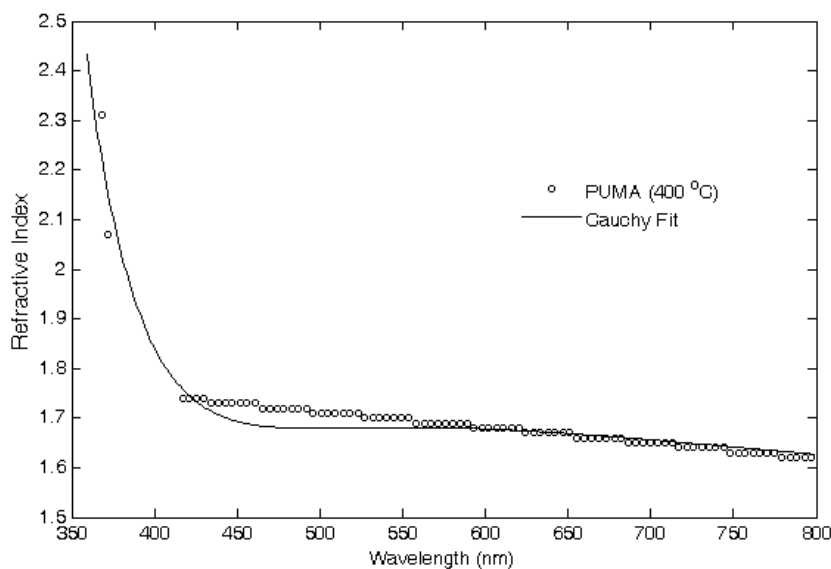
شکل (۴-۲۱): محاسبه انرژی گاف نمونه در دمای اتاق به ازای دمای بازپخت 400°C .

۳-۲-۳-۴ تعیین ثابت های اپتیکی

شکل (۴-۲۲) نمودار تغییرات ضریب خاموشی و برازش آن با استفاده از روابط کوشی نانو فیلم باز پخت شده در دمای 400°C را نشان می دهد. شکل (۴-۲۳) مربوط به تغییرات ضریب شکست تئوری و برازش شده در همین دما است. ضریب خاموشی و ضریب شکست با افزایش طول موج، کاهش می یابند ولی در ناحیه جذب افزایش چشمگیری را نشان می دهند.



شکل (۲۲-۴): نمودار تغییرات ضریب خاموشی تئوری و برازشی نمونه در دمای باز پخت 400°C .

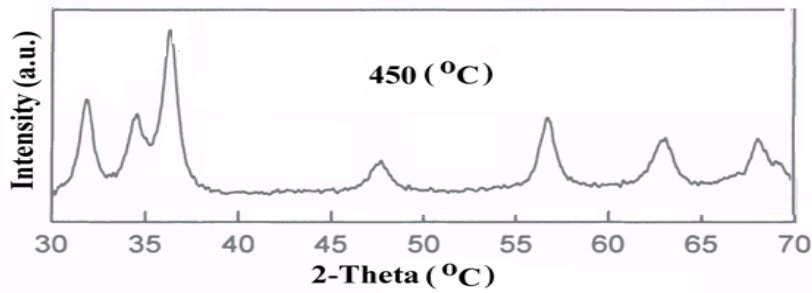


شکل (۲۳-۴): نمودار تغییرات ضریب شکست تئوری و برازشی نمونه در دمای باز پخت 400°C .

۳-۳-۴ اثر دمای بازپخت 450°C

۳-۳-۴-۱) طیف XRD

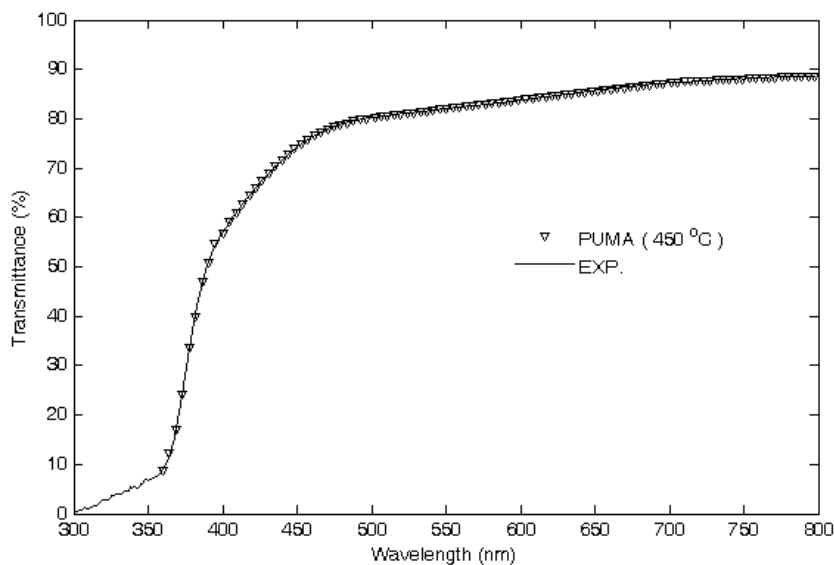
شکل (۲۴-۴) طیف XRD نمونه بازپخت شده در دمای 450°C را نشان می دهد. طیف مربوطه نشان دهنده اکسید روی است که هیچگونه فاز ثانوی اکسید منگنز و خوشه های مربوطه در آن وجود ندارد. قله های طیف بخوبی مشاهده شده و نمونه بخوبی فرم بلوری دارد.



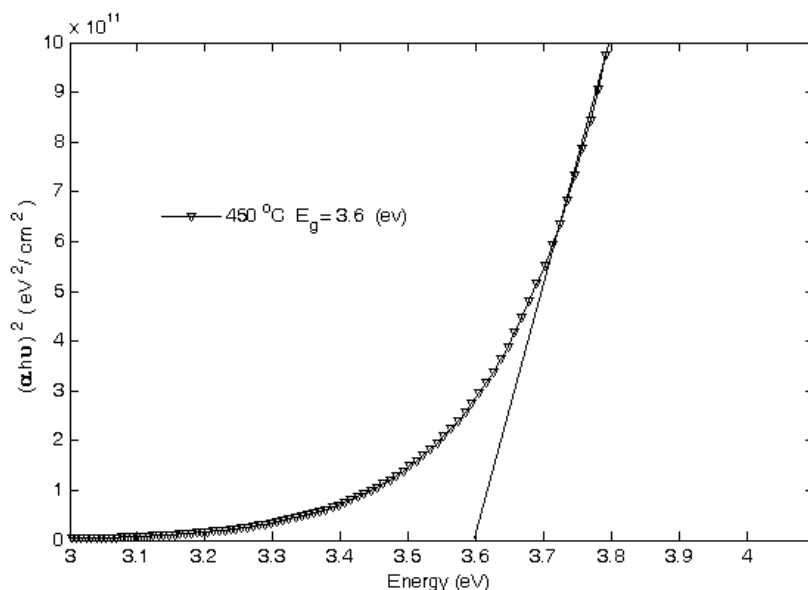
شکل (۲۴-۴): طیف XRD نمونه بازپخت شده در 450°C

۲-۳-۳-۴ طیف تراگسیل

طیف نور تراگسیل نمونه در دمای اتاق و به ازای دمای بازپخت 450°C در شکل (۲۵-۴) نشان داده شده است. شفافیت نمونه بین ۸۰ تا ۹۰ درصد است که بتدریج با افزایش طول موج افزایش می یابد. طیف تراگسیل محاسبه شده با استفاده از روش پوما توافق بسیار خوبی با مقادیر تجربی دارد. شکل (۲۶-۴) مربوط به تعیین انرژی گاف نواری نمونه است. محاسبات نشان می دهند که انرژی گاف نمونه در حدود 3.61 eV می باشد.



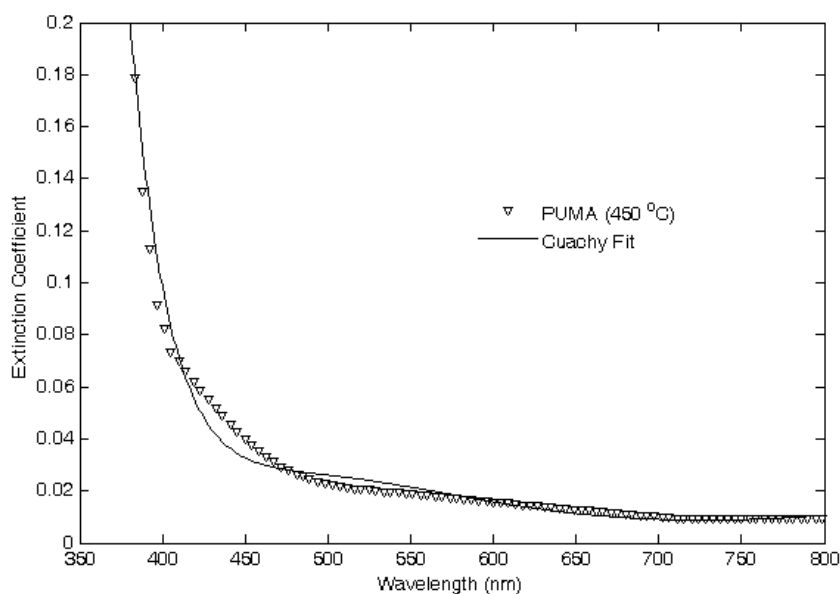
شکل (۲۵-۴): طیف نور تراگسیل نمونه در دمای اتاق به ازای دمای بازپخت 450°C .



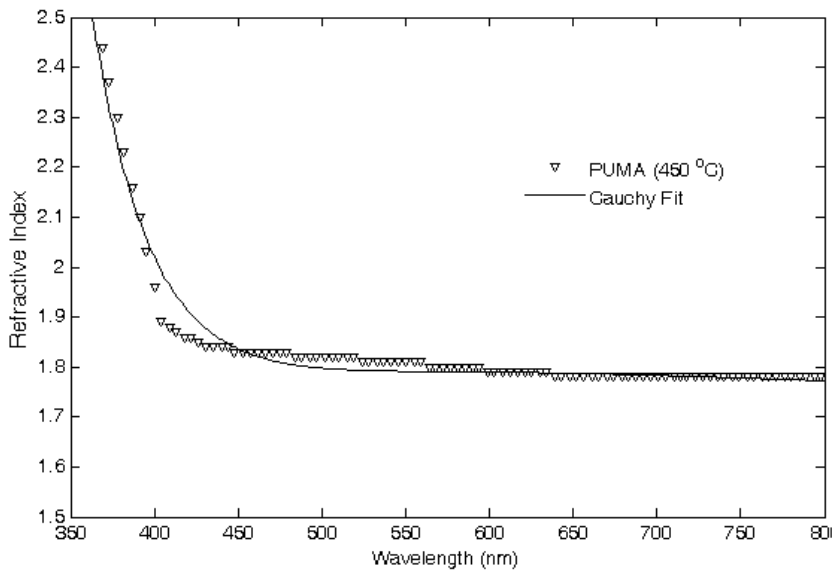
شکل (۴-۲۶): محاسبه انرژی گاف نمونه در دمای اتاق به ازای دمای بازپخت ۴۵۰°C.

۳-۳-۳-۴ تعیین ثابت های اپتیکی

شکل (۴-۲۷) نمودار تغییرات ضریب خاموشی و برازش آن با استفاده از روابط کوشی نانو فیلم بازپخت شده در دمای ۴۵۰°C را نشان می دهد. شکل (۴-۲۸) مربوط به تغییرات ضریب شکست تئوری و برازشی در همین دما است. ضریب خاموشی و ضریب شکست با افزایش طول موج، کاهش می یابند.



شکل (۴-۲۷): نمودار تغییرات ضریب خاموشی تئوری و برازشی نمونه بازپخت شده در دمای ۴۵۰°C.

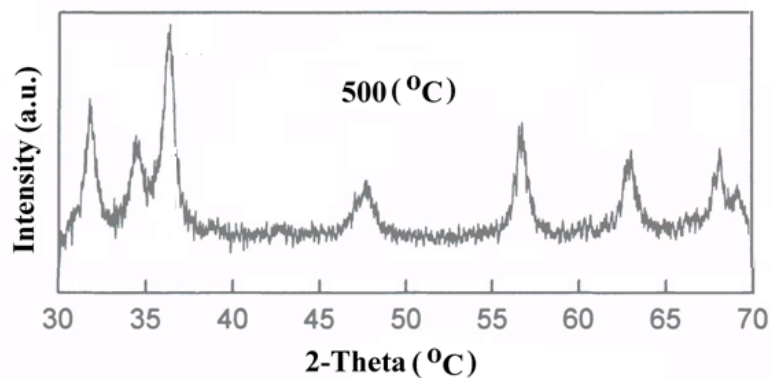


شکل(۴-۲۸): نمودار تغییرات ضریب شکست تئوری و برازشی نمونه بازپخت شده در دمای ۴۵۰°C.

۴-۳-۴ اثر دمای باز پخت ۵۰۰°C

۴-۳-۴-۱ طیف XRD

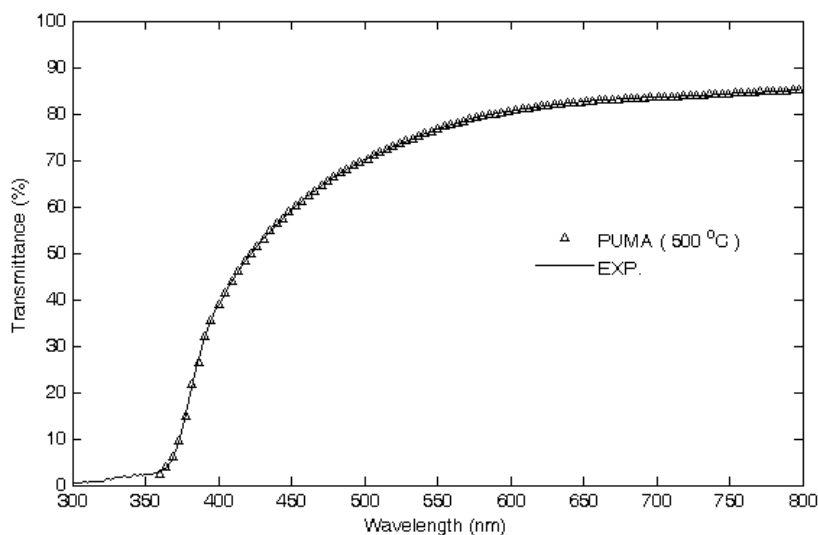
شکل (۴-۲۹) طیف XRD نمونه بازپخت شده در دمای ۵۰۰°C را نشان می دهد. طیف مربوط به اکسید روی با ساختار ششگوشی است که در آن هیچگونه فاز ثانوی اکسید منگنز و خوشه های مربوطه در آن دیده نمی شود.



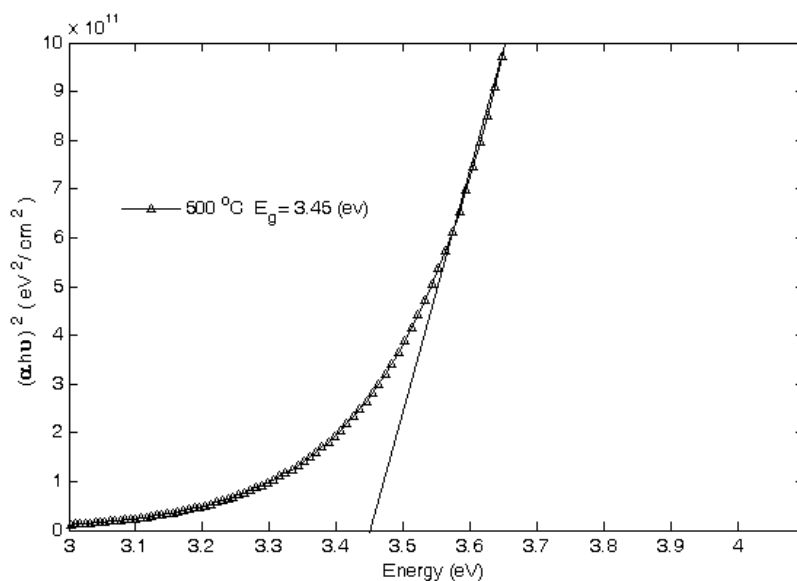
شکل(۴-۲۹): طیف XRD نمونه بازپخت شده در دمای ۵۰۰°C

۴-۳-۲) طیف تراگسیل

شکل (۴-۳) طیف نور تراگسیل نمونه در دمای اتاق به ازای دمای بازپخت 500°C را نشان می‌دهد. شفافیت نمونه در طول موج مرئی بین ۶۰ تا ۸۵ درصد است. هرچه انرژی نور تابشی بیشتر می‌شود و بسمت طول موج بنفش میل می‌کند، طیف تراگسیل نیز کاهش می‌یابد که مربوط به لبه جذب می‌باشد. طیف تراگسیل محاسبه شده با استفاده از روش پوما توافق بسیار خوبی با مقادیر تجربی دارد. شکل (۴-۳) مربوط به تعیین انرژی گاف نواری نمونه است. محاسبات نشان می‌دهند که انرژی گاف نمونه در حدود 3.45 eV می‌باشد.



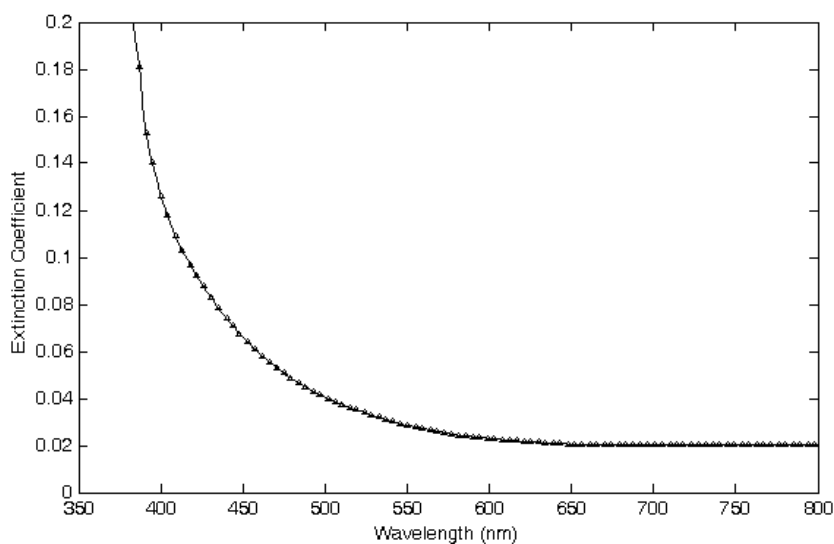
شکل (۴-۳): طیف نور تراگسیل نمونه در دمای اتاق به ازای دمای بازپخت 500°C .



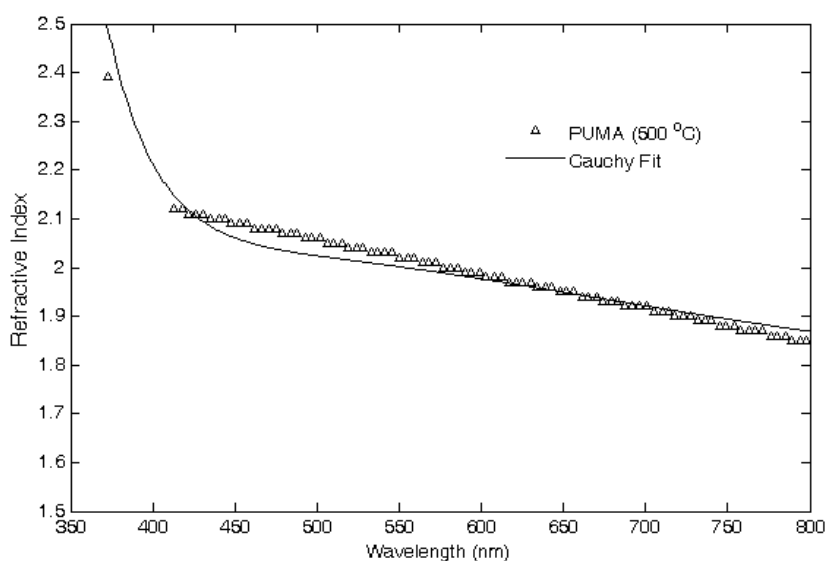
شکل (۴-۳): محاسبه انرژی گاف نمونه در دمای اتاق به ازای دمای بازپخت 500°C .

۳-۴-۳-۴ تعیین ثابت های اپتیکی

شکل (۳۲-۴) نمودار تغییرات ضریب خاموشی و برازشی با استفاده از روابط کوشی نانو فیلم باز پخت شده در دمای 500°C را نشان می دهد. تغییرات آن برای نمونه بین 0.2 تا 0.18 است. شکل (۳۳-۴) مربوط به تغییرات ضریب شکست تئوری و برازشی در همین دما است. تغییرات آن بین 1.85 تا 2.5 است. ضریب خاموشی و ضریب شکست با افزایش طول موج، کاهش و نهایتاً تقریباً ثابت می ماند.



شکل (۳۲-۴): نمودار تغییرات ضریب خاموشی تئوری و برازشی نمونه باز پخت شده در دمای 500°C .

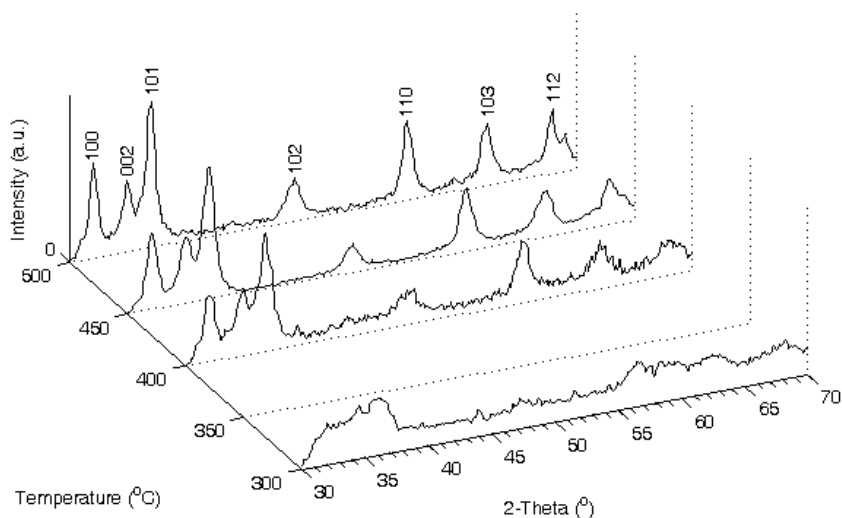


شکل (۳۳-۴): نمودار تغییرات ضریب شکست تئوری و برازشی نمونه باز پخت شده در دمای 500°C .

۴-۳-۵) بحث و نتیجه گیری

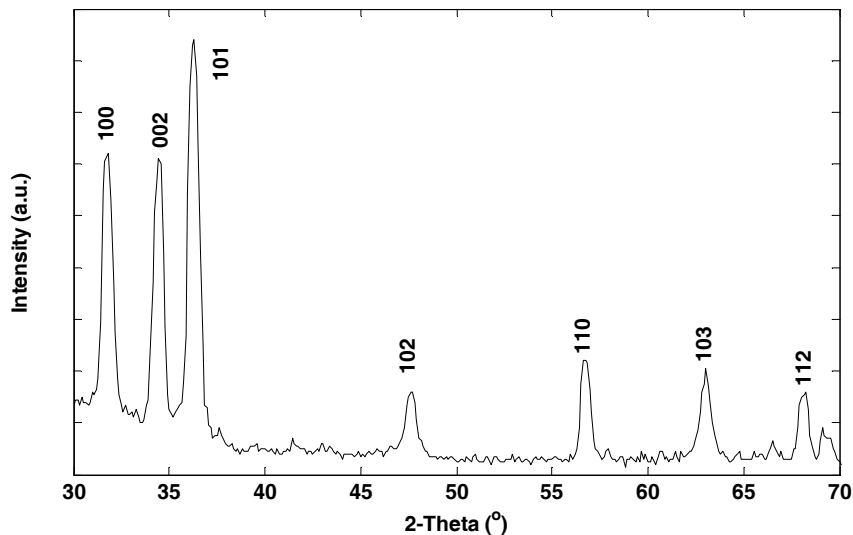
۴-۳-۵-۱) طیف XRD

شکل (۴-۳۴) طیف XRD چهار نمونه $Zn_{0.95}Mn_{0.05}O$ در دماهای بازپخت مختلف را بر حسب تابعی از 2θ نشان می دهد. همه نمونه ها در دمای خشک سازی $200^{\circ}C$ به مدت بیست دقیقه خشک شده و سپس در دمای $300^{\circ}C$ ، $400^{\circ}C$ ، $450^{\circ}C$ و $500^{\circ}C$ درجه سلسیوس به مدت یک و نیم ساعت بازپخت شد اند. طیف XRD در دمای $300^{\circ}C$ نشان می دهد که نمونه شکل بلوری نداشته و حالت آمورفی غالب است ولی طیفهای XRD برای نمونه هایی که در دماهای $400^{\circ}C$ ، $450^{\circ}C$ و $500^{\circ}C$ درجه سلسیوس بازپخت شده اند مشابه طیف کپه ای بدون آرایش ZnO (در سیستم طیف نگاری پرتوی X) هستند و هر چه دمای بازپخت افزایش می یابد شکل بلوری بهتر شده و پهنای قله ها کاهش می یابد زیرا در این دما همه مواد آلی در نمونه ها تبخیر شده و نمونه ها ساختار بلوری منظم تری بخود می گیرند. بررسی طیفهای XRD نمونه ها نشان می دهد که آنها تک فاز بوده و دارای ساختار هگزاگونال (ورتسایت) می باشند. هیچ گونه فاز ثانوی مطابق با ساختارهای اکسید منگنز و خوشه های مربوطه در طیفها دیده نمی شود [۶۶].



شکل (۴-۳۴): طیفهای XRD چهار نمونه نانوفیلم $Zn_{0.95}Mn_{0.05}O$ بازپخت شده در دماهای $300^{\circ}C$ ، $400^{\circ}C$ ، $450^{\circ}C$ و $500^{\circ}C$ درجه سلسیوس.

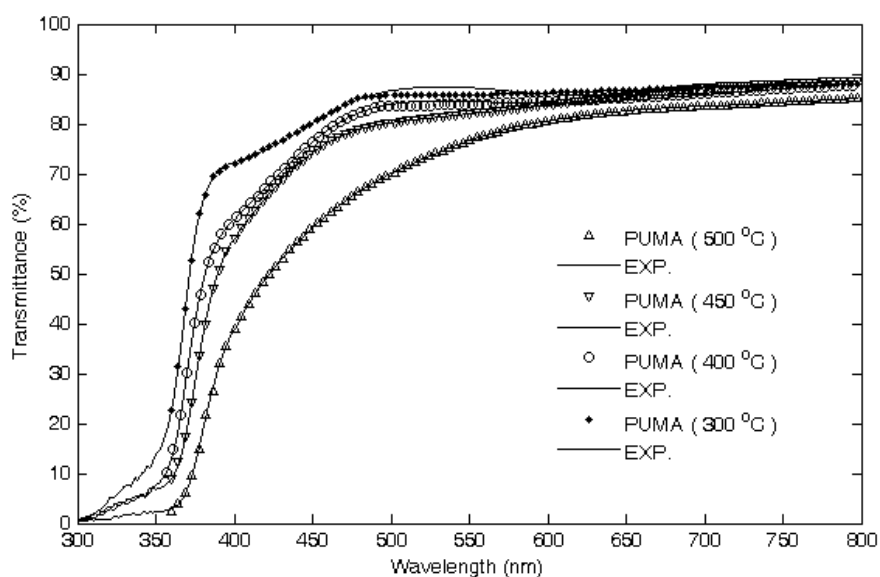
شکل (۴-۳۵) طیف XRD نمونه پودری $Zn_{0.95}Mn_{0.05}O$ را در دمای $800^{\circ}C$ نشان می دهد. این طیف بیانگر این واقعیت است که پهنای قله ها تا حدودی کاهش یافته است و در ضمن شدت آن بدلیل بهبود کیفیت ساختار بلوری نمونه ها افزایش یافته است.



شکل (۴-۳۵): طیف XRD پودر $Zn_{0.95}Mn_{0.05}O$ باز پخت شده در $800^{\circ}C$ درجه سلسیوس.

۴-۳-۵-۲) طیف تراگسیل

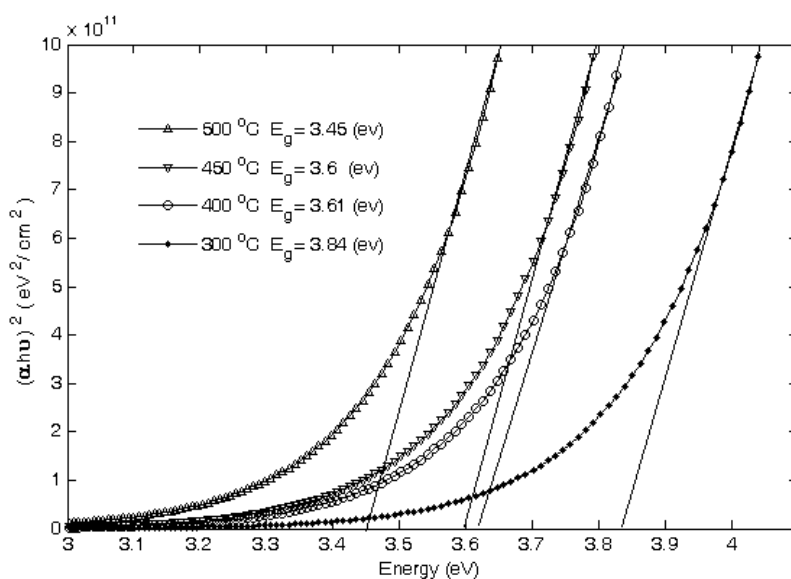
شکل (۴-۳۶) طیف نور تراگسیل نانوفیلم های $Zn_{0.95}Mn_{0.05}O$ در دمای اتاق به ازای دماهای بازپخت مختلف را نشان می دهد. شکل توافق خوبی بین داده های تجربی و نتایج تئوری حاصل از روش پوما را نشان می دهد. شفافیت نمونه ها در ناحیه مرئی حدود ۸۰٪ است و با افزایش دمای بازپخت کاهش می یابد. با توجه به اینکه ساختار بلوری با افزایش دمای بازپخت بهبود می یابد این کاهش شفافیت احتمالاً بدلیل افزایش ناهمواری سطوح است که با افزایش دمای بازپخت زیاد می شود.



شکل (۴-۳۶): نمودار طیف تراکسیل تجربی و تئوری نمونه‌ها.

۴-۳-۵-۳ انرژی گاف نواری

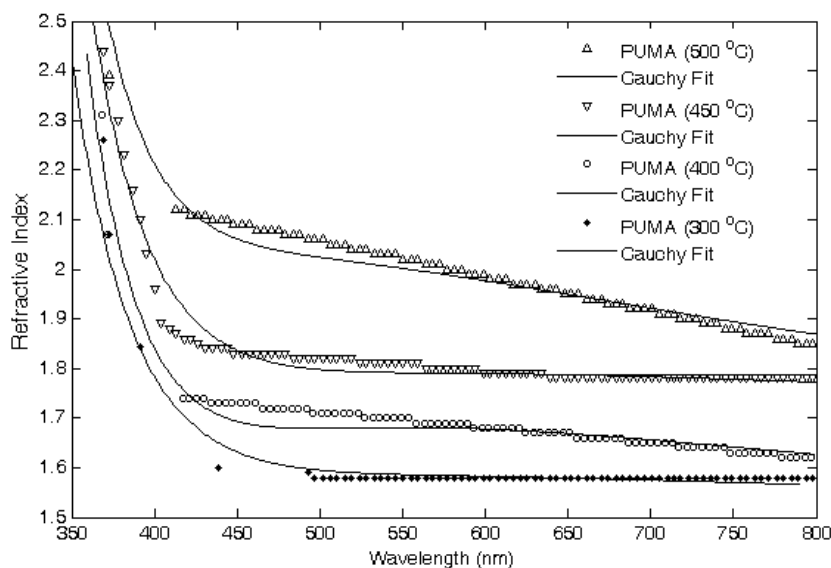
شکل (۴-۳۷) تغییرات $(\alpha h\nu)^2$ نمونه‌ها را برحسب انرژی نشان می‌دهد. از نمودار می‌توان نتیجه گرفت که انرژی گاف $Zn_{0.95}Mn_{0.05}O$ با تغییر دمای بازپخت بین ۳/۴۵ تا ۳/۸۴ الکترون ولت تغییر می‌کند. با افزایش دمای بازپخت گاف انرژی کاهش می‌یابد. این کاهش ممکن است ناشی از افزایش چگالی نواقص شبکه در اثر تبخیر اتم اکسیژن یا قرار گرفتن اتمهای روی و نیز منگنز در محل‌های بین شبکه‌ای باشد [۶۶].



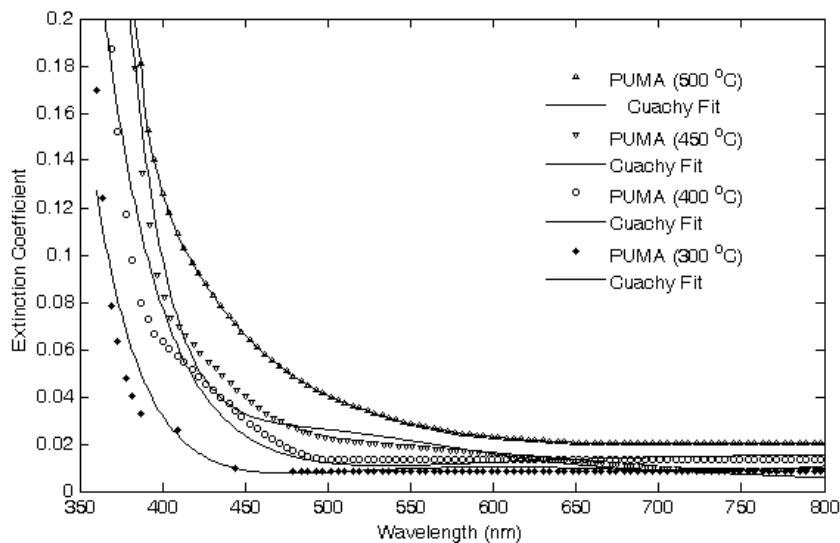
شکل (۴-۳۷): محاسبه انرژی گاف نانوفیلم‌ها $Zn_{0.95}Mn_{0.05}O$ باز پخت شده در دماهای مختلف.

۴-۳-۵-۴ تعیین ثابت های اپتیکی

شکل‌های (۴-۳۸) و (۴-۳۹) نمودار تغییرات ضریب شکست و ضریب خاموشی بر حسب طول موج را نشان می دهند. برای تمام نمونه ها ضریب شکست و ضریب خاموشی در طول موجهای بزرگتر از حدود ۴۵۰ نانومتر کاهش یافته ولی در طول موجهای کوچکتر از آن مقادیر بزرگی به خود می گیرند (لبه های جذب). این شکل بخوبی نشان می دهد که ثوابت اپتیکی تا حدودی به طول موج نور وابسته است و در لبه جذب شدیداً افزایش می یابد. این شکل ها همچنین نشان می دهند که دمای بازپخت با ضریب شکست و ضریب میرائی رابطه مستقیم دارد یعنی هر چه دمای بازپخت بیشتر (کمتر) شود ضریب شکست و ضریب میرائی بزرگتر (کوچکتر) می شود.



شکل (۴-۳۸): نمودار تغییرات ضریب شکست تئوری و برازشی نانو فیلم های $Zn_{0.95}Mn_{0.5}O$ باز پخت شده در دما های مختلف.



شکل (۴-۳۹): نمودار تغییرات ضریب میرائی تئوری و برازشی نانو فیلم های $Zn_{0.95}Mn_{0.05}O$ بازپخت شده در دماهای مختلف.

۴-۳-۶) نتیجه گیری

در این بخش نانوفیلم های $Zn_{0.95}Mn_{0.05}O$ با دماهای بازپخت متفاوت که با استفاده از روش سل-ژل رشد داده شده اند مورد مطالعه قرار گرفته اند. نتایج حاصل نشان می دهد که با افزایش دمای بازپخت طیف تراکسیل (شفافیت) و گاف انرژی نانوفیلم ها کاهش می یابند در حالی که ضریب شکست و ضریب خاموشی افزایش می یابند. مقایسه طیف XRD نمونه های لایه نشانی شده و حالت پودری نمایانگر این واقعیت است که افزایش دمای بازپخت باعث بهبود ساختار بلوری می شود که احتمالاً بدلیل کاهش چگالی در رفتگیها می باشد.

۴-۴) اثر حلال بر روی خواص فیزیکی ZnO:Mn

در این مطالعه، لایه های نازک $Zn_{0.98}Mn_{0.02}O$ با چهار نوع حلال مختلف به روش سل-ژل رشد داده شده اند و تاثیر نوع حلال روی خواص ساختاری، نوری و مغناطیسی در این نمونه ها مورد بررسی قرار گرفته است. مواد مصرفی برای رشد لایه ها در این روش عبارت هستند از: استات روی $[Zn(CH_3COO)_2 \cdot 2H_2O]$ برای منبع روی، استات منگنز $[Mn(CH_3COO)_2 \cdot 4H_2O]$ برای منبع منگنز و مایع مونواتانول آمین (MEA) (C_2H_7NO) برای پایداری محلول. برای بررسی اثرات نوع حلال بر روی خواص نمونه های $Zn_{0.98}Mn_{0.02}O$ رشد داده شده از چهار نوع حلال، ۲- میتاکسید اتانول، ۲- ایزوپروپانول، متانول و ۱- بوتانول استفاده شده است. همه مواد اولیه بدون هیچ افزودنی از شرکت مرک تهیه شده اند. خواص شیمیایی و فیزیکی حلالها در جدول (۴-۱) نشان داده شده است.

جدول (۴-۱): پارامترهای فیزیکی و شیمیایی حلالهای استفاده شده در دمای $20^\circ C$.

نوع	حلال	فرمول شیمیایی	جرم مولی (g/mol)	شکل ظاهری	چگالی (g/cm ³)	نقطه ذوب (°C)	ضریب شکست	PH حلال
۱	2-methoxyethanol	C ₃ H ₈ O ₂	۷۶.۱۰	مایع شفاف بی رنگ	۰.۹۶۵	۱۲۵	۱.۴۰۲	۷
۲	Isopropanol	C ₃ H ₈ O	۶۰.۱۰		۰.۷۸۶	۸۲.۳	۱.۳۷۷۶	۷
۳	Methanol	CH ₃ OH	۳۲.۰۴		۰.۷۹۱۸	۶۴.۷	۱.۳۲۸	۷
۴	1-Butanol	C ₄ H ₁₀ O	۷۴.۱۲		۰.۸۰۹۸	۱۱۷.۷۳	۱.۳۳۹	۷

برای تهیه نانو فیلم های مورد مطالعه، ابتدا در دمای اتاق، استات روی و منگنز با نرخ اتمی

$\frac{Mn}{Zn} = 2\%$ ، در محلول حاوی حلال و پایدار ساز MEA با نسبت $\frac{[MEA]}{[Zn^{+2}]} = 1$ حل می شوند. چهار

محلول نهائی با همزن مغناطیسی به مدت یک ساعت در دمای $80^\circ C$ همزده شده اند تا در نهایت یک محلول یکنواخت حاصل گردد. برای جلوگیری از کاهش حجم حلال و پایدار ساز آن عمل رفلاکس صورت گرفته است تا غلظت محلول تغییر نکند. لایه نشانی در دمای اتاق و بعد از ۲۴ ساعت به روش غوطه ورسازی صورت گرفته است. زیر لایه های شیشه ای مورد استفاده برای عملیات لایه

نشانی ابتدا در آب جوش همراه با مواد شوینده به مدت نیم ساعت جوشانده شده و پس از شستشوی مجدد با آب مقطر توسط ترکیب الکل و استون در حمام آلتراسونیک تا حد امکان تمیز گردیدند. سپس زیر لایه را در جایگاه مربوطه به صورت عمودی گذاشته و با سرعت یک میلیمتر بر ثانیه آن را از سل خارج نموده ایم. نمونه لایه نشانی شده را سپس به مدت بیست دقیقه توسط یک کوره الکتریکی در دمای اولیه 200°C حرارت داده ایم تا قسمتی از مواد آلی موجود در لایه تبخیر شده و عمل خشک سازی اولیه صورت پذیرد. عملیات لایه نشانی با روند اشاره شده پنج بار تکرار شد. در نهایت نانو فیلم های تهیه شده به منظور عملیات بازپخت نهائی، در دمای 500°C درجه سلسیوس به مدت یک و نیم ساعت حرارت داده شده اند.

برای بررسی ساختار و فاز بلوری لایه های نازک از دستگاه XRD مدل Bruker AXS دارای خط تابشی $\text{CuK}\alpha$ با طول موج ($\lambda = 1.5406 \text{ \AA}$) استفاده شد. طیف تراگسیل فیلم ها با استفاده از دستگاه طیف سنج مدل Cary 100 شرکت واریان بدست آمده است. ثابتهای اپتیکی لایه ها با استفاده از فلوجارت روش کمینه کردن غیر مقید نقاط (پوما) و برازش آن با روابط کوشی محاسبه شده است. ضخامت نمونه ها با استفاده از پوما محاسبه شده اند که در حدود 130 nm بدست آمده است.

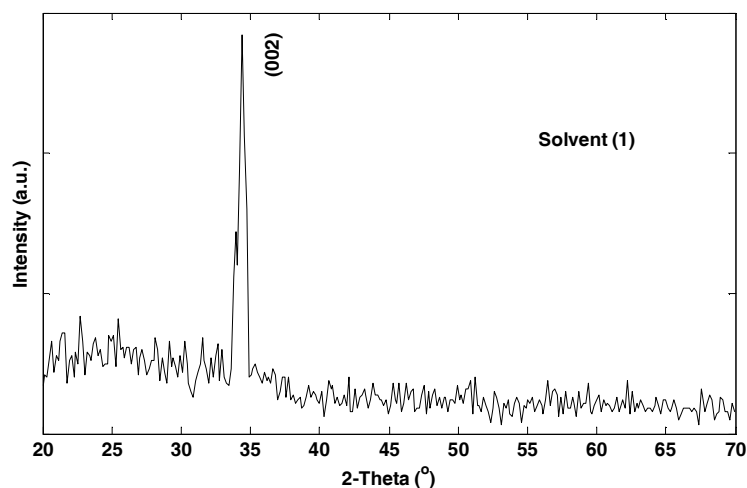
۴-۴-۱) حلال نوع اول

۴-۴-۱-۱) طیف XRD

طیف XRD در دمای اتاق برای حلال نوع اول در شکل (۴-۴۰) نشان داده شده است. طیف بدست آمده متعلق به یک ساختار ششگوشی اکسید روی می باشد که فاز ثانویه مربوط به اکسید منگنز و یا خوشه های آن دیده نمی شوند. همانطور که از شکل دیده می شود جهت غالب تشکیل صفحات بلوری (002) است. اندازه دانه ها از رابطه شرر محاسبه شده است که برابر است با:

$$D = \frac{K\lambda}{\beta \cos(\theta)} \quad (2-4)$$

در این رابطه D اندازه قطر بلور، k ثابت شرر، θ زاویه پراش براگ، β پهناهای کامل از نیمه ارتفاع قله^۱ و λ طول موج اشعه X است. اندازه دانه های تشکیل شده با استفاده از رابطه (۴-۲)، ۲۹.۸۶ نانومتر بدست آمده است.

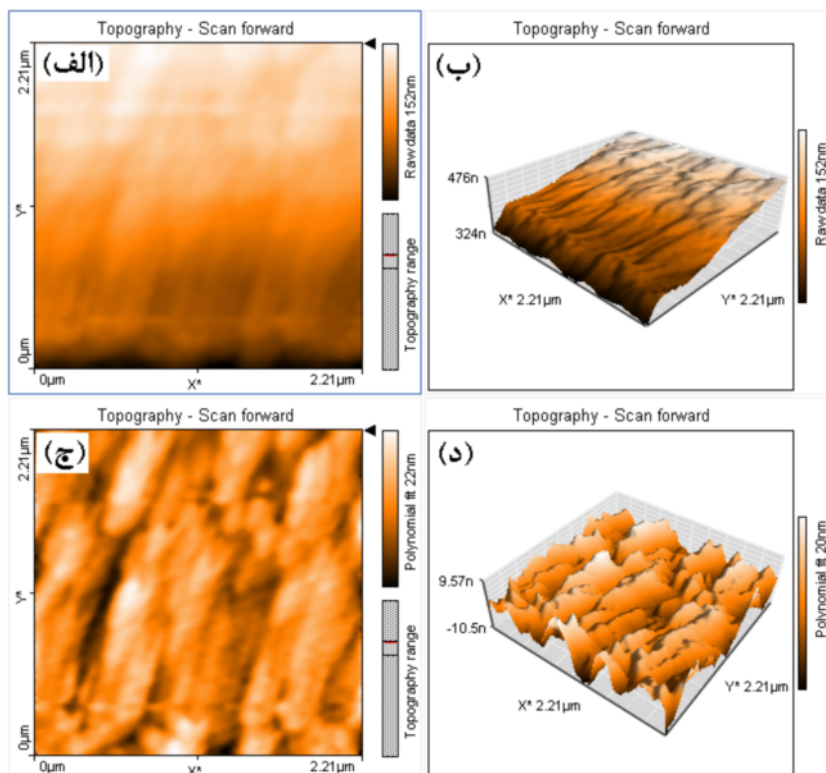


شکل (۴-۴): طیف XRD در دمای اتاق برای حلال نوع اول.

۴-۴-۱-۲ مورفولوژی سطح

شکل (۴-۴۱) تصویر AFM سطح نمونه را در دمای اتاق را نشان می دهد. شکل‌های (الف) و (ج) (ب) و (د) بترتیب مربوط به تصویر دوبعدی {سه بعدی} نمونه با داده‌های خام و برازش شده با چند جمله ایها است. جذر مربع میانگین زبری نمونه ۲۲/۴۷۵ nm محاسبه شده است.

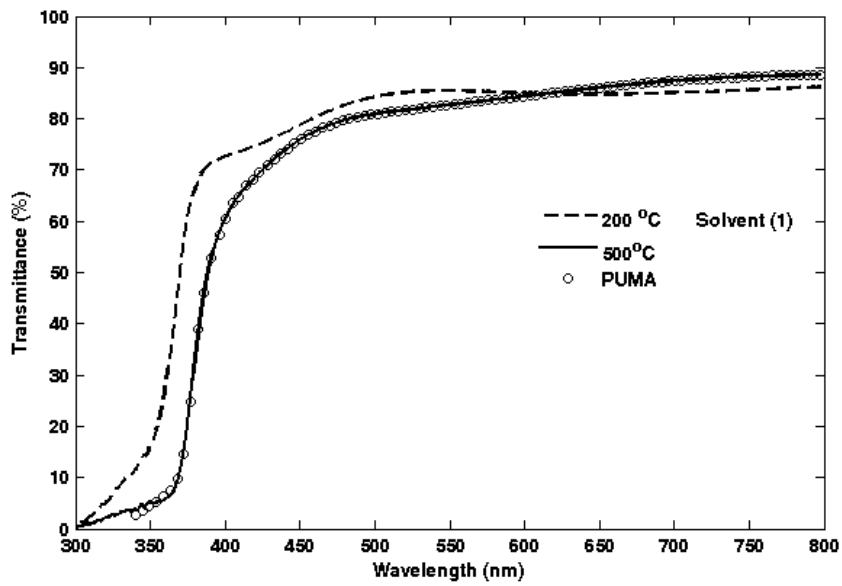
¹ Full Width Half Maximum (FWHM)



شکل (۴-۴): مورفولوژی سطح نمونه در دمای اتاق.

۴-۴-۱-۳) طیف تراگسیل

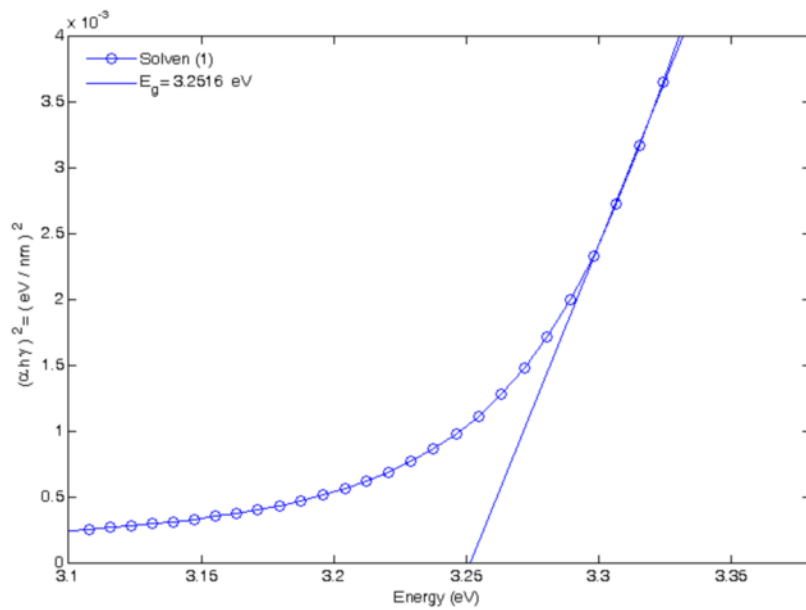
طیف تراگسیل نمونه در دمای اتاق برای دمای خشک سازی و بازپخت در شکل (۴-۴۲) نشان داده شده است. طیف تراگسیل در دمای خشک سازی دارای الگوی پراش می باشد که نشان می دهد سطح مشترک لایه های رشد داده شده موازی بوده و بعلاوه تداخل نور فرودی از این سطوح الگوی پراش مشاهده می شود. در طیف تراگسیل نمونه بازپخت شده الگوی پراش دیده نمی شود زیرا در این دما تمام مواد آلی تبخیر شده و احتمالاً سطوح در مرز مشترک، موازی نخواهند بود از اینرو در این نمونه ها الگوی پراش دیده نمی شود. درصد طیف تراگسیل در نزدیکی های لبه جذب برای نمونه بازپخت نشده بیشتر است زیرا در دمای خشک سازی هنوز ساختار بلوری شکل نگرفته است. طیفها در ناحیه مرئی دارای شفافیت بین ۸۰ تا ۹۰ درصد می باشند. طیف تراگسیل محاسبه شده با استفاده از روش تئوری پوما برای نمونه بازپخت شده توافق خوبی با داده های تجربی دارد.



شکل (۴-۴): طیف تراکسیل نمونه در دمای اتاق برای دمای خشک سازی و بازیخت.

۴-۱-۴-۴ محاسبه گاف انرژی

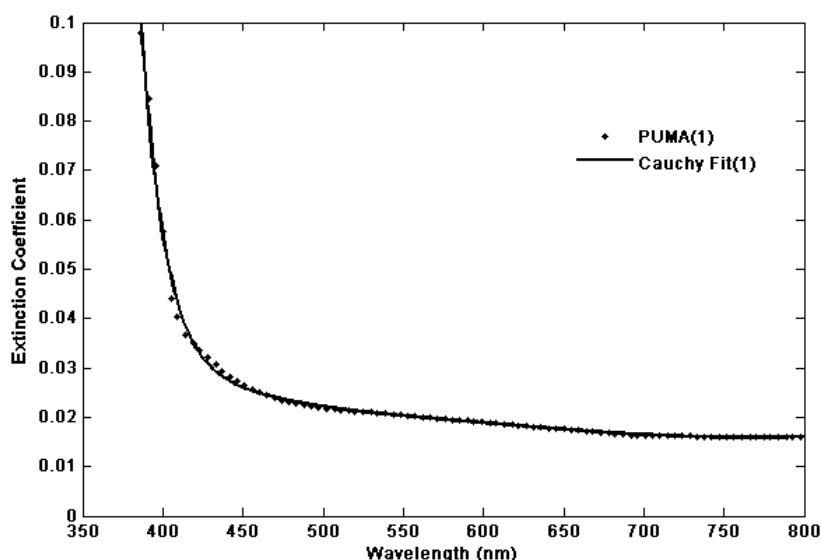
شکل (۴-۴) نحوه محاسبه گاف انرژی را نشان می دهد. محاسبه با استفاده از رابطه (۴-۱) بر اساس برونیایی ناحیه خطی بر داده های تجربی است که برابر 3.2516 eV می باشد.



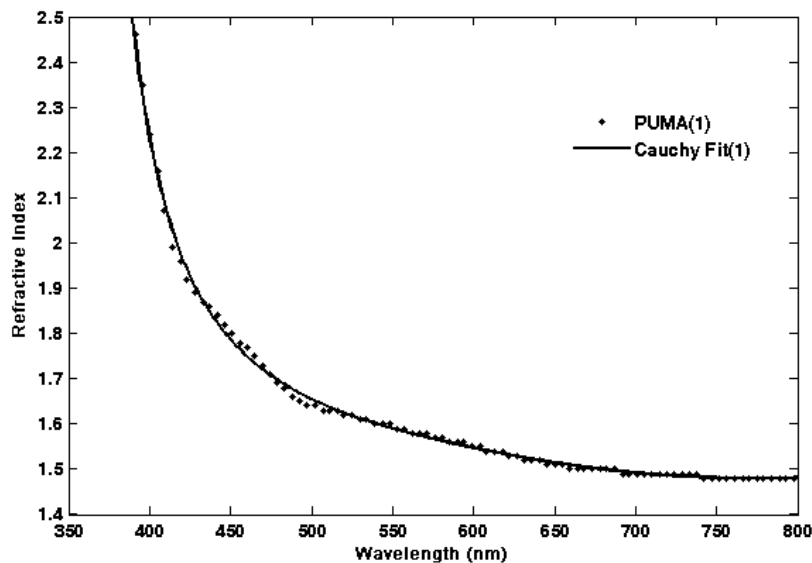
شکل (۴-۴): محاسبه انرژی گاف نمونه بازیخت شده.

۴-۴-۱-۵) ثابتهای اپتیکی

شکل (۴-۴) ضریب خاموشی محاسبه شده با روش پوما را نشان می دهد که توسط روابط کوشی در لایه های نازک برازش شده است. تغییرات آن بین ۰/۰۱ تا ۰/۱ است. مقدار آن با افزایش طول موج کاهش می یابد ولی در لبه جذب بعلت بر همکنش الکترون - فوتون افزایش می یابد. شکل (۴-۴) مربوط به ضریب شکست نمونه محاسبه شده با این روش است. تغییرات ضریب شکست بین ۱/۴ تا ۲/۵ است. در طول موجهای بلند ضریب شکست کاهش یافته ولی در ناحیه جذب بعلت برهمکنش قوی الکترون - فوتون پاشندگی نور افزایش می یابد.



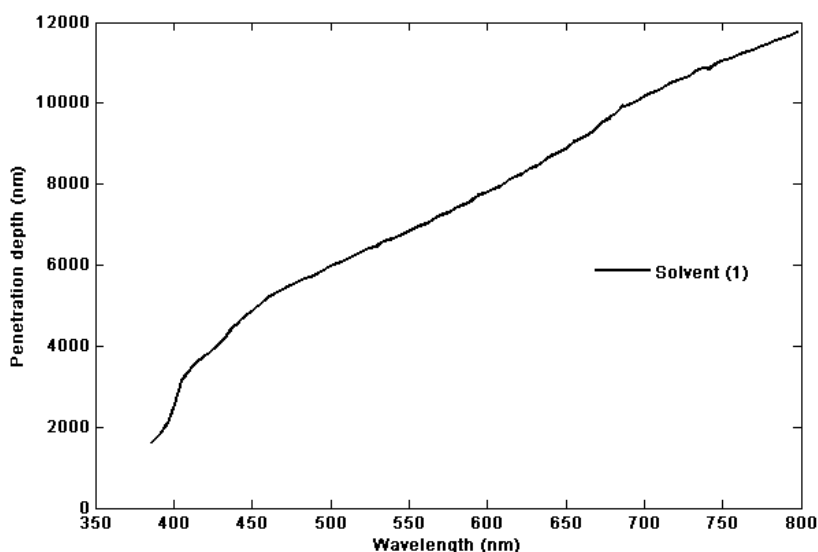
شکل(۴-۴): ضریب خاموشی محاسبه شده با روش پوما و برازش آن با روابط کوشی در لایه های نازک.



شکل(۴-۴): ضریب شکست محاسبه شده با روش پوما و برازش آن با روابط کوشی در لایه های نازک.

۴-۱-۴-۴) عمق نفوذ

شکل (۴-۴) نمودار عمق نفوذ نمونه بر حسب طول موج نور فرودی را نشان می دهد. نمودار تقریباً یک وابستگی خطی با شیب مثبت را نشان می دهد. هر چه انرژی نور فرودی زیاد می گردد و به لبه جذب نزدیک می شود عمق نفوذ، بعلت جذب الکترون ماده، کاسته می شود تا به حداقل خود برسد.

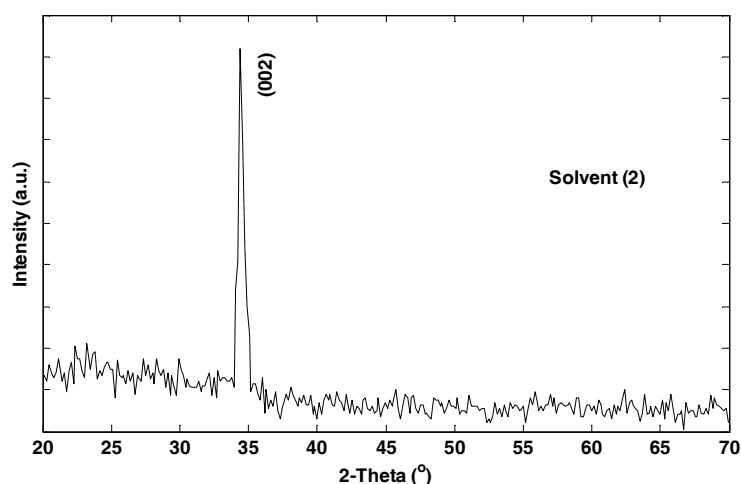


شکل (۴-۴): نمودار عمق نفوذ نمونه بر حسب طول موج نور فرودی

۴-۲-۴-۴) حلال نوع دوم

۴-۲-۴-۴) طیف XRD

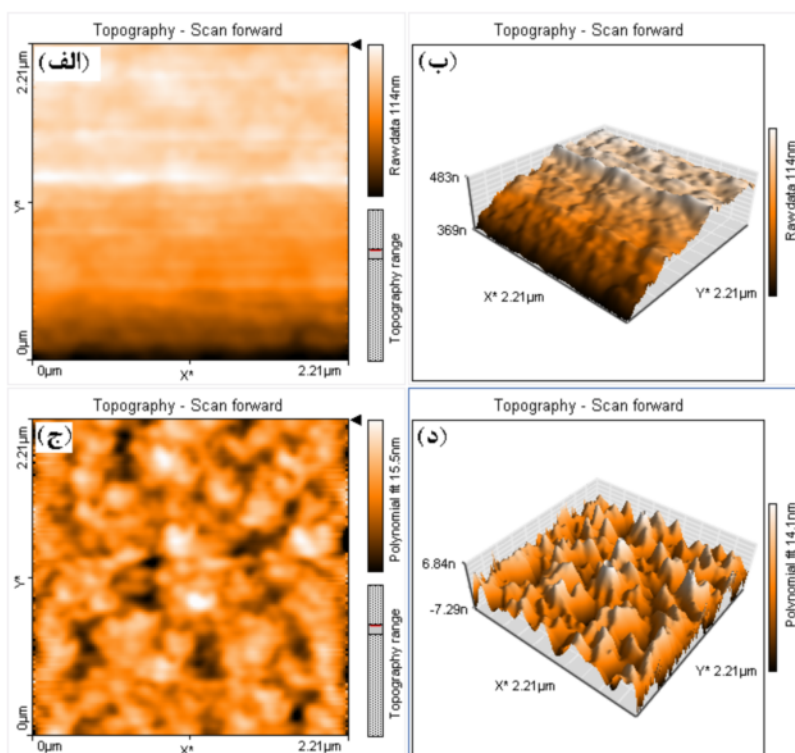
شکل (۴-۴) طیف XRD نمونه بازپخت شده را در دمای اتاق برای حلال دوم نشان می دهد. این طیف یک ساختار ششگوش اکسید روی با پارامترهای شبکه $a=b=3/249 \text{ \AA}$ و $c=5/205 \text{ \AA}$ را نشان می دهد. پارامتر شبکه c کمی از نمونه خالص حجمی بیشتر است که احتمالاً به دلیل اختلاف شعاع منگنز با روی می باشد که از آن بزرگتر است. در طیف هیچگونه فاز ثانوی مربوط به تشکیل اکسید منگنز و خوشه های آن دیده نمی شود. جهت نظم بلوری ارجح برای این نمونه (۰۰۲) می باشد. اندازه دانه های محاسبه شده برای این نمونه ۲۳ نانومتر است.



شکل (۴-۴۷): طیف XRD نمونه بازپخت شده در دمای اتاق.

۴-۴-۲ مورفولوژی سطح

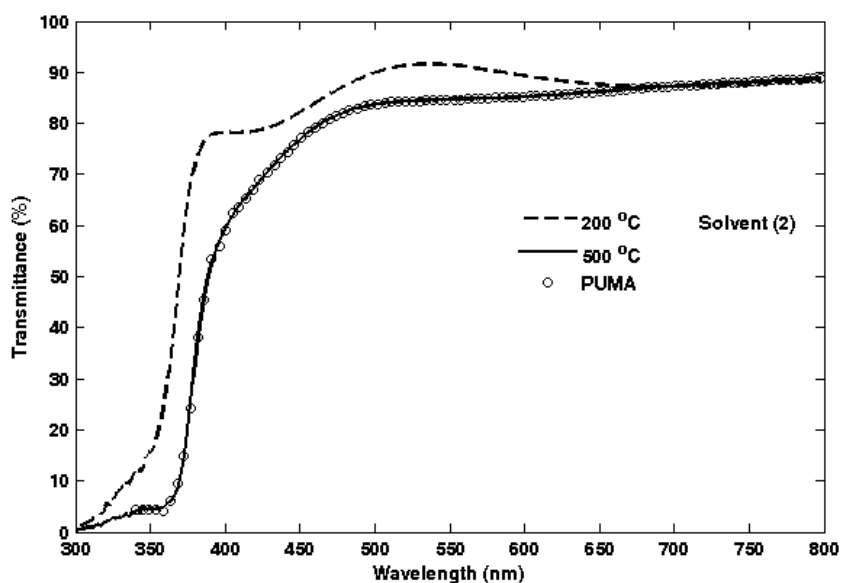
شکل (۴-۴۸) مورفولوژی سطح نمونه در دمای اتاق را نشان می دهد. تصویر برداری در ابعاد $2/2 \times 2/2 \mu\text{m}$ انجام شده است. شکل‌های (الف) و (ج) { (ب) و (د) } بترتیب مربوط به تصویر دوبعدی {سه بعدی} نمونه با داده‌های خام و برازش شده با چند جمله ایها است. جذر مربع میانگین زبری نمونه $21/051 \text{ nm}$ محاسبه شده است.



شکل (۴-۴۸): مورفولوژی سطح نمونه در دمای اتاق.

طیف تراگسیل (۳-۲-۴-۴)

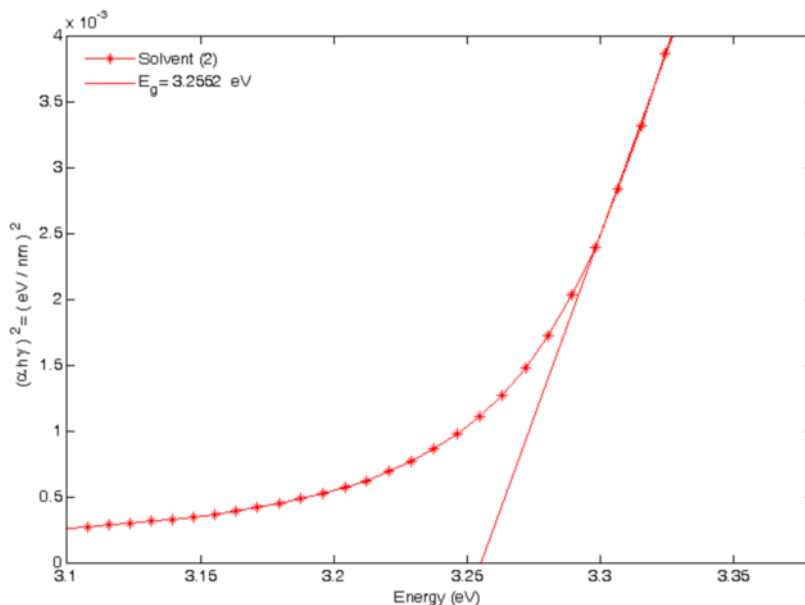
شکل (۴-۴۹) طیف تراگسیل نمونه های بازپخت شده و بدون بازپخت را نشان می دهد. همانطوری که در این شکل دیده می شود تغییرات طیف در ناحیه مرئی بین ۸۰ تا ۹۰ درصد است. در لبه جذب که برهمکنش نور و الکترون ماده قوی است حداقل طیف تراگسیل را شاهد هستیم. درصد تراگسیل نمونه بازپخت نشده بیشتر از نمونه بازپخت شده است. بعلت موازی بودن سطوح فصل مشترک در نمونه بازپخت نشده الگوی تداخلی مشاهده می شود. این الگوی پراش در نمونه بازپخت شده بعلت زبر شدن سطوح حاصل از تبخیر مواد آلی مشاهده نمی شود. طیف تراگسیل نمونه بازپخت شده که با روش پوما محاسبه شده است توافق خوبی با داده های تجربی دارد.



شکل (۴-۴۹): طیف تراگسیل نمونه در دمای اتاق برای دمای خشک سازی و بازپخت.

گاف نواری (۴-۲-۴-۴)

شکل (۴-۵۰) محاسبه انرژی گاف در نمونه بازپخت شده را نشان می دهد. این محاسبه بر اساس برونمایی خط بر داده های تجربی از رابطه (۴-۱) است که مقدار آن $3/2552 \text{ eV}$ می باشد.

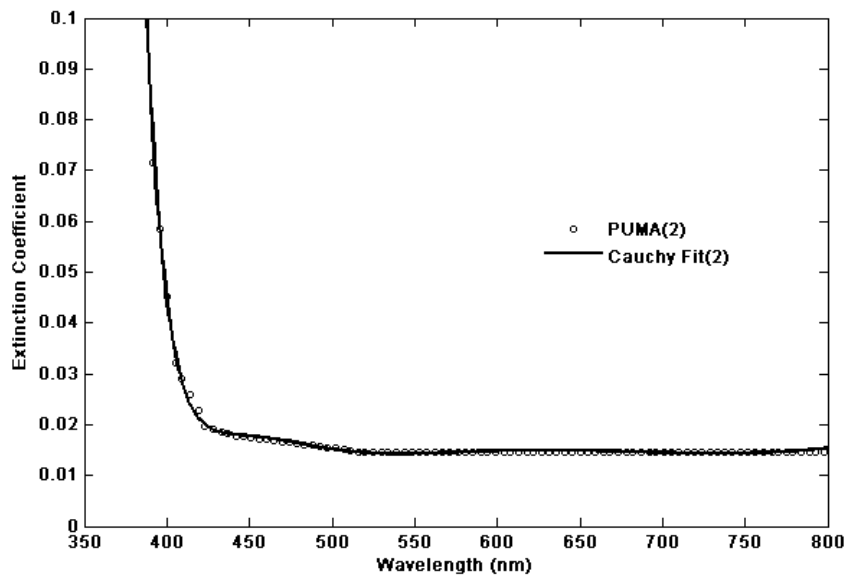


شکل (۴-۵۰): محاسبه انرژی گاف نمونه بازپخت شده.

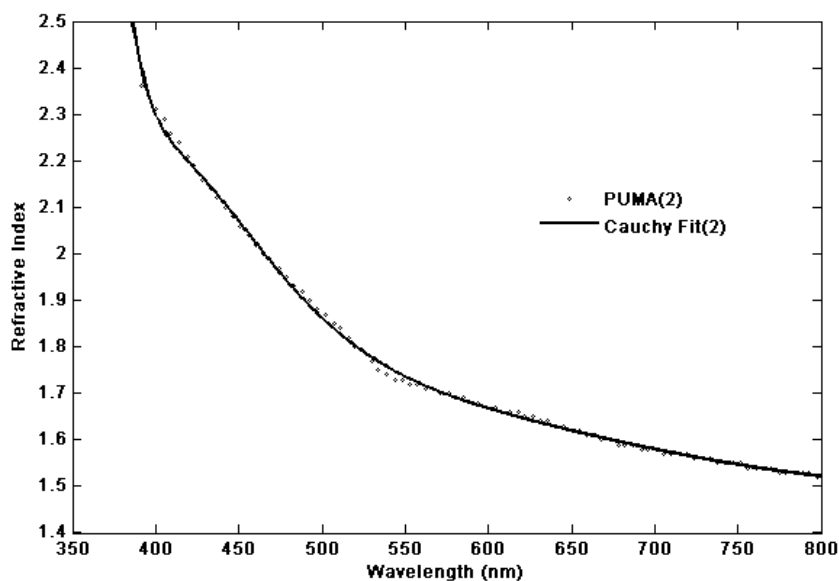
۴-۲-۴-۵) ثابتهای اپتیکی

شکل (۴-۵۱) ضریب خاموشی مربوط به نمونه بازپخت شده که با روش پوما محاسبه و با روابط کوشی در لایه های نازک برازش شده است، را نشان می دهد. تغییرات ضریب خاموشی بین ۰/۱ تا ۰/۱ است. برای این نمونه نیز ضریب خاموشی در طول موج بلند کاهش یافته ولی در لبه جذب که برهمکنش الکترون و فوتون زیاد است افزایش می یابد.

شکل (۴-۵۲) مربوط به محاسبه ضریب شکست نمونه در دما بازپخت است. محاسبه بر اساس روابط تئوری پوما صورت گرفته و سپس با روابط کوشی برازش شده است. حدود تغییرات ضریب شکست بین ۱/۵ تا ۲/۵ است. ضریب شکست در طول موجهای بلند کاهش می یابد ولی در نزدیکی لبه جذب افزایش چشمگیری دارد و پاشندگی نور در این ناحیه قوی است.



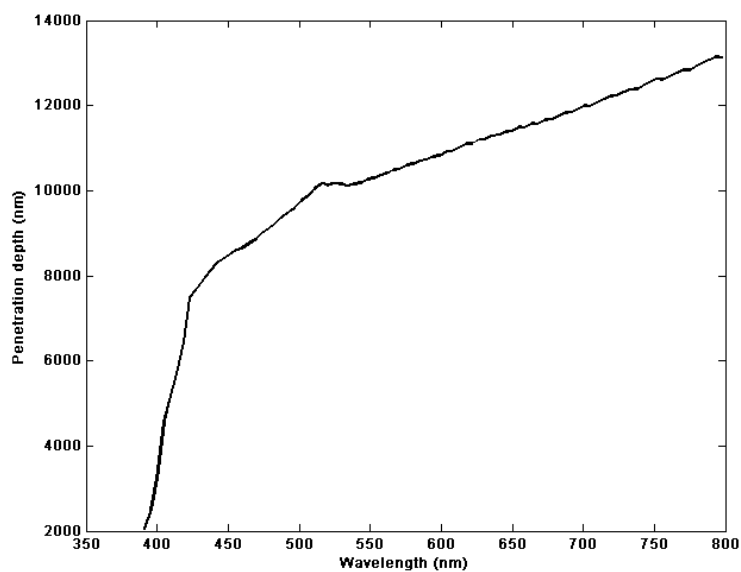
شکل (۴-۵۱): ضریب خاموشی محاسبه شده با روش پوما و برازش آن با روابط کوشی در دمای بازیخت.



شکل (۴-۵۲): ضریب شکست محاسبه شده با روش پوما و برازش آن با روابط کوشی در دمای بازیخت.

۴-۲-۴-۶ عمق نفوذ

منحنی عمق نفوذ این نمونه بر حسب طول موج نور فرودی در شکل (۴-۵۳) نشان داده شده است. عمق نفوذ در طول موجهای بلند تا حدود ۴۳۰ نانومتر با شیب ملایمی کاهش می یابد. چون ضریب خاموشی و ضریب شکست برای انرژیهای بالا زیاد است، عمق نفوذ کاهش می یابد که نشان دهنده برهمکنش قوی فوتون - الکترون است.

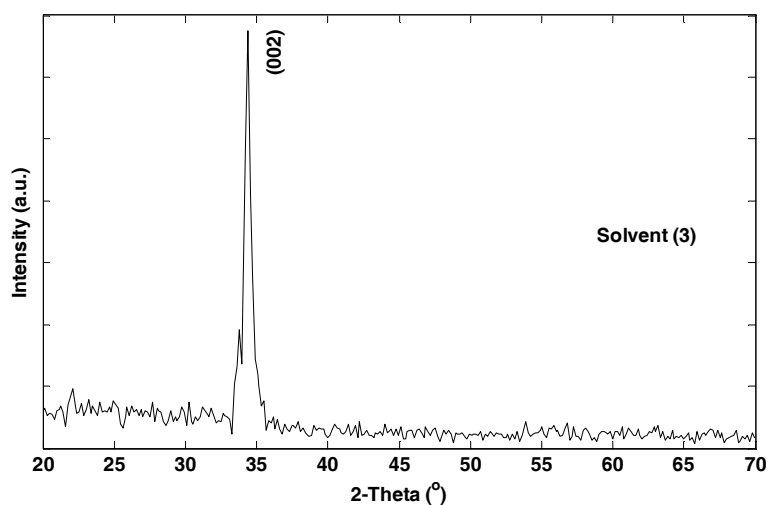


شکل (۴-۵۳): نمودار عمق نفوذ نمونه بر حسب طول موج نور فرودی

۳-۴-۴) حلال نوع سوم

۱-۳-۴-۴) طیف XRD

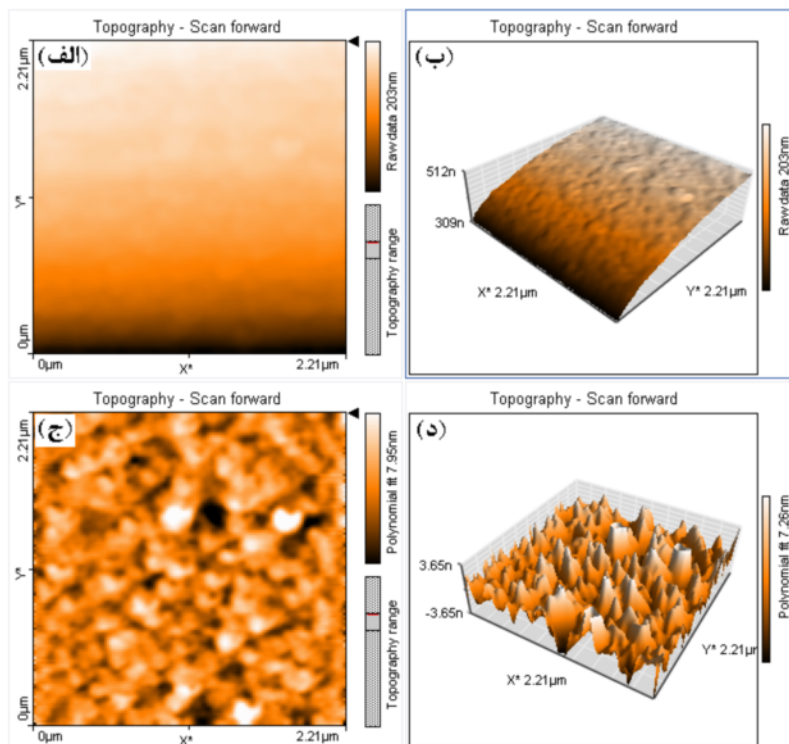
طیف XRD نمونه بازپخت شده در شکل (۴-۵۴) نشان داده شده است. نمونه جهت ترجیحی رشد (۰۰۲) است. این طیف مربوط به یک ساختار ششگوشی اکسید روی است که در آن ساختار فاز ثانویه مربوط به اکسید منگنز یا خوشه های آن وجود ندارد. اندازه دانه های محاسبه شده با استفاده از رابطه (۴-۲) در حدود ۱۹/۹ نانومتر است.



شکل (۴-۵۴): طیف XRD نمونه بازپخت شده در دمای اتاق.

۴-۳-۲ مورفولوژی سطح

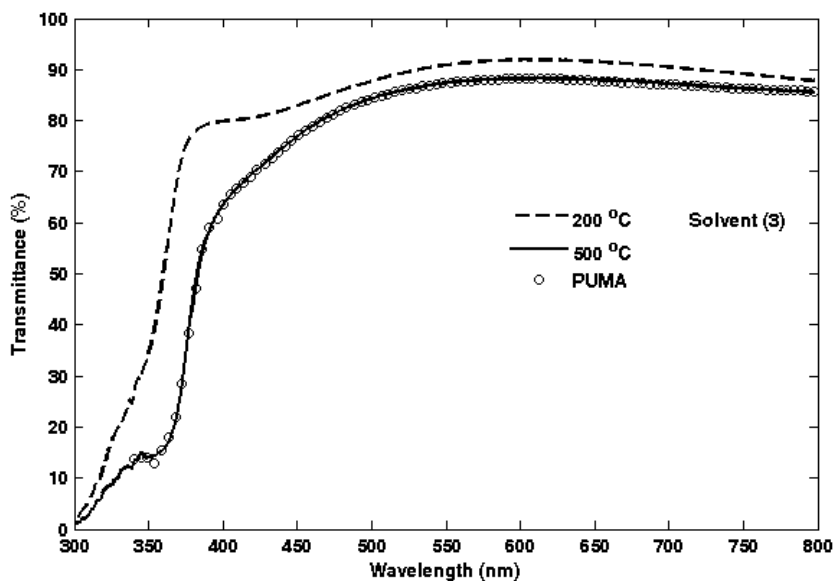
شکل (۴-۵۵) مورفولوژی سطح نمونه در دمای اتاق را نشان می دهد. تصویر برداری در سطح $2/2 \times 2/2 \mu\text{m}$ انجام شده است شکل‌های (الف) و (ج) و (ب) و (د) بترتیب مربوط به تصویر دوبعدی {سه بعدی} نمونه با داده‌های خام و برازش شده با چند جمله ایها است. جذر مربع میانگین زبری نمونه $11/053 \text{ nm}$ محاسبه شده است.



شکل (۴-۵۵): مورفولوژی سطح نمونه در دمای اتاق.

۴-۳-۳ طیف تراگسیل

شکل (۴-۵۶) طیف تراگسیل نمونه را در دمای اتاق برای نمونه بازپخت شده و بدون بازپخت را نشان می دهد. تغییرات طیف تراگسیل در ناحیه مرئی بین ۸۰ تا ۹۰ درصد است. با توجه به طیف تراگسیل، نمونه بازپخت نشده نسبت به نمونه باز پخت شده شفافتر است زیرا در دمای بازپخت تمام مواد آلی تبخیر می شوند و ماده شکل جامد بلوری به خود می گیرد. طیف تراگسیل در طول موجهای کوتاه کاهش می یابد تا به حداقل خود در لبه جذب بدلیل برهمکنش الکترون - فوتون می رسد. طیف تراگسیل محاسبه شده با تئوری پوما توافق خوبی با داده های تجربی دارد.

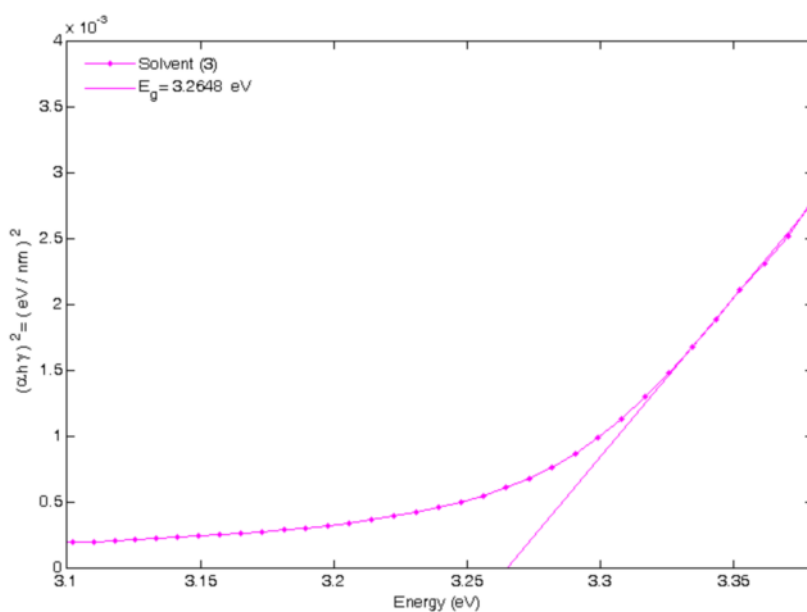


شکل (۴-۵۶): طیف تراگسیل نمونه در دمای اتاق برای دمای خشک سازی و بازپخت.

۴-۳-۴-۴ انرژی گاف

شکل (۴-۵۷) مربوط به محاسبه انرژی گاف مستقیم در دما بازپخت است. مقدار انرژی گاف مستقیم

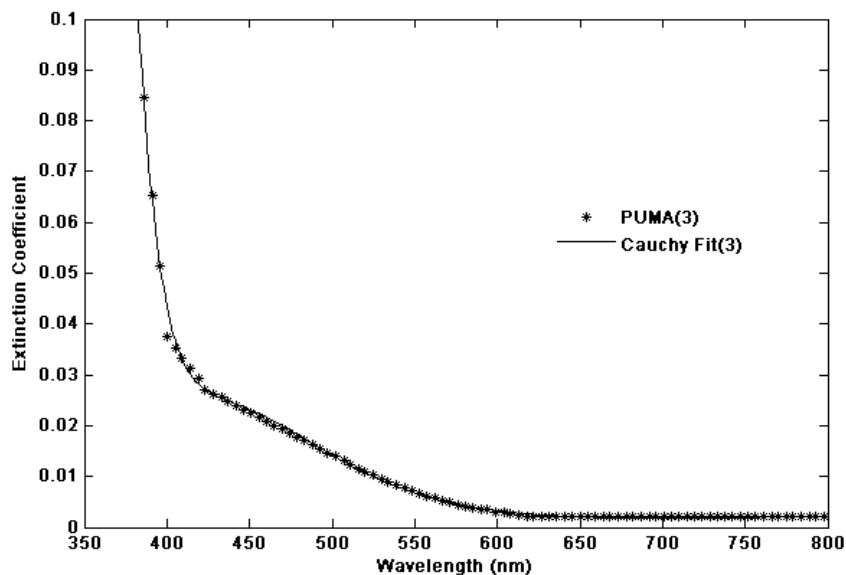
محاسبه شده با استفاده از رابطه (۴-۱) در این نمودار برابر با $3/2648 \text{ eV}$ است.



شکل (۴-۵۷): محاسبه انرژی گاف نمونه در دما بازپخت.

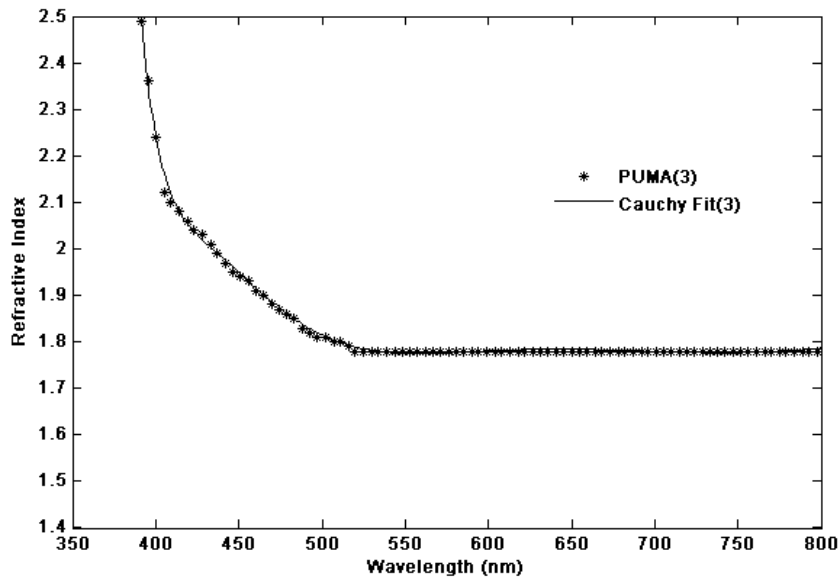
۵-۳-۴-۴) ثابتهای اپتیکی

شکل (۵۸-۴) ضریب خاموشی محاسبه شده با روش پوما و برازش آن با روابط کوشی در لایه های نازک برای نمونه بازپخت شده را نشان می دهد. همانطوری که در این شکل دیده می شود تغییرات ضریب خاموشی کمتر از ۰/۱ است. در طول موجهای بلند، مقدار آن کاهش می یابد تا به حداقل خود برسد. برای طول موجهای لبه جذب این مقدار افزایش چشمگیری دارد زیرا برهمکنش الکترون-فوتون در این ناحیه قوی است.



شکل (۵۸-۴): ضریب خاموشی محاسبه شده با روش پوما و برازش آن با روابط کوشی در لایه های نازک.

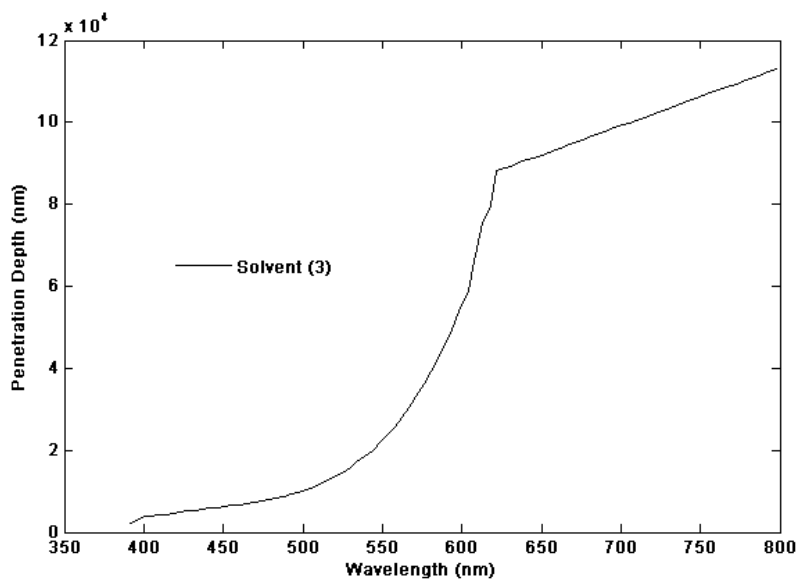
شکل (۵۹-۴) مربوط به محاسبه ضریب شکست نمونه بازپخت شده می باشد. تغییرات ضریب شکست بین ۱/۷ تا ۲/۵ است. مقدار آن در طول موجهای بلند کاهش یافته تا به حداقل خود می رسد ولی در لبه جذب افزایش قابل چشمگیری دارد. داده های محاسباتی بر اساس تئوری پوما با روابط کوشی توافق خوبی دارند.



شکل(۴-۵۹): ضریب شکست محاسبه شده با روش پوما و برازش آن با روابط کوشی در لایه های نازک.

۶-۳-۴-۴ عمق نفوذ

نمودار عمق نفوذ نمونه بر حسب طول موج نور فرودی در شکل (۴-۶۰) نشان داده شده است. عمق نفوذ از طول موجهای بلند تا ۶۲۲ نانومتر بصورت خطی کاهش می یابد ولی در طول موجهای کمتر از آن کاهش بصورت یک تابع چند جمله ای است. عمق نفوذ در طول موجهای بلند بیشتر است.

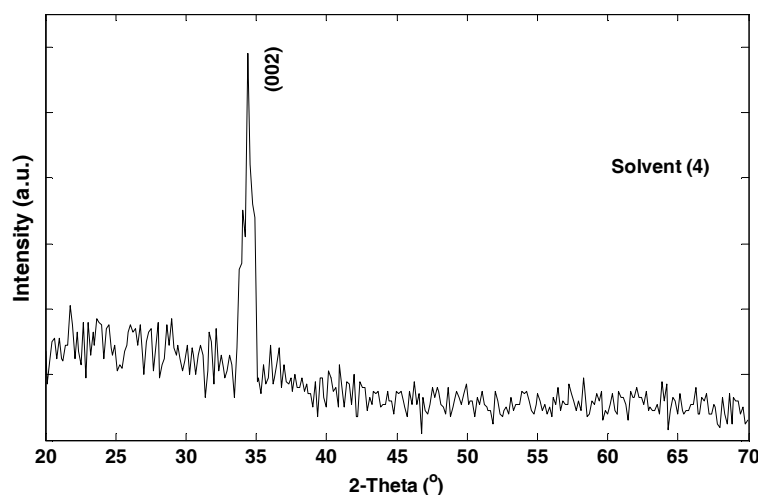


شکل(۴-۶۰): نمودار عمق نفوذ نمونه بر حسب طول موج نور فرودی.

۴-۴-۴ حلال نوع چهارم

۴-۴-۴-۱ طیف XRD

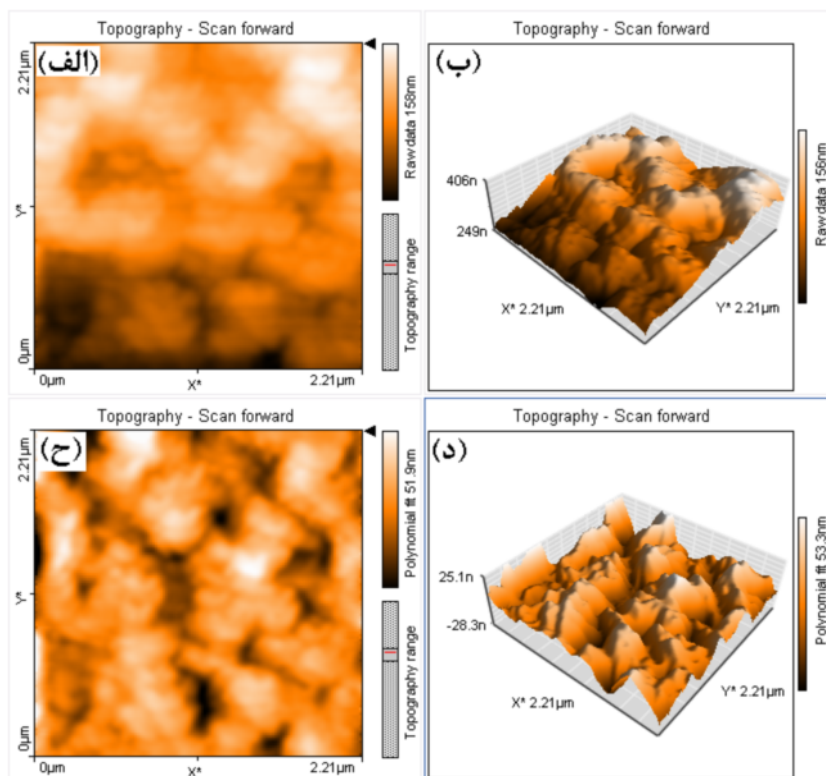
طیف XRD نمونه در دمای اتاق در شکل (۴-۶۱) نشان داده شده است. این طیف مربوط به یک ساختار ششگوشی اکسید روی است که هیچگونه فاز ثانویه از اکسید منگنز یا خوشه های آن دیده نمی شود. تمام جهتها بجز جهت (۰۰۲) آمورف هستند. اندازه دانه ها با استفاده از رابطه (۴-۲) که ساختار لایه نازک را تشکیل می دهند ۱۷/۹ نانومتر محاسبه شده است.



شکل (۴-۶۱): طیف XRD نمونه در دمای اتاق.

۴-۴-۴-۲ مورفولوژی سطح

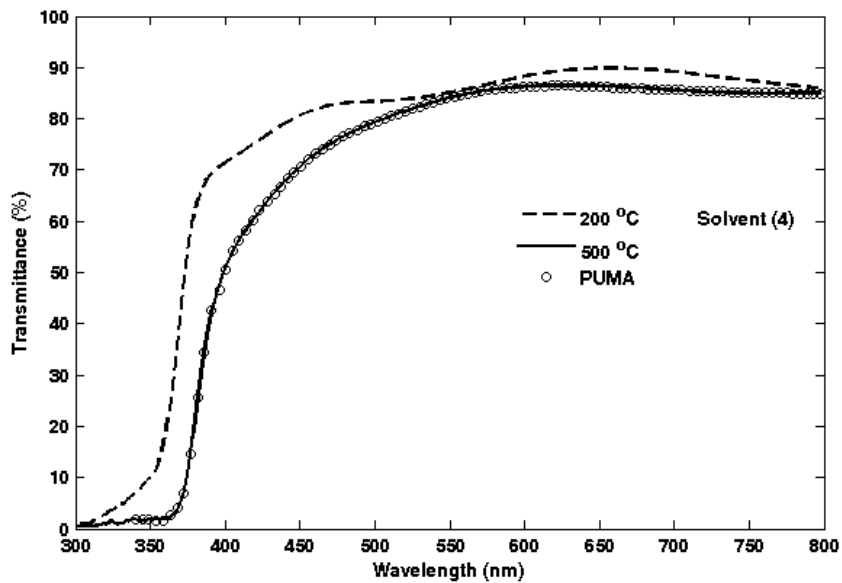
شکل (۴-۶۲) مورفولوژی سطح نمونه در دمای اتاق را نشان می دهد. در اینجا نیز تصویر برداری در سطح $2/2 \times 2/2 \mu\text{m}$ است. شکل‌های (الف) و (ج) { (ب) و (د) } بترتیب مربوط به تصویر دوبعدی {سه بعدی} نمونه با دادهای خام و برازش شده با چند جمله ایها است. جذر مربع میانگین زبری نمونه ۷۱/۸۷ nm محاسبه شده است.



شکل (۴-۶۲): مورفولوژی سطح نمونه در دمای اتاق.

۴-۴-۳) طیف تراگسیل

طیف تراگسیل نمونه در دمای اتاق برای نمونه بازپخت شده و نشده در شکل (۴-۶۳) نشان داده شده است. تغییرات طیف تراگسیل در ناحیه مرئی بین ۸۰ تا ۹۰ درصد است. درصد طیف تراگسیل در دمای خشک سازی برای این نمونه نیز نه تنها از طیف تراگسیل در دمای باز پخت بیشتر است بلکه بعلاوه موازی بودن سطوح درفصل مشترک بین لایه و محیط، الگوی پراش دیده می شود. طیف تراگسیل حاصل از داده های تجربی و روش پوما در توافق خوبی هستند.

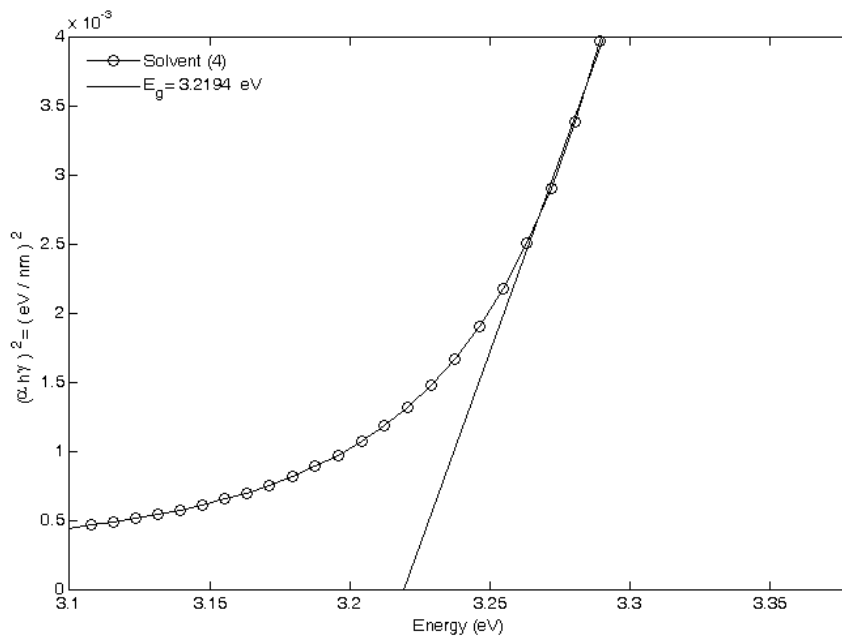


شکل (۴-۶۳): طیف تراکسیل نمونه در دمای اتاق برای دمای خشک سازی و بازپخت.

گاف انرژی (۴-۴-۴-۴)

شکل (۴-۶۴) مربوط به محاسبه گاف انرژی مستقیم نمونه در دمای بازپخت است. مقدار گاف انرژی

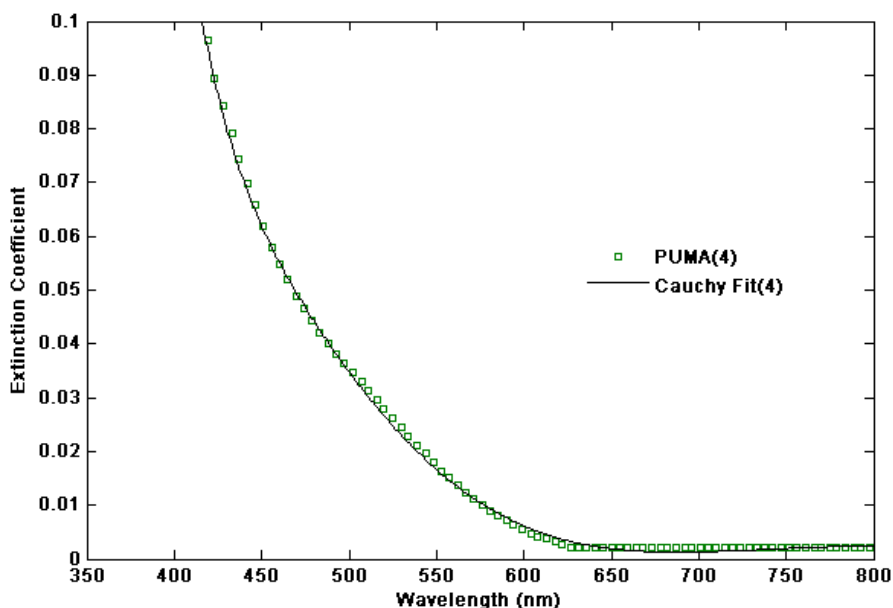
محاسبه شده با استفاده از رابطه (۴-۱) برابر با 3.2194 eV است.



شکل (۴-۶۴): محاسبه انرژی گاف نمونه بازپخت شده.

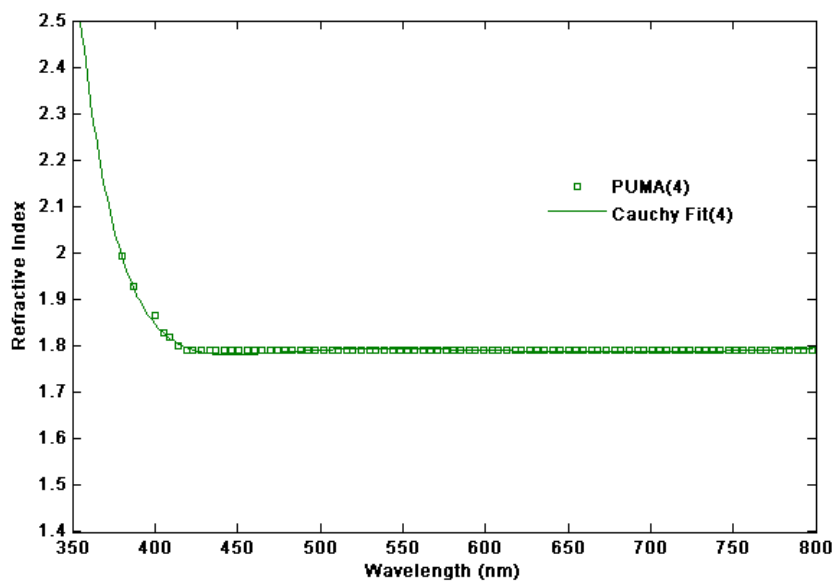
۴-۴-۵) ثابتهای اپتیکی

شکل (۴-۶۵) ضریب خاموشی محاسبه شده با روش پوما و برازش آن با روابط کوشی در لایه های نازک برای دمای بازپخت را نشان می دهد. تغییرات ضریب خاموشی کمتر از ۱/۰ است و با افزایش طول موج کاهش می یابد. در لبه جذب الکترونی مقدار ضریب خاموشی افزایش می یابد. داده های محاسباتی سپس با روابط کوشی در لایه های نازک برازش شده اند.



شکل (۴-۶۵): ضریب خاموشی محاسبه شده به روش پوما و برازش آن با روابط کوشی.

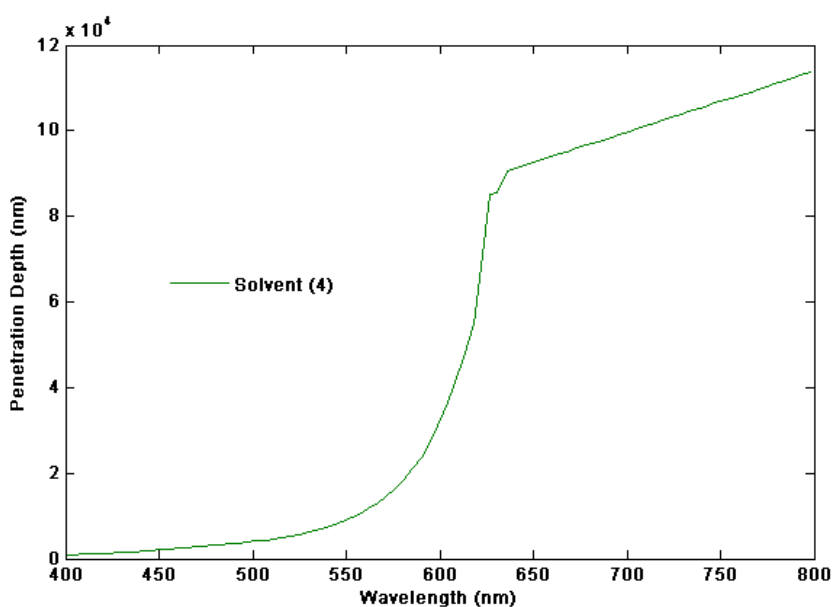
شکل (۴-۶۶) مربوط به ضریب شکست نمونه محاسبه شده با این روش است. حدود تغییرات آن بین ۱/۷ تا ۲/۵ است. ضریب شکست تابعی از طول موج است و این وابستگی در لبه جذب بیشتر می باشد. ضریب شکست در طول موجهای بلند تغییرات قابل ملاحظه ای ندارد و تقریباً ثابت است.



شکل (۴-۶۶): ضریب شکست محاسبه شده به روش پوما و برازش آن با روابط کوشی.

۴-۴-۶ عمق نفوذ

عمق نفوذ نمونه بر حسب طول موج نور فرودی در شکل (۴-۶۷) نشان داده شده است. عمق نفوذ نمونه از طول موجهای بلند تا ۶۴۰ نانومتر بطور خطی کاهش می یابد ولی برای طول موجهای کوتاه این کاهش بصورت یک تابع چند جمله است.



شکل (۴-۶۷): نمودار عمق نفوذ نمونه بازپخت شده بر حسب طول موج نور فرودی.

۴-۴-۵) نتایج و بحث

۴-۴-۵-۱) PH و ویسکوزیته

آزمایشات نشان می دهد که PH محیط سلی بر خواص ساختاری، اپتیکی و الکتریکی ZnO و اندازه دانه ها تاثیر می گذارد و خواص نانو فیلمها را تغییر می دهد [۸۶،۸۵]. جدول (۴-۲) نشان می دهد که محیط سلی تقریباً قلیائی و مقدار آن با توجه به نوع الکل حلال از ۷/۴ تا ۷/۸۳ تغییر می کند. یکی از عوامل قلیائی کردن محیط سلی ممکن است استفاده از منو اتانول آمین باشد. پارامتر مهم دیگر که باعث افزایش و کاهش ضخامت لایه ها می شود تغییر ویسکوزیته محیط سلی است که با گذشت زمان و دما تغییر می کند و رابطه مستقیم بر تشکیل ژل محیط سلی دارد. جدول (۴-۲) تغییرات ویسکوزیته محیط سلی را با تغییرات حلال از ۳/۲ تا ۴/۸ نشان می دهد.

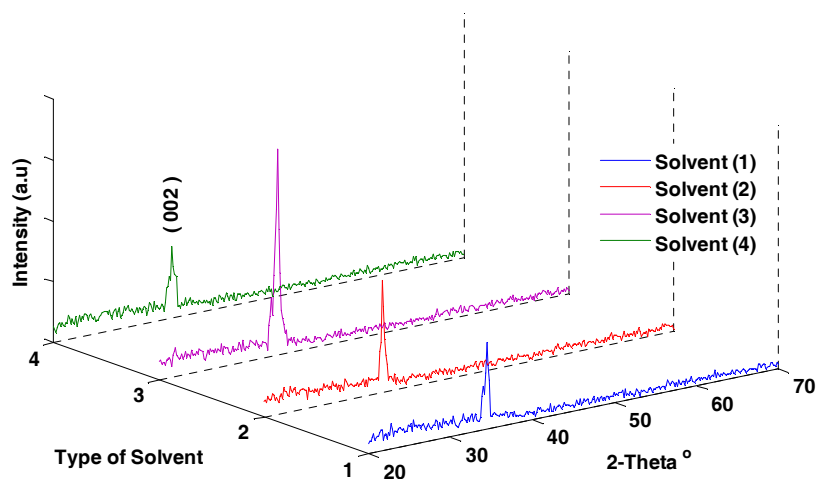
جدول (۴-۲): PH و ویسکوزیته برای حلالهای مختلف

نوع حلال	PH	ویسکوزیته (mPa.s)
۱	۷/۷۰	۳/۲
۲	۷/۴۱	۴/۳
۳	۷/۸۳	۴/۴
۴	۷/۴۰	۴/۸

۴-۴-۵-۲) طیف XRD

شکل (۴-۶۸) طیف مربوط به نمونه ها را بر حسب زاویه نشان می دهد که مشخصات ساختاری آنها در جدول (۴-۳) خلاصه شده است. دستگاه در دمای اتاق برای زاویه پراش از ۲۰ تا ۷۰ با گام ۰/۰۲ بر حسب درجه تنظیم شده است. الگوی پراش نشان می دهد که همه نمونه ها فقط در جهت (۰۰۲) تشکیل ساختار بلوری داده اند. همانطوری که دیده می شود ساختار تمام نانو فیلم ها هگزاگونال است. طیف XRD نشان می دهد که هیچگونه فاز ثانویه ناشی از تشکیل ساختار خوشه ای منگنز یا اکسیدهای آن وجود ندارد. از جدول (۴-۳) دیده می شود که تغییر نوع حلال باعث تغییر در پهنای

قله (FWHM) نمونه شده که این نیز روی اندازه دانه ها و کیفیت نمونه ها تاثیر مستقیم می گذارد. همانطوری که از جدول (۳-۴) دیده می شود پارامتر شبکه C افزایش می یابد. که می تواند به دلیل تفاوت در شعاع یونی $Mn^{2+}(0.66\text{\AA})$ و شعاع یونی $Zn^{2+}(0.60\text{\AA})$ باشد. آرایش منگنز باعث ایجاد کرنش در سلول واحد ZnO شده و احتمال دارد ساختار آن را در بعضی از جهتها تغییر دهد. بلور برای تنش زدائی، عمل واهلش ابعاد را انجام می دهد که باعث تغییرات پارامتر شبکه در جهت C می شود و انتظار داریم پارامتر شبکه در جهت C افزایش یابد.



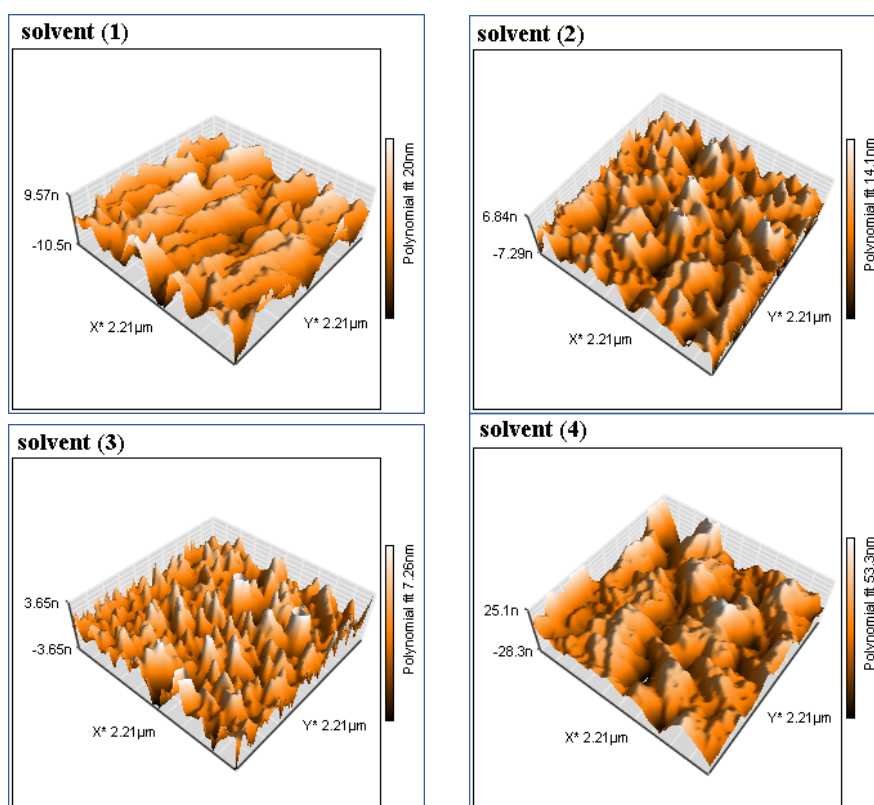
شکل (۴-۶): طیف XRD همه نمونه های بازیخت شده در دمای اتاق.

جدول (۳-۴): ویژگیهای ساختاری XRD همه نمونه ها.

نوع حلال	ثابت شبکه (\AA)				FWHM ^o	موقعیت قله ها (2θ)	اندازه دانه ها (nm)
	a=b		c				
	حجمی	این کار	حجمی	این کار			
۱	۳/۲۴۹۵	۳/۲۴۹۰۰	۵/۲۰۶۹	۵/۲۰۸۰۰	۰/۲۸۳	۳۴/۵۶۱	۳۱/۳۲۰
۲					۰/۳۰۵	۳۴/۴۷۴	۲۸/۷۸۶۸
۳					۰/۴۴۱	۳۴/۴۷۶	۱۹/۹۰۹۳
۴					۰/۱۷۱	۳۴/۴۳۶	۵۱/۳۳۹۶

۳-۵-۴-۴ مورفولوژی سطح

شکل (۴-۶۹) مورفولوژی سطح نمونه ها را در دمای اتاق نشان می دهد. تصویر برداری در ابعاد $2/2 \times 2/2 \mu\text{m}$ انجام شده است. شکلهای حلالهای (۱)، (۲)، (۳) و (۴) بترتیب مربوط به تصویر سه بعدی نمونه ها با دادهای برازش شده با چند جمله ایها است.



شکل (۴-۶۹): مورفولوژی سطح نمونه ها

جزر مربع میانگین زبری نمونه ها در جدول (۴-۴) نشان داده شده است. همانطور که دیده می شود زبری نمونه ها با تغییر حلال از ۱ تا ۹/۵ نانومتر تغییر می کند. حدود این تغییرات نشان می دهد سطوح دارای نرمی قابل توجهی هستند. در شرایط یکسان مکانیزم این تغییرات مشخص نیست، ممکن است زبری و نرمی به دمای جوش، ویسکوزیته و چگالی حلال وابسته باشد.

جدول (۴-۴): مشخصات مورفولوژی سطح

(۴)	(۳)	(۲)	(۱)	نوع حلال	
غیر تماسی				نوع تصویر برداری	
چند جمله ای				نوع برازش	
۴/۸۷۹				ناحیه جاروب شده (pm ²)	
۷/۴۳۵۵	۱/۰۷۹۵	۱/۹۸۹۶	۲/۸۲۰۳	متوسط زبری ^۱	نوع زبری ناحیه (nm)
۹/۴۰۶۱	۱/۳۹۴۲	۲/۵۱۸۹	۳/۴۸۷۵	میانگین زبری ^۲	
۷۱/۸۷	۱۱/۰۵۳	۲۱/۰۵۱	۲۲/۴۷۵	جذر میانگین مربع زبری ^۳	
۳۱/۳۷۷	۶/۱۶۷۲	۸/۷۳۱	۱۱/۱۲۴	حد اکثر ارتفاع قله (nm)	
-۴۰/۴۹۳	-۴/۸۸۵۳	-۱۲/۳۲	-۱۱/۳۵۲	حد اقل عمق دره (nm)	
۵۳/۱۳۶	۲۵/۳۸۸	۵۱/۰۶	۳۵/۵۴۸	اختلاف ارتفاع بین قله و دره (pm)	

در این جدول مقادیر متوسط ارتفاع (S_a)، میانگین ارتفاع (S_m) و جذر میانگین مربع ارتفاع (S_q) زبری به ترتیب توسط روابط (۴-۳) بدست می آیند.

$$S_a = \frac{1}{MN} \sum_{k=1}^{M-1} \sum_{l=1}^{N-1} |z(x_k, y_l)|$$

$$S_m = \frac{1}{MN} \sum_{k=1}^{M-1} \sum_{l=1}^{N-1} z(x_k, y_l) \quad (۴-۳)$$

$$S_q = \sqrt{\frac{1}{MN} \sum_{k=1}^{M-1} \sum_{l=1}^{N-1} (z(x_k, y_l))^2}$$

که در این روابط M و N تعداد نقاط، و $(z(x_k, y_l))$ ارتفاع نقاط در نقطه x_k و y_l است. در ضمن یاد آوری می شود نوع برازش برای نقاط ارتفاع از نوع چند جمله ای است.

۴-۴-۵-۴) طیف تراکسیل

آنالیز طیف XRD همه نمونه ها نشان داد که آنها تک فاز بوده و دارای راستای ترجیحی (۰۰۲) می باشند. قله های اضافی ناشی از فاز منگنز روی طیفها مشاهده نمی شود. شکل (۴-۷۰) و (۴-۷۱) طیف عبوری ثبت شده نمونه ها در دمای اتاق در دو دمای خشک سازی 200°C و باز پخت

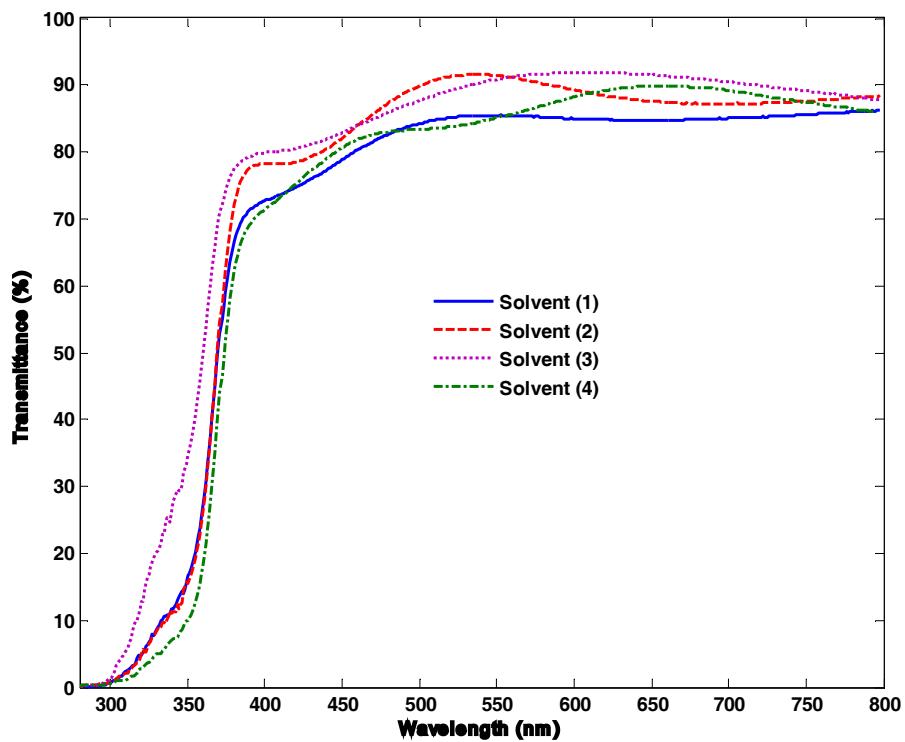
¹ The Roughness Average

² The Mean Value

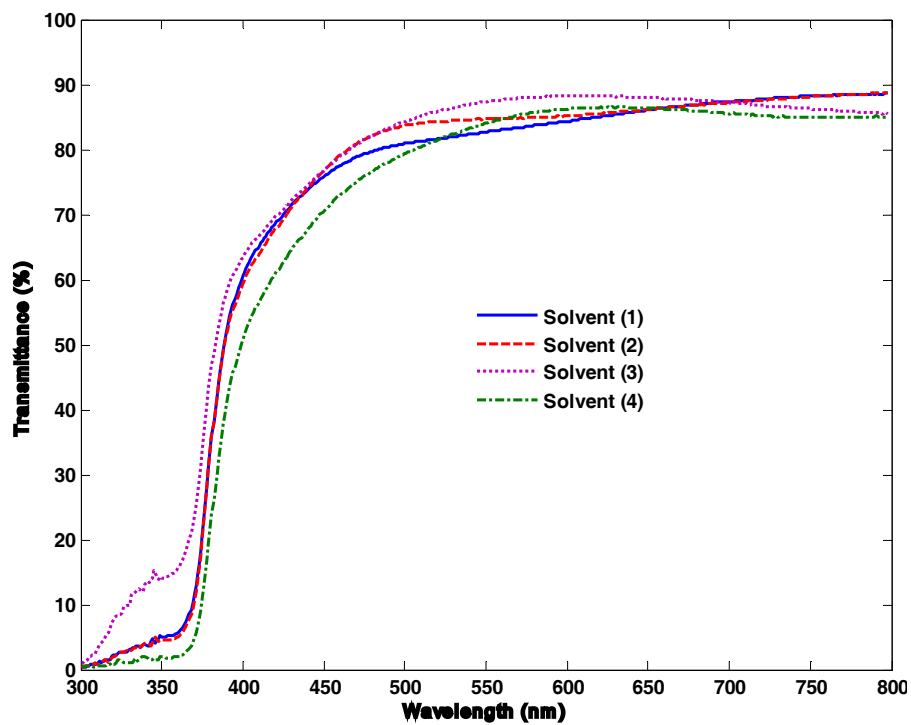
³ The Root Mean Square

۵۰۰°C را نشان می دهد. این اندازه گیری در بازه طول موجی ۲۰۰ تا ۸۰۰ نانومتر انجام شده است. همانطوری که مشاهده می شود در ناحیه مرئی همه نمونه ها شفاف هستند و لبه جذب حدود ۳۰۰ nm است. طیف تراگیسیل همه نمونه های بازپخت شده در ناحیه مرئی تا طول موج حدود ۴۰۰ nm افزایش یافته و سپس تقریباً ثابت می شود، لیکن طیف بعضی از نمونه ها مقدار کمی کاهش در ناحیه فوق بنفش را نشان می دهد. درصد طیف تراگیسیل نمونه ای که با حلال ۳ تهیه شده است برای تمام طول موجها بالاتر از دیگر نمونه ها است و دارای ماکزیممی حدود نود درصد است. همانطوری که از شکلها دیده می شود، طیف تراگیسیل نمونه ها اندکی به نوع حلال وابسته است. طیف تراگیسیل نمونه های باز پخت شده شکل (۴-۷۱)، در مقایسه با شکل (۴-۷۰) کاهش اندکی نشان می دهد اما هنوز نمونه تهیه شده با حلال شماره ۳ دارای درصد طیف تراگیسیل بالاتری نسبت به دیگر نمونه ها است.

وقتی نور به نیمرسانائی برخورد می کند سه پدیده نوری جذب، انعکاس و انتقال رخ می دهد. در انعکاس از یک فیلم نازک، نور نه تنها از سطح خارجی منعکس می شود بلکه از فصل مشترک ها نیز انعکاس می یابد. بعلت اینکه ضریب شکست ZnO خیلی بیشتر از هوا و شیشه است، انعکاس کلی از فصل مشترکها نیز می تواند رخ دهد. این اثر نه تنها درصد طیف تراگیسیل را کاهش می دهد بلکه همچنین بعلت اختلاف فاز ایجاد شده منجر به تشکیل یک الگوی تداخلی می گردد. افت و خیزهای ضعیفی که در طیف تراگیسیل نمونه های شکل (۴-۷۰) مشاهده می شود ناشی از این اثر است. در لایه های بازپخت شده این افت و خیزها در طیف تراگیسیل اساساً کاهش می یابد که احتمالاً ناشی از اثرات باز پخت در روی کیفیت فصل مشترکها است.



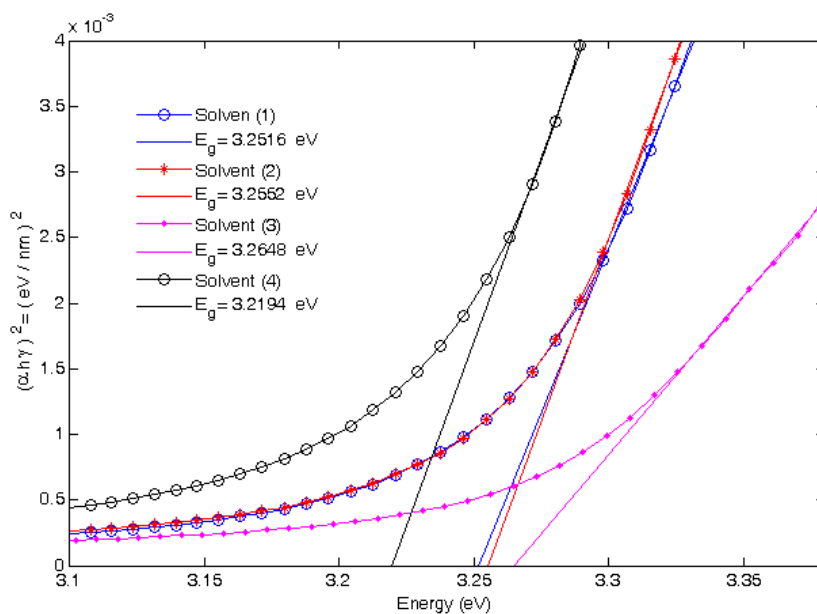
شکل (۴-۷۰): طیف تراگسیل نمونه ها در دمای اتاق برای دمای خشک سازی 20°C .



شکل (۴-۷۱): طیف تراگسیل نمونه ها در دمای اتاق برای دمای خشک سازی 50°C .

۴-۴-۵) گاف انرژی

با استفاده از رابطه (۴-۱) گاف انرژی مستقیم نمونه‌ها محاسبه شده است. شکل (۴-۷۲) کمیت $(\alpha h\nu)^2$ بر حسب انرژی نور فرودی را برای نمونه‌های بازپخت شده نشان می‌دهد. نتایج محاسبه گاف نوری نشان می‌دهد که نمونه تهیه شده با حلال ۳ (۴) دارای بزرگترین (کوچکترین) انرژی گاف است. این نتایج نشان می‌دهند که انرژی گاف با اندازه دانه‌ها رابطه عکس دارد. دمای بازپخت و دمای خشک‌سازی اثرات مهمی بر خواص ساختاری و نوری لایه‌های نازک ZnO:Mn و اندازه دانه‌ها دارد [۸۷, ۸۸, ۸۹]. بازپخت در دمای ۵۰۰°C باعث تبخیز مواد آلی شده و در نتیجه موجب تشکیل ساختار بلوری ZnO می‌گردد.

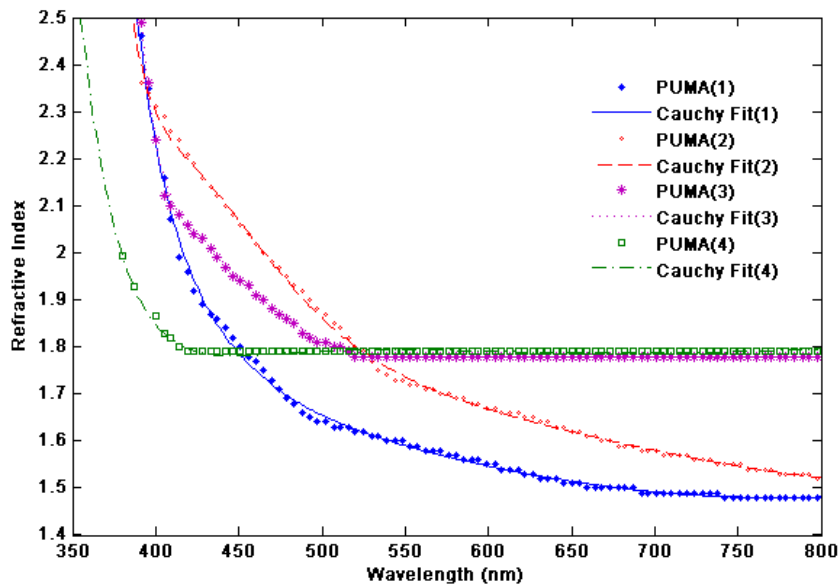


شکل (۴-۷۲): تعیین گاف نوری مستقیم نمونه‌های بازپخت شده برای حلال‌های مختلف.

۴-۴-۶) ثابتهای نوری

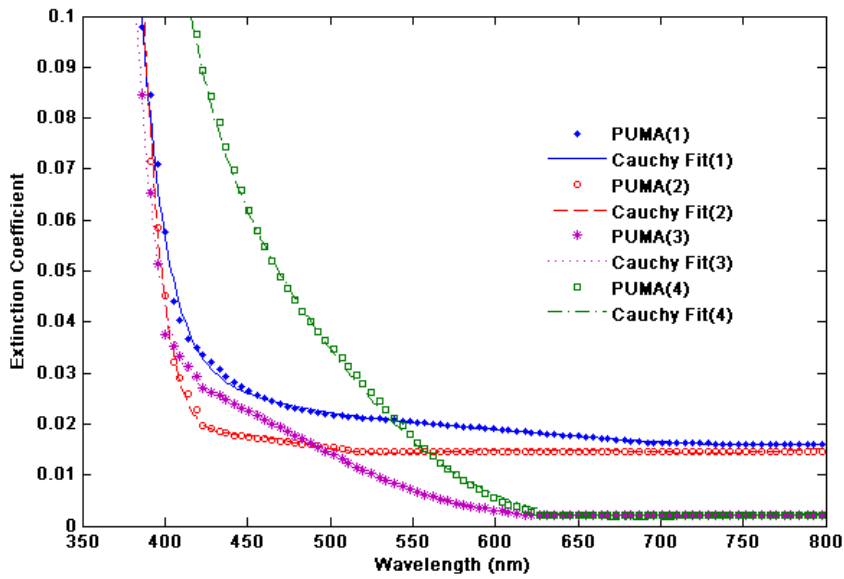
انتشار امواج الکترومغناطیس در محیطهای خطی به طور کامل با ثابتهای نوری n و k که به خاصیت دی الکتریک و رسانندگی ماده بستگی دارند، مشخص می‌شود. توصیف میکروسکوپی n و k یک ماده به واسطه برهمکنش امواج الکترومغناطیس با الکترون‌ها و یونهای ماده می‌باشد. کمیت‌های نوری n و k با استفاده از روابط پوما محاسبه و سپس با روابط کوشی در لایه‌های نازک برازش شده‌اند. وابستگی

طول موج به ضریب شکست فیلمهای نازک در شکل (۴-۷۳) نشان داده شده است. ضریب شکست نمونه ۴ به طور سریع با افزایش طول موج کاهش می یابد و سپس تقریباً در طول موج ۴۰۰ nm ثابت می ماند. ضریب شکست نمونه های ۳ و ۴ با وجود آنکه رفتار اولیه آنها متفاوت است، در طول موجهای بیشتر از ۵۰۰nm تقریباً یکسان است. ضریب شکست نمونه های ۱ و ۲ بطور کامل رفتار متفاوتی دارند و با افزایش طول موج کاهش پیدا می کند. اگرچه مقادیر کاهش آنها کمتر از نمونه های ۳ و ۴ است.



شکل (۴-۷۳): تغییرات ضریب شکست نمونه ها بر حسب طول موج.

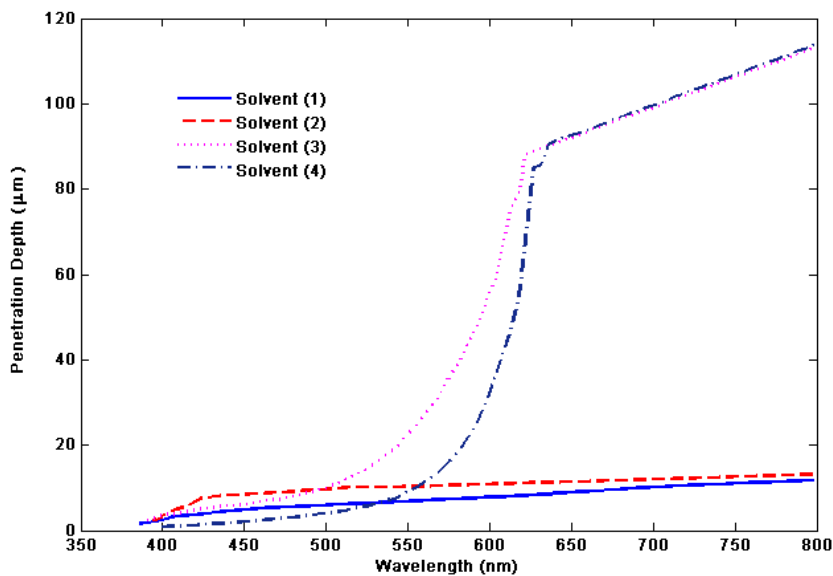
شکل (۴-۷۴) وابستگی ضریب خاموشی نمونه ها بر حسب طول موج را نشان می دهد. ضریب خاموشی نمونه های ۱ و ۲ برای طول موجهای کمتر از ۴۵۰ nm شدیداً وابسته به طول موجهای ورودی بوده اما تقریباً بعد از آن ثابت است. ضریب خاموشی نمونه های ۳ و ۴ برای طول موجهای کمتر از حدود ۶۰۰ nm به طول موج وابسته است اما برای طول موجهای بلندتر، نه تنها ثابت است بلکه همچنین کمتر از نمونه های ۱ و ۲ می باشد. خواص نوری نمونه های ۱ و ۲ یکسان بوده و تقریباً مستقل از نوع حلال می باشد.



شکل (۷۴-۴): تغییرات ضریب خاموشی نمونه ها بر حسب طول موج.

۷-۵-۴-۴ عمق نفوذ

شکل (۷۵-۴) عمق نفوذ بر حسب طول موج نور فرودی نشان داده شده است. عمق نفوذ همه نمونه ها در نزدیکی لبه جذب تقریباً صفر است زیرا نور فرودی در این طول موجها جذب می شود. عمق نفوذ نمونه های ۳ و ۴ (۱ و ۲) برای طول موجهای بلند تقریباً یکسان است ولی برای طول موجهای کمتر از تقریباً ۶۰۰ nm اختلاف قابل توجهی وجود دارد.



شکل (۷۵-۴): عمق نفوذ بر حسب طول موج نور فرودی برای همه نمونه ها.

۴-۴-۶) مطالعه نمونه ها با استفاده از میکروسکوپی نیروی مغناطیسی MF¹

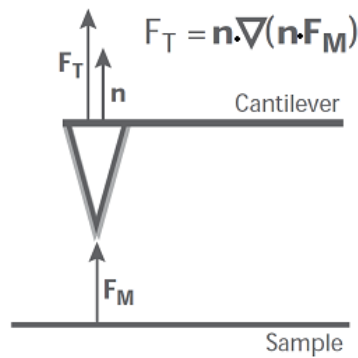
مواد مغناطیسی در غیاب میدان اعمالی حتی در زیر دمای کوری مغناطش خالص ندارند. آقای وایس^۲ [۹۰] برای توجیه این پدیده در سال ۱۹۰۷ فرضیه ای را ارائه کرد مبنی بر اینکه مواد مغناطیسی حجمی از حوزه های مغناطیسی^۳ تشکیل شده اند. هر حوزه دارای مغناطش اشباع با جهت های است که باعث می شود مغناطش کل ماده صفر شود. هر حوزه مغناطیسی با حوزه مغناطیسی مجاور توسط یک دیواره حوزه جدا می شود که دیواره حوزه با میدان مغناطیسی خارجی جابجا می شود. یکی از روشهایی که حوزه های مغناطیسی و دیواره های را تعیین می کنند روش بیتر [۹۱] است ولی امروزه هدهای مغناطیسی دستگاه MF⁴ که از مواد DMS ساخته می شوند، می توانند حوزه های مغناطیسی را مشخص کنند. برای مطالعه خواص مغناطیسی لایه در مقیاس محلی^۴ از MF⁴ استفاده می شود. داده های MF⁴ بر خلاف وسایل دیگر اندازه گیری مغناطیسی که مقدار گشتاور مغناطیسی یا مغناطش را بطور کمی بیان می کنند، برای مطالعه کیفی سطوح مواد مغناطیسی و حوزه های مغناطیسی بکار می روند. در این پروژه از دستگاه MF⁴ مدل NanoSurf Mobiles برای تصویر برداری استفاده شده است. هدف از اندازه گیریهای MF⁴ مشخص کردن توزیع همگن یا ناهمگن میدان مغناطیسی در سطح نمونه ها است. تصویر برداری MF⁴ بطور غیر تماسی انجام می شود، یعنی هد آن با سطح نمونه در تماس نیست تا اثرات سطح در سیگنال MF⁴ ظاهر شود. بنابراین هد در یک فاصله ثابت از سطح نمونه شروع به جاروب کردن نمونه می کند. شکل (۴-۷۶) طرح شماتیکی از این هد تصویر بردار را نشان می دهد.

¹ Magnetic Force Microscopy (MFM)

² Weisse

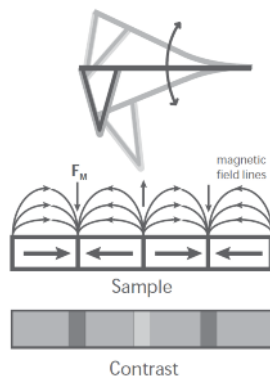
³ Domain

⁴ Local



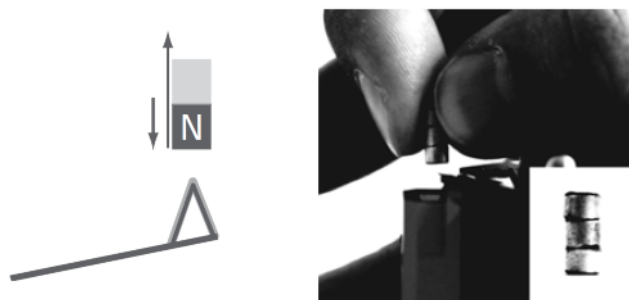
شکل (۴-۷۶): نمایش نیروها در تصویر برداری غیر تماسی MFM [۹۲].

\mathbf{n} بردار یکانی عمود بر سطح اهرم و \mathbf{F}_M نیروی مغناطیسی حاصل از سطح نمونه است. هد بر روی اهرم در سطح نمونه در هنگام جاروب کردن در جهت محور Z ارتعاش می کند که نتیجه آن تصویر MFM است. شکل (۴-۷۷) نمائی از عملکرد هد MFM است.



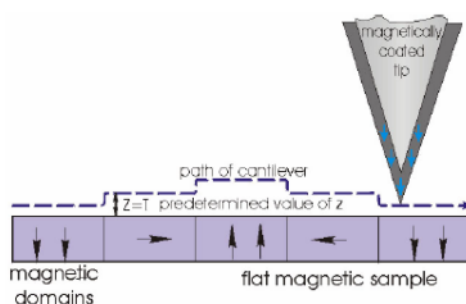
شکل (۴-۷۷): نمائی از عملکرد هد MFM [۹۲].

هد MFM خود یک ماده مغناطیسی با مغناطش مشخص است. شکل (۴-۷۸) روش مغناطیسی کردن هد MFM را نشان می دهد. امروزه این هدها از نوع مواد DMS است.



شکل (۴-۷۸): روش مغناطیسی کردن هد MFM [۹۲].

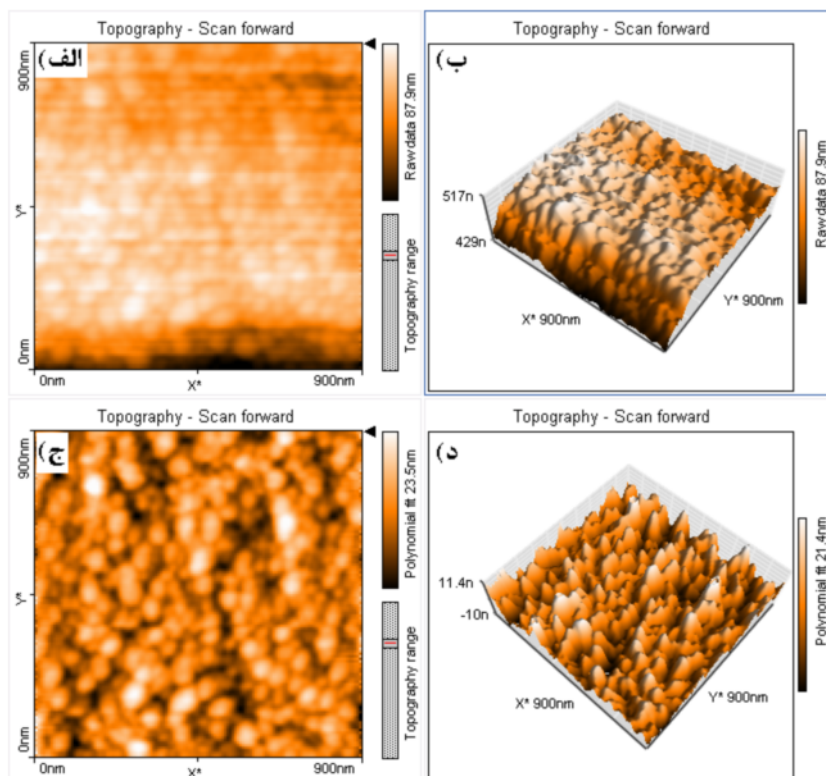
کیفیت تصویر MFM به مقدار مغناطش و ارتفاع اولیه هد MFM وابسته است. مغناطش نمونه ممکن است هم راستای مغناطش، عمود بر آن یا در هر جهت دلخواه دیگر باشد. تصاویر حاصل عموماً بسته به راستای مغناطش نمونه، رنگهای مختلفی به خود می گیرند. شکل (۴-۷۹) روش مطالعه تصویر DMS را نشان می دهد. مغناطش نمونه اگر هم جهت یا مخالف جهت مغناطش هد باشد، هد جذب یا دفع می شود که نتیجه آن ظهور رنگهایی بین سفید و سیاه می باشد.



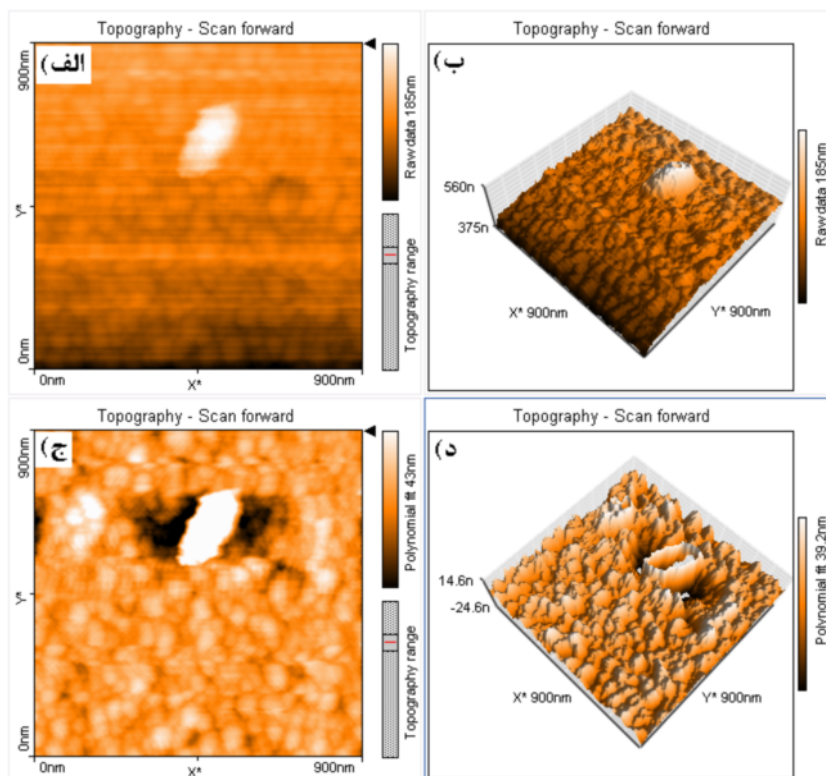
شکل (۴-۷۹): نحوه جاروب هد DMS [۹۲].

لازم به ذکر است که چون مطالعه مغناطش نمونه های اکسید روی آلیش یافته با عناصر واسطه منگنز، کبالت، آهن و نیکل در فصل بعدی ارائه خواهد گردید، در اینجا از ذکر تاریخچه و دلایل احتمالی خواص مغناطیسی اکسید روی خالص و آلیش یافته خودداری می کنیم و تنها به مطالعه یکسری از نمونه ها که با حلالهای متفاوت تهیه شده اند، می پردازیم. با این وجود تفسیر نتایج حاصل از MFM تا حدودی پیچیده است و به دقت زیادی لازم دارد.

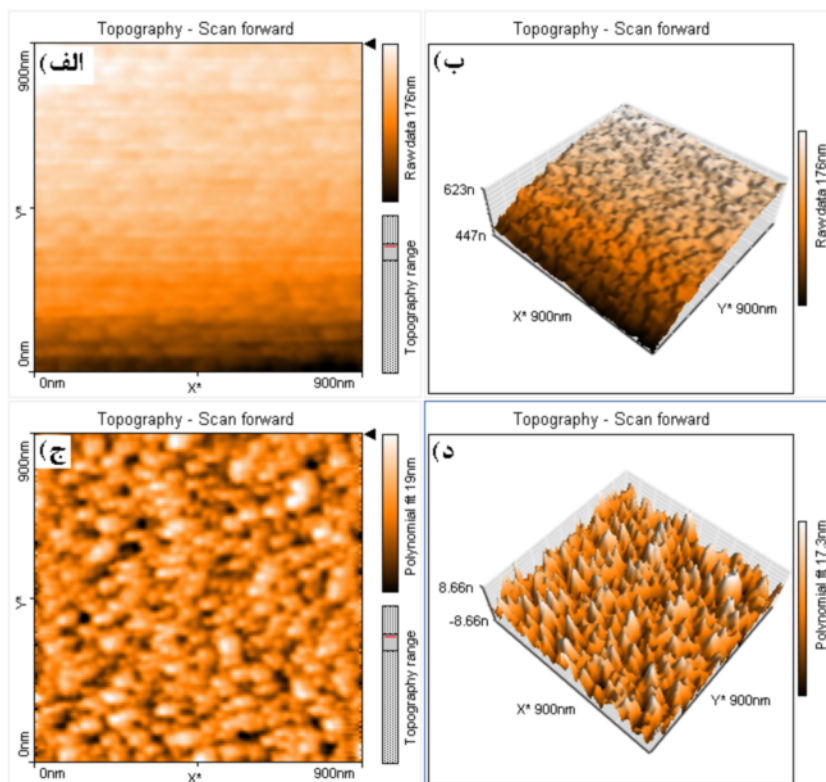
شکلهای (۴-۸۰)، (۴-۸۱)، (۴-۸۲) و (۴-۸۳) تصاویر MFM گرفته شده به ترتیب از نمونه های با حلال ۱، ۲، ۳ و ۴ هستند. تصاویر الف) و ب) هر شکل مربوط به داده های خام دو بعدی و سه بعدی می باشند و تصاویر ج) و د) حاصل از انطباق داده های شکل الف) و ب) با استفاده از چند جمله ایها هستند.



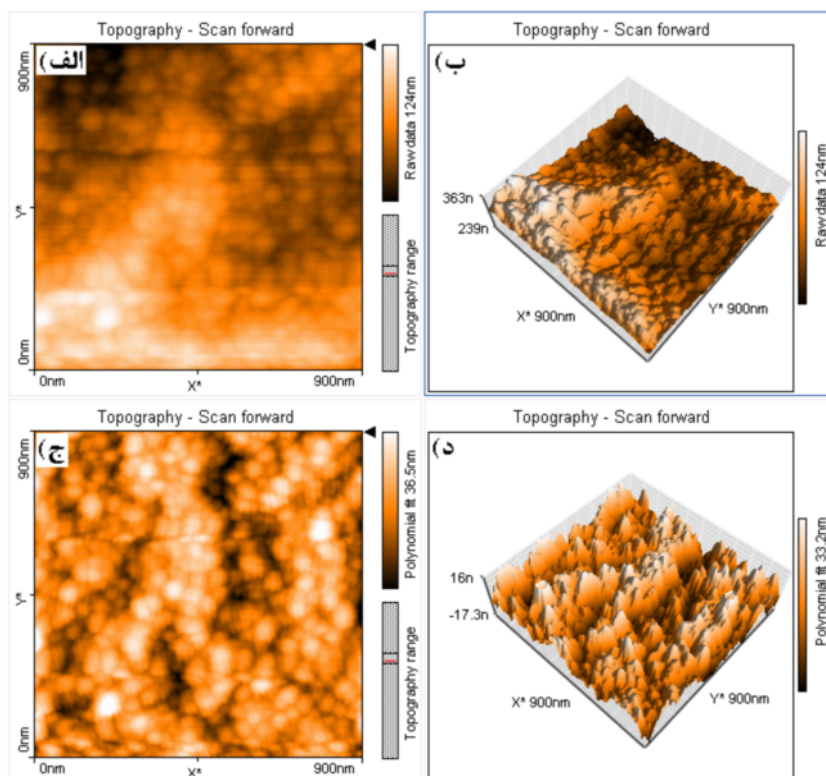
شکل (۴-۸۰): تصویر MFM نمونه بازپخت شده حلال اول. شکل‌های (الف) و (ج) { (ب) و (د) } به ترتیب تصویر دوبعدی { سه بعدی } نمونه با داده های خام و برازش شده با رابطه چند جمله ایها است.



شکل (۴-۸۱): تصویر MFM نمونه بازپخت شده حلال دوم. شکل‌های (الف) و (ج) { (ب) و (د) } به ترتیب تصویر دوبعدی { سه بعدی } نمونه با داده های خام و برازش شده با رابطه چند جمله ایها است.



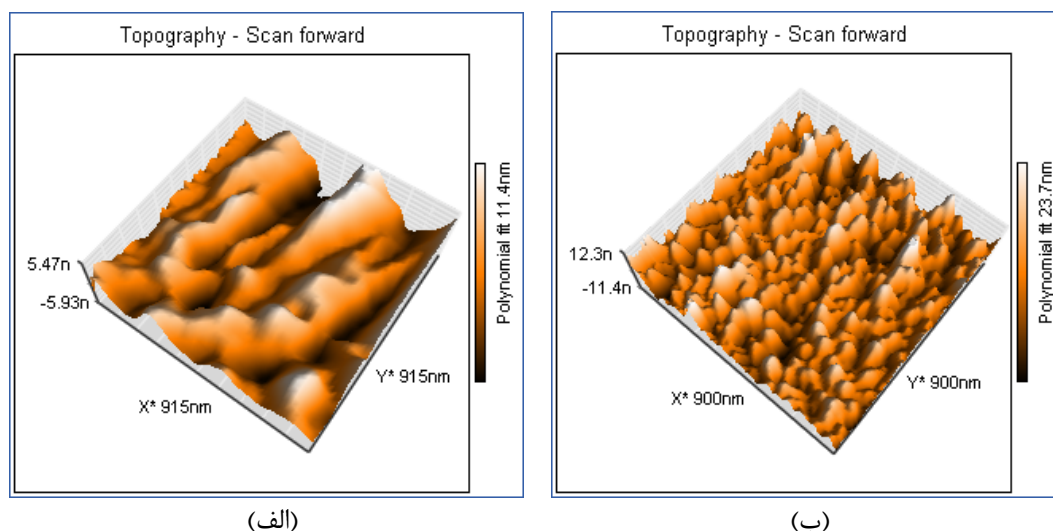
شکل (۴-۸۲): تصویر MFM نمونه بازپخت شده حلال سوم. شکل‌های (الف) و (ج) و (ب) و (د) به ترتیب تصویر دوبعدی {سه بعدی} نمونه با داده های خام و برازش شده با رابطه چند جمله ایها است.



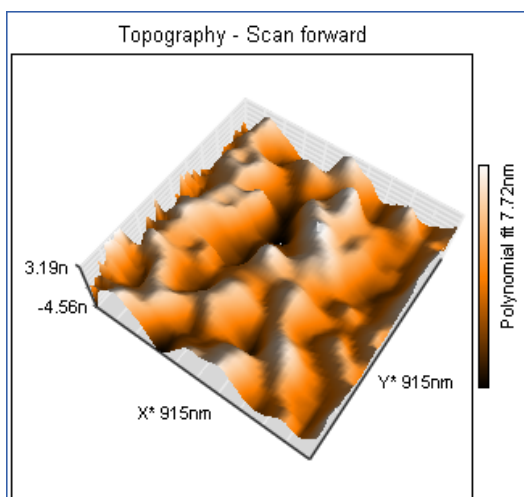
شکل (۴-۸۳): تصویر MFM نمونه بازپخت شده حلال چهارم. شکل‌های (الف) و (ج) و (ب) و (د) به ترتیب تصویر دوبعدی {سه بعدی} نمونه با داده های خام و برازش شده با رابطه چند جمله ایها است.

در حالت کلی یک لایه فرو مغناطیسی که از حوزه های مغناطیسی بزرگی تشکیل شده است و دارای مغناطش قابل ملاحظه ای باشد، مانند صفحات ضبط مغناطیسی در حافظه ها، دارای تصاویر MFM واضحی بفرم نوار - نوار می باشند که جدائی نوارها نشانگر دیواره حوزه ها است. تصاویر حاصل از حلالهای متفاوت که در دمای اتاق بدست آورده است تقریباً شبیه هم بوده و تفاوت کمی را نشان می دهند. برای اینکه مشخص شود که این دانه های مشاهده شده وابسته به خاصیت مغناطیسی ماده است، تصاویر AFM و MFM هر نمونه را جهت مقایسه در شکل‌های (۴-۸۴)، (۴-۸۵)، (۴-۸۶) و (۴-۸۷) نشان داده ایم. از مقایسه این شکلها می توان نتیجه گرفت که تصاویر MFM با تصاویر AFM تمایز معناداری دارند. همچنین مقایسه این شکلها نشان می دهد که مورفولوژی نیروی مغناطیسی در دمای اتاق ناشی از اثر سطح نیست و از خواص مغناطیسی لایه ناشی شده است. از شکل‌های MFM دیده می شود که در نمونه ها خوشه های مغناطیسی ناخالصی وجود ندارد زیرا در این صورت اثر قوی بر حوزه های مغناطیسی نمونه ها می گذاشت و نمونه ها دارای تصاویری با تمایز قابل توجه ای می شدند.

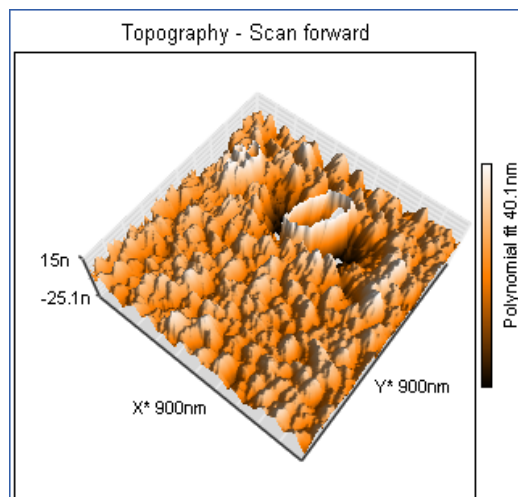
با توجه به تصاویر MFM می توان گفت نمونه های آرایش یافته با منگنز خاصیت پارامغناطیسی دارند. برای بیان خاصیت مغناطیسی لایه ها با جزئیات بیشتر نیاز به مطالعه زیاد و همچنین روشهای دیگری برای آزمایش می باشد که در فصل بعدی به آن می پردازیم.



شکل(۴-۸۴): مورفولوژی سطح نمونه بازپخت شده برای حلال اول. الف: AFM، ب: MFM

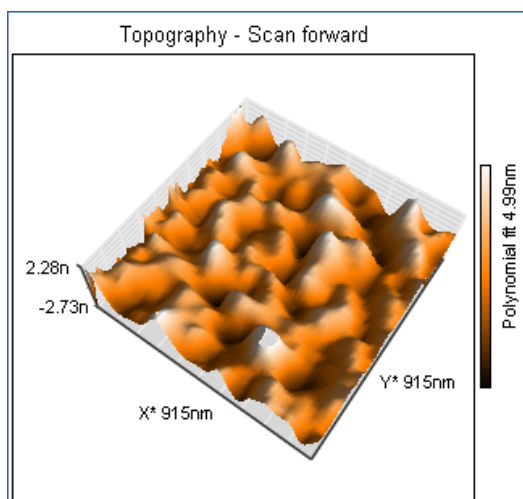


(الف)

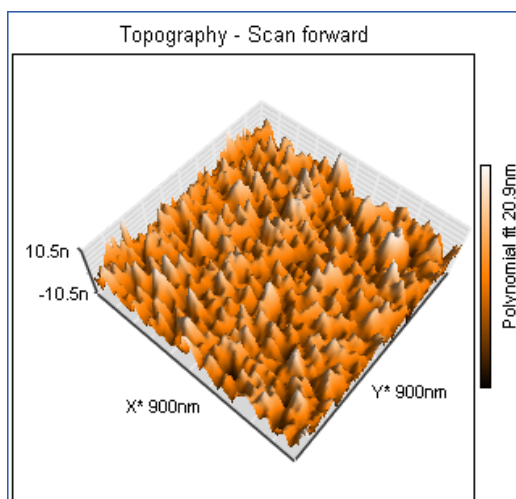


(ب)

شکل (۴-۸۵): مرفولوژی سطح نمونه بازپخت شده برای حلال دوم. الف: AFM، ب: MFM

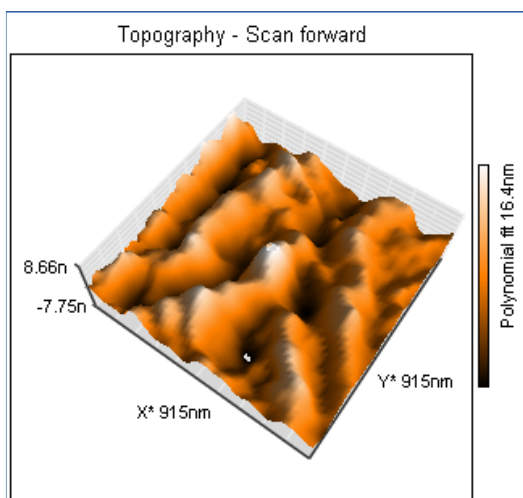


(الف)

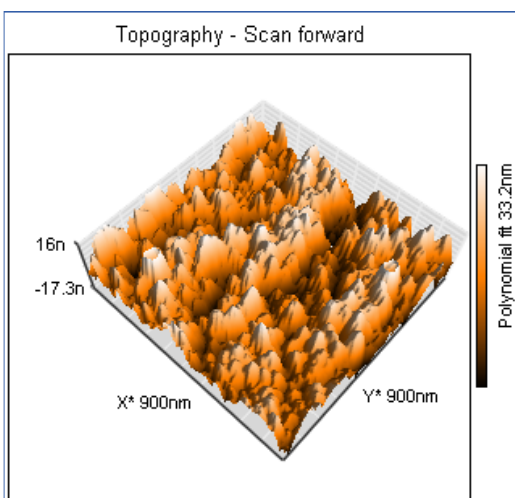


(ب)

شکل (۴-۸۶): مرفولوژی سطح نمونه بازپخت شده برای حلال سوم. الف: AFM، ب: MFM



(الف)



(ب)

شکل (۴-۸۷): مرفولوژی سطح نمونه بازپخت شده برای حلال چهارم. الف: AFM، ب: MFM

۴-۴-۷) نتیجه گیری

در این کار با استفاده از روش سل-ژل و با انتخاب حلالهای مختلف، ۲- میتوکسی اتانول، ۲- ایزوپروپانول، متانول و ۱- بوتان، لایه‌های نازک $Zn_{0.98}Mn_{0.02}O$ رشد داده شدند. خواص ساختاری و نوری این نمونه‌ها توسط اشعه x و طیف تراگیسیل اندازه گیری شد. ثوابت نوری با استفاده از روابط پوما و برازش آن با روابط کوشی در لایه های نازک محاسبه گردید. این نتایج نشان می دهد که نمونه تهبیه شده با حلال ۳، دارای درصد تراگیسیل بالاتری در همه بازه های طول موج می باشد و حداکثر طیف تراگیسیل آن در حدود ۹۰ درصد است. طیف گسیلی نمونه ها حدود ده درصد به نوع حلال وابسته است که ممکن است بدلیل مواد آلی موجود در حلالها و یا تفاوت در ناصافی سطوح باشد. نتایج محاسبه گاف نواری نشان می دهد که نمونه آماده شده با حلال ۳ دارای بزرگترین گاف انرژی (۳/۲۶۴۸) و کوچکترین اندازه دانه (۱۹/۹۰۹۳) است. حلال ۴ دارای کوچکترین گاف انرژی (۳/۲۱۹۴) و بزرگترین اندازه دانه (۵۱/۳۳۹۶) است. تغییرات گاف انرژی ممکن است به دلیل اثر حبس کوانتومی ناشی از اندازه دانه ها باشد. تصاویر AFM ثبت شده نشان می دهد که نمونه های دارای اندازه دانه کوچکتر زبری کمتری دارند. مطالعه MFM نمونه ها نشان می دهد که نمونه ها در دمای اتاق خاصیت فرومغناطیسی ندارند و در حالت پارامغناطیسی هستند.

فصل پنجم

اثر آرایش عناصر واسطه بر روی خواص فیزیکی اکسید روی

۵-۱) مقدمه

با توجه به ویژگیهای فیزیکی منحصر به فرد اکسید روی که هم به ساختار آن (ساختار حجمی، لایه های نازک، ساختار ریز کوانتومی (نقاط کوانتومی، سیمهای کوانتومی)) و هم به روشهای رشد بلوری وابسته است، بسیار مورد توجه دانشمندان قرار گرفته است. ویژگیهای فیزیکی آن با آرایش دادن، تغییر شرایط ترمودینامیکی (فشار، گرما)، اعمال میدان (الکتریکی، مغناطیسی یا الکترومغناطیسی) و غیره تغییر می کند. تنوع تغییر خواص فیزیکی اکسید روی باعث تنوع کاربردهای آن شده است. در این کار، با استفاده از روش سل-ژل لایه های نازکی از اکسید روی که با عناصر واسطه آلاییده شده اند، بر روی زیر لایه شیشه ای رشد داده شده اند و سپس ویژگیهای ساختاری و نوری و مغناطیسی آنها بررسی شده است. برای داشتن شرایط مقایسه، اکسید روی خالص نیز با شرایط یکسان رشد داده ایم.

مواد مصرفی برای روش سل-ژل عبارت است از: استات روی $(Zn(CH_3COO)_2 \cdot 2H_2O)$ برای منبع روی، استات کبالت $(Co(CH_3COO)_2 \cdot 4H_2O)$ برای منبع کبالت، کلرید آهن $(FeCl_2 \cdot 2H_2O)$ برای منبع آهن، استات منگنز $(Mn(CH_3COO)_2 \cdot 4H_2O)$ برای منبع منگنز، کلرید نیکل $(NiCl_2 \cdot 2H_2O)$ برای منبع نیکل، مایع ۲-میتا اکسیداتانول (DME) $(C_2H_8O_2)$ برای حلال، مایع مونو اتانول آمین (MEA) (C_2H_7NO) برای پایداری محلول. تمام مواد شیمیایی مصرفی با بهترین درصد خلوص محصول شرکت مرک و آلدریج^۱ می باشند.

برای تهیه لایه نازک ZnO:TM به روش سل-ژل، ابتدا در دمای اتاق، استات روی و ترکیبات عناصر واسطه را با نرخ اتمی $TM/Zn = 3\%$ ، در محلول DME و MEA که $[MEA]/[Zn^{2+}] = 1$ است، حل می شوند. محلولهای نهائی با همزن مغناطیسی در دمای $70^\circ C$ به مدت یک ساعت همزده می شوند، که در نهایت محلولهای یکنواخت و شفاف حاصل می گردند. در دمای اتاق و بعد از گذشت

¹ Aldrich

زمان ۲۴ ساعت، به روش غوطه ورسازی عمل لایه گذاری صورت می گیرد. زیر لایه های شیشه ای که از قبل با الکل و استون در آلتراسونیک تمیز شده اند به روش غوطه ور سازی با سرعت $8/5 \text{ cm/sec}$ لایه نشانی می شوند و سپس در کوره تا دمای خشک سازی 200°C خشک می شوند. عمل لایه نشانی هفت بار تکرار می شود تا ضخامت مطلوب حاصل گردد. نهایتاً لایه های تهیه شده برای عملیات بازپخت نهائی در دمای 500°C در کوره در هوای آزاد به مدت دو ساعت حرارت داده می شوند. سپس لایه ها برای انجام آزمایشهای فیزیکی تا دمای اتاق به طور طبیعی سرد می شوند لایه نازک اکسید روی خالص به همین روش و با همین شرایط جهت مقایسه رشد داده شده است.

برای بررسی ساختار و فاز بلوری لایه های نازک از دستگاه XRD مدل Bruker AXS دارای خط تابشی $\text{CuK}\alpha$ با طول موج $\lambda=1/5406 \text{ \AA}$ استفاده شد. طیف تراگسیل فیلم ها با استفاده از دستگاه طیف سنج مدل Cary 100 شرکت واریان بدست آمده است. ثابتهای اپتیکی لایه ها با استفاده از فلوجارت روش کمینه کردن غیر مقید نقاط و برازش آن با روابط کوشی محاسبه شده است. مورفولوژی سطح لایه ها با استفاده از دستگاه AFM مدل nanosurf مورد مطالعه قرار گرفت و همچنین برای بررسی خواص مغناطیسی لایه ها، حلقه پسماند در دمای اتاق اندازه گیری گردید. ضخامت نمونه های مورد مطالعه در این فصل با دستگاه AFM اندازه گیری شد که در حدود 300 nm بدست آمد. لازم به ذکر است که در ابتدا نتایج بدست آمده برای هر لایه ارائه و سپس به تفسیر و مقایسه نتایج خواهیم پرداخت.

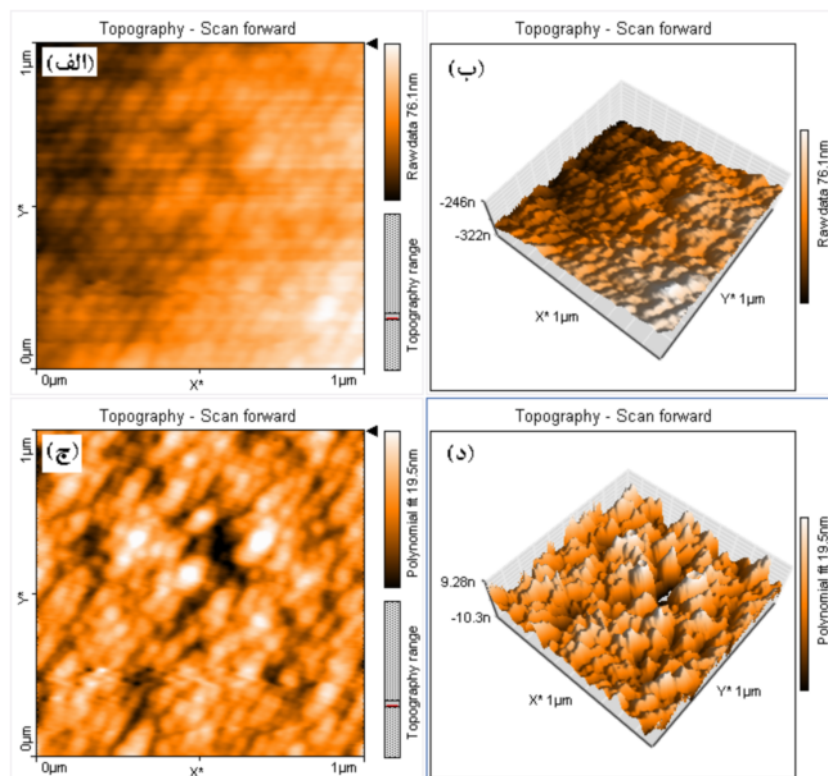
۲-۵ ویژگیهای اکسید روی خالص

۱-۲-۵ ساختارسنجی

۱-۱-۲-۵ مورفولوژی سطح

شکل (۱-۵) مورفولوژی سطح نمونه را نشان می دهد که از دستگاه AFM اندازه گیری شده است. شکل‌های (الف) {ب} و (ج) {د} نمایش توپوگرافی دو بعدی {سه بعدی} سطح به ترتیب برای

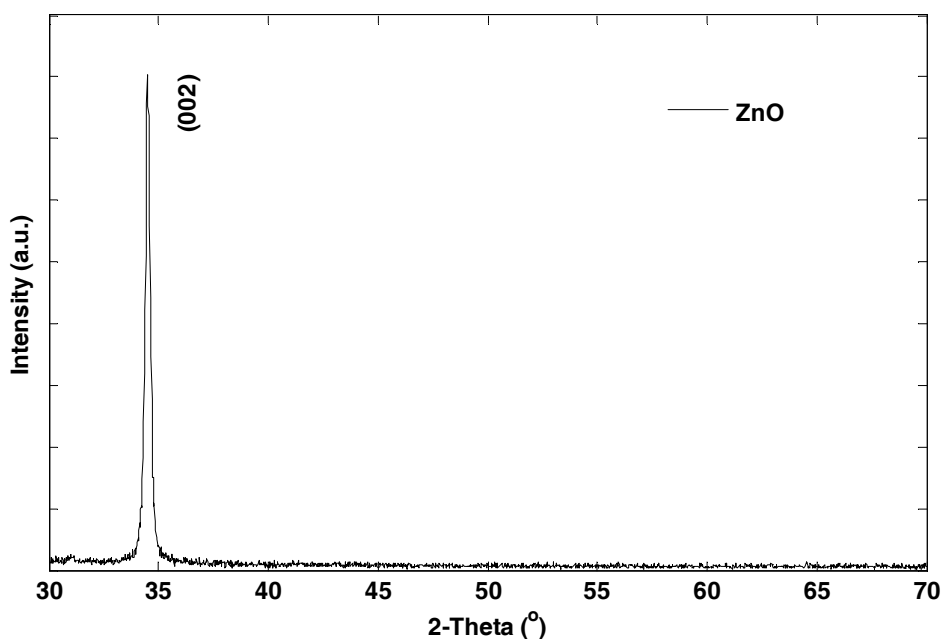
داده های اولیه و برازش آن با چند جمله ای است. مقدار جذر میانگین مربع زبری سطح محاسبه شده برابر $3/5873 \text{ nm}$ می باشد از این رو نمونه دارای سطح صافی است.



شکل (۱-۵): مورفولوژی سطح نمونه. (الف) {ب} و {ج} {د} نمایش توپوگرافی دو بعدی {سه بعدی} سطح به ترتیب برای داده های اولیه (تصاویر بالا) و برازش آن با چند جمله ای (تصاویر پایین).

۲-۱-۲-۵ طیف XRD

شکل (۲-۵) طیف XRD اکسید روی خالص را در دمای اتاق برای دمای بازپخت 500°C نشان می دهد. طیف جهت رشد (۰۰۲) محور Z را نشان می دهد. جهت های دیگر ساختار حجمی آن در طیف دیده نمی شود و احتمالاً حالت آمورفی غالب است. ثابت های شبکه در جهت های a و c به ترتیب برابر $3/249$ و $5/205$ برحسب آنگستروم است. اندازه دانه های محاسبه شده با استفاده از رابطه شرر برابر $33/2596 \text{ nm}$ است.

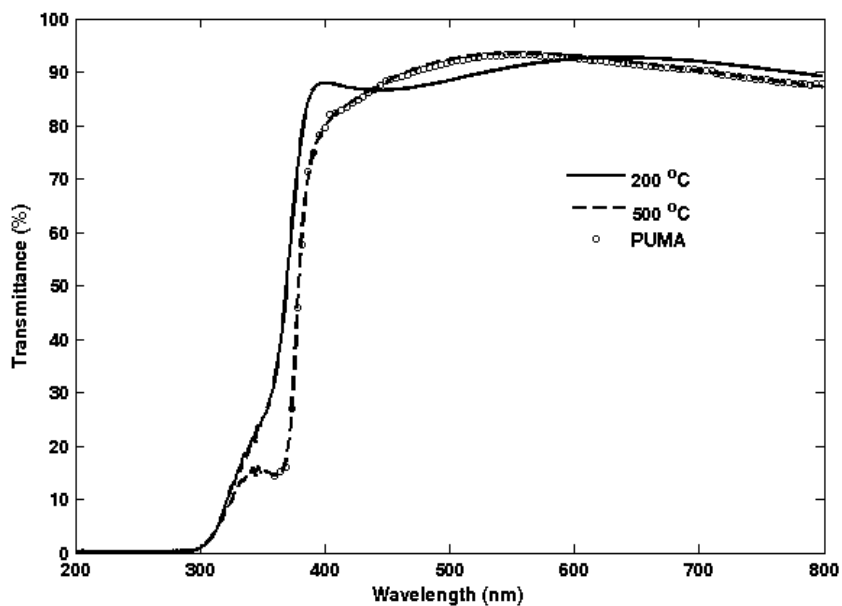


شکل (۲-۵): طیف XRD اکسید روی خالص بازپخت شده در دمای اتاق.

۲-۲-۵) خواص نوری

۱-۲-۲-۵) طیف تراگیسیل

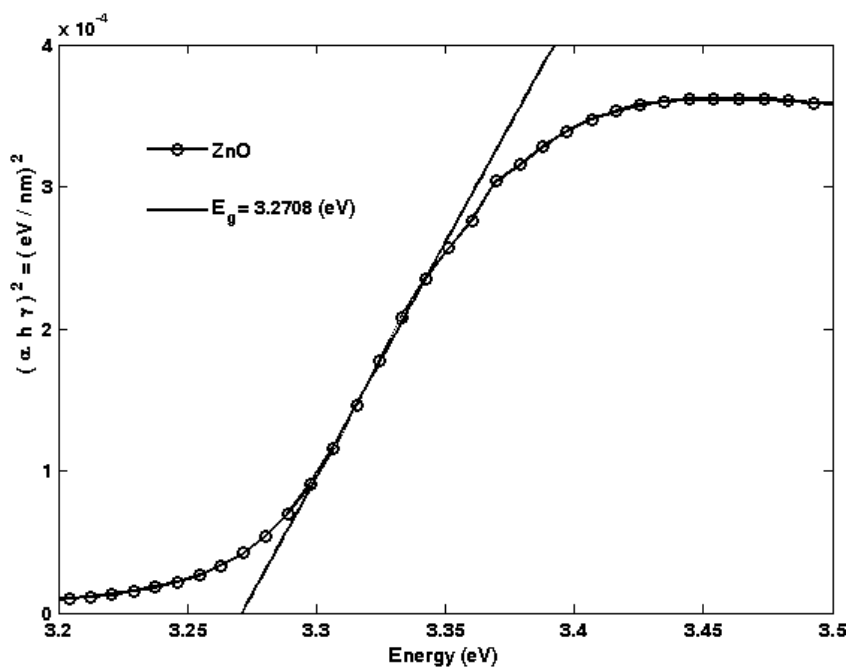
شکل (۳-۵) طیف تراگیسیل نمونه را در دمای اتاق برای دمای خشک سازی 200°C و بازپخت 500°C را نشان می دهد. طیفها در ناحیه مرئی شفافیتی بین ۸۰ تا ۹۰ درصد دارند و هرچه به لبه جذب نزدیکتر می شوند کاهش چشمگیری را نشان می دهند تا به حد اقل خود برسند. بعلت حضور مواد آلی در دمای خشک سازی، ماده شکل ژلی خود را از دست نداده و سطوح لایه ها موازی هستند از اینرو طیف بعلت تداخل امواج، الگوی نوسانی را نشان می دهد. با تبخیر مواد آلی در دمای بازپخت، طیف نمونه در طول موجهای بالا اندکی کاهش یافته و بعلت عدم سطوح موازی الگوی نوسانی دیگر مشاهده نمی شود. داده های تجربی توسط روش پوما برازش شده که توافق خوبی با آن دارند.



شکل (۳-۵): طیف تراگسیل نمونه در دمای اتاق برای دمای خشک سازی و بازپخت.

۲-۲-۲-۵ گاف نواری

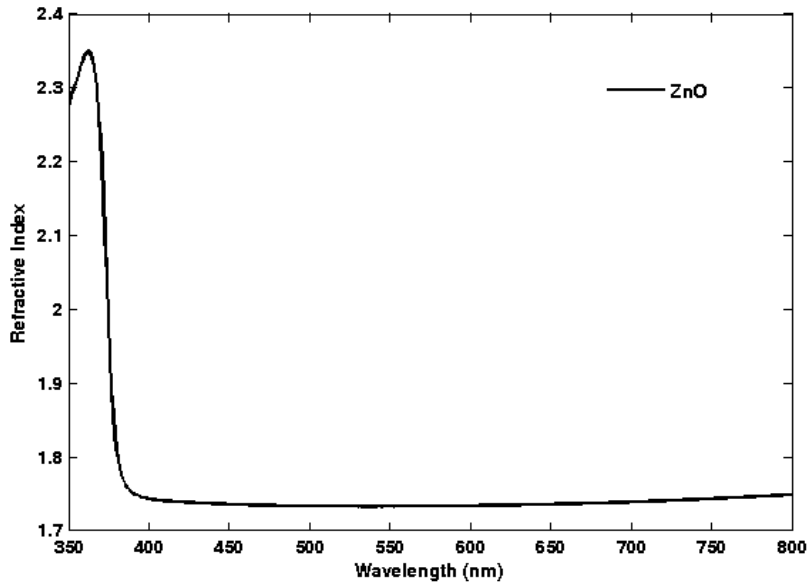
گاف نواری اکسید روی مستقیم است که از روی شیب منحنی قابل تشخیص می باشد. شکل (۴-۵) برونمایی قسمت خطی منحنی $(\alpha h\nu)^2$ بر حسب انرژی را نشان می دهد. مقدار محاسبه شده انرژی گاف در حدود 3.271 eV است.



شکل (۴-۵): منحنی $(\alpha h\nu)^2$ بر حسب انرژی فوتون فرودی برای نمونه بازپخت شده ZnO.

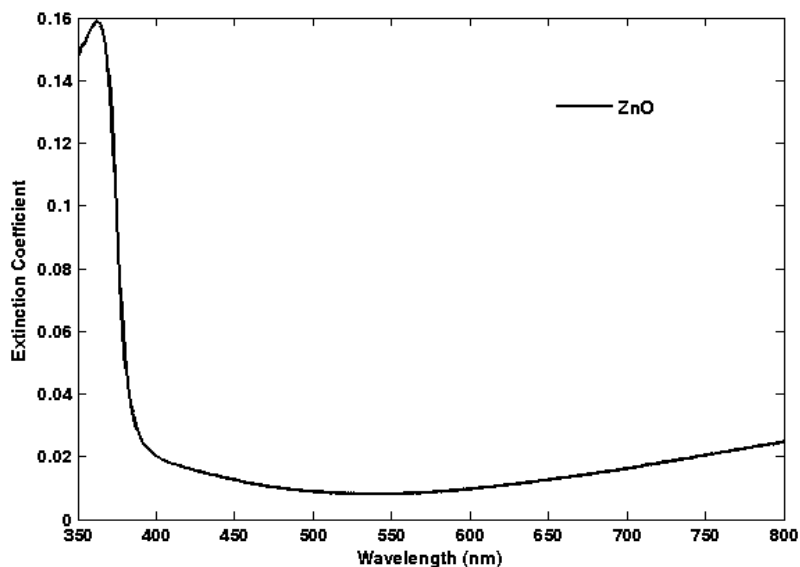
۵-۲-۳) ثوابت نوری

شکل های (۵-۵) و (۶-۵) به ترتیب ضریب شکست و ضریب خاموشی نمونه بازپخت شده در دمای اتاق را نشان می دهند. ضریب شکست در ناحیه لبه جذب وابستگی قوی به طول موج دارد ولی در طول موجهای بالا تقریباً ثابت است.



شکل (۵-۵) ضریب شکست ZnO بازپخت شده در دمای اتاق.

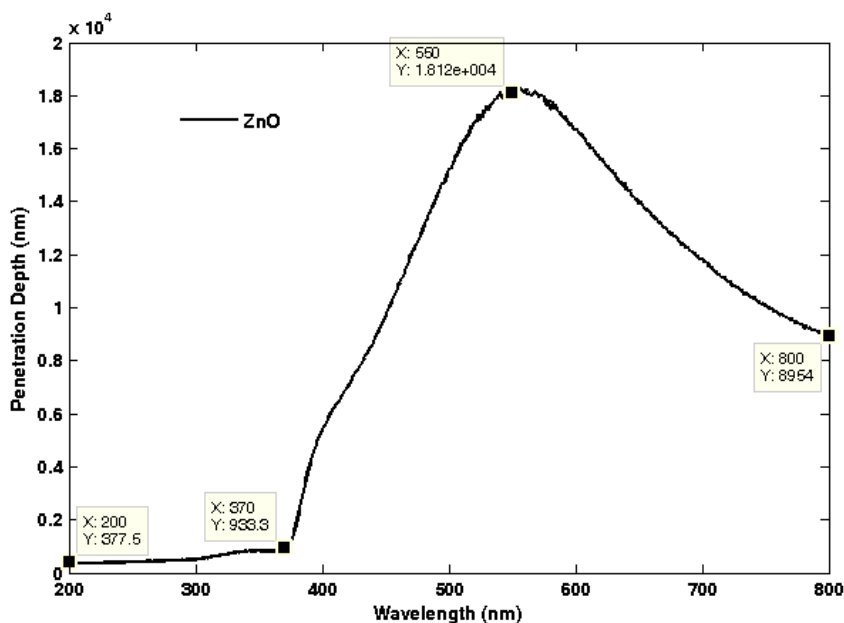
ضریب خاموشی رفتاری تا حدود متفاوت را نشان می دهد. اگرچه در ناحیه لبه جذب شدیداً کاهش می یابد ولی بعد از ۴۰۰ نانومتر ابتدا کمی کاهش و سپس به تدریج افزایش می یابد.



شکل (۶-۵): ضریب خاموشی لایه بازپخت شده در دمای اتاق.

۵-۲-۴) عمق نفوذ

شکل (۷-۵) عمق نفوذ نمونه های بازپخت شده بین طول موجهای ۲۰۰ تا ۸۰۰ نانومتر را در دمای اتاق نشان می دهد. تغییرات آن بین ۳۷۷ تا 1.8×10^3 نانومتر است. در طول موجهای کوتاه تا لبه جذب عمق نفوذ کمترین مقدار خود را دارد ولی در طول موجهای بالا افزایش می یابد. این افزایش تا طول موج ۵۵۰ نانومتر تقریباً به طور خطی است ولی بعد از آن تقریباً بطور خطی کاهش می یابد.



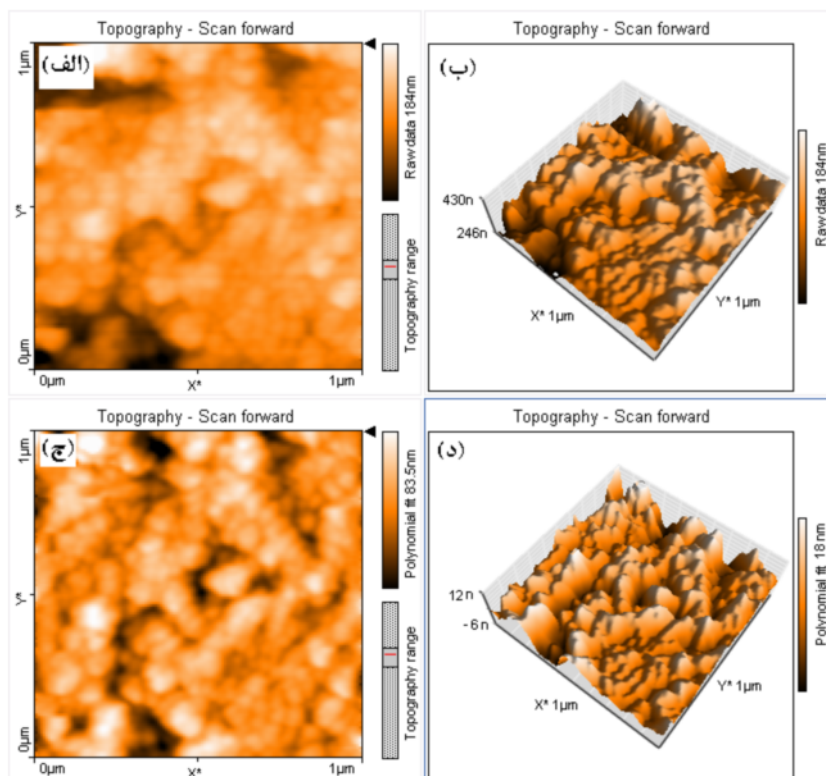
شکل (۷-۵): عمق نفوذ ZnO بازپخت شده در دمای اتاق.

۵-۳) اکسید روی آلائیده با منگنز

۵-۳-۱) ساختار سنجی

۵-۳-۱-۱) مورفولوژی سطح

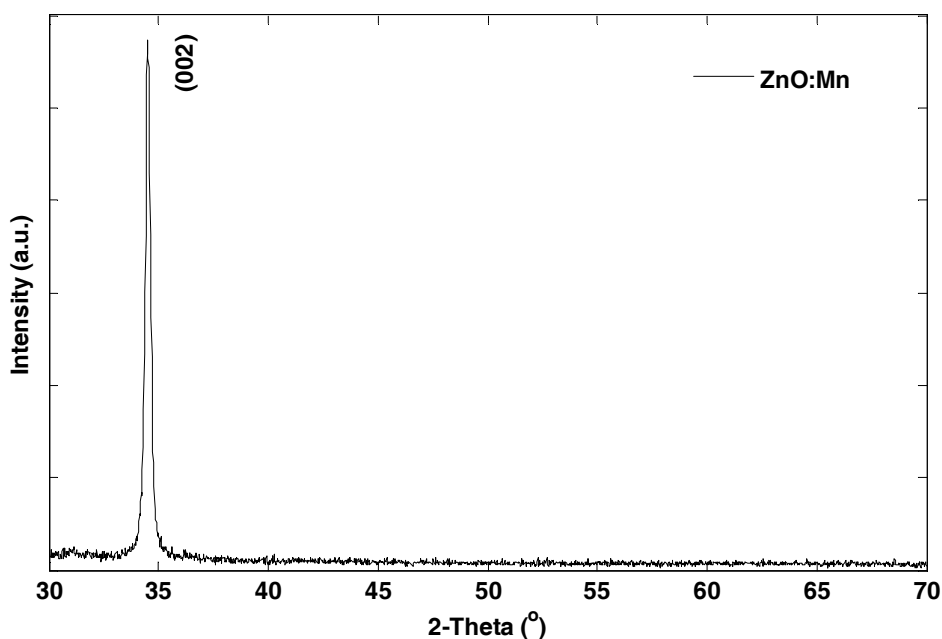
شکل (۸-۵) مورفولوژی سطح نمونه را نشان می دهد. شکل‌های (الف) {ب} و (ج) {د} نمایش توپوگرافی دو بعدی {سه بعدی} سطح به ترتیب برای داده های اولیه بدون برازشی و برازش آن با چند جمله ایها است. مقدار محاسبه شده جذر میانگین مربع زبری سطح برابر $6/5873$ nm می باشد. از این رو نمونه تقریباً دارای سطح صافی است.



شکل (۵-۸): مورفولوژی سطح نمونه. (الف) { (ب) } و (ج) { (د) } نمایش توپوگرافی دو بعدی { سه بعدی } سطح به ترتیب برای داده های اولیه (تصاویر بالا) و برازش شده با چند جمله ای (تصاویر پائین).

۵-۳-۱-۲) طیف XRD

طیف XRD اکسید روی آلاییده با منگنز در دمای اتاق برای دمای بازپخت در شکل (۵-۹) نشان داده شده است. طیف هیچ فاز ثانویه مربوط به اکسید منگنز و یا خوشه های مربوطه را نشان نمی دهد. جهت رشد بلور همانند نمونه بدون آرایش در راستای (۰۰۲) است. ثابتهای شبکه در جهتهای a و c به ترتیب برابر ۳/۲۴۹ و ۵/۲۰۹ بر حسب آنگستروم است که ناشی از اندازه گیریهای طیف نگاری می باشد. اندازه دانه های محاسبه شده با استفاده از رابطه شرر برابر ۳۶/۸۹۳۲ nm است.

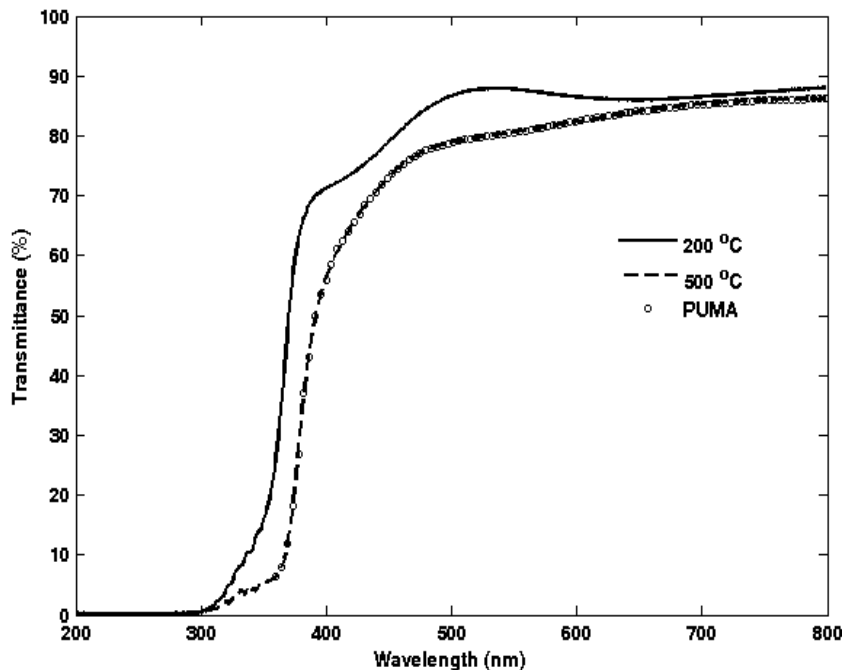


شکل (۵-۹): طیف XRD نمونه بازپخت شده در دمای اتاق.

۵-۳-۲) خواص نوری

۵-۳-۱) طیف تراگسیل

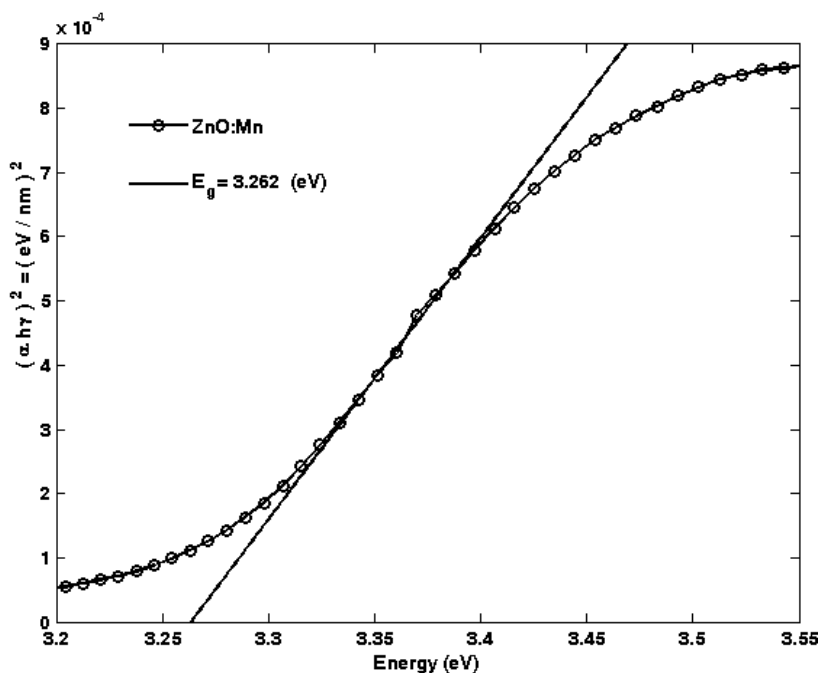
شکل (۵-۱۰) طیف تراگسیل نمونه را در دمای خشک سازی و باز پخت نشان می دهد. تغییرات طیف تراگسیل در ناحیه غیر جذب بین ۷۰ تا ۹۰ درصد است ولی در ناحیه جذب کاهش قابل توجه دارد. طیف تراگسیل در دمای خشک سازی الگوی نوسانی را نشان می دهد ولی چنین الگوی در طیف بازپخت شده دیده نمی شود. طیف تراگسیل در دمای باز پخت اندکی از دمای خشک سازی کمتر است که نشان دهنده چگالش نمونه است. داده های حاصل از محاسبات پوما توافق خوبی با طیف تراگسیل در دمای باز پخت دارد.



شکل (۵-۱۰): طیف تراگسیل در دمای اتاق برای نمونه در دمای خشک سازی و باز پخت.

۵-۳-۲-۲) گاف نواری

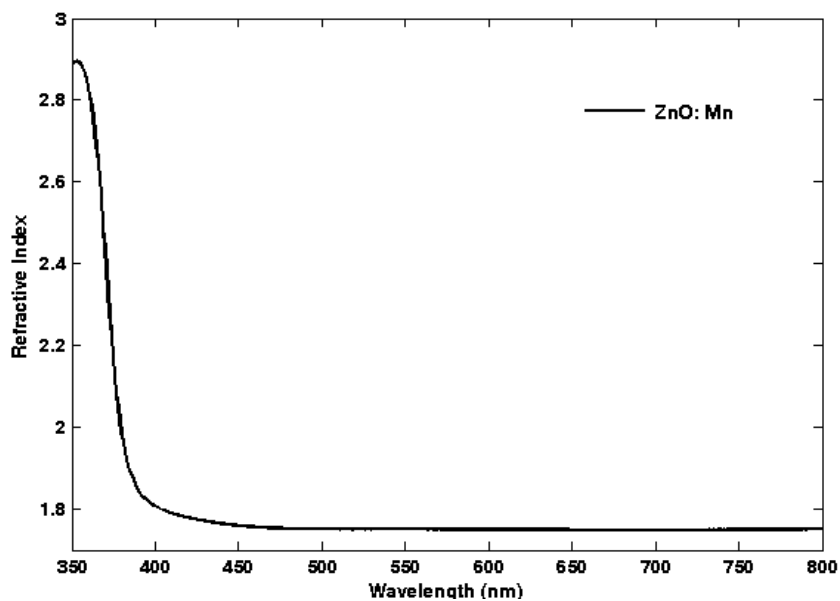
گاف نواری نمونه ZnO:Mn در شکل (۵-۱۱) نشان داده شده است. مقدار محاسبه شده انرژی گاف همانند روش قبل بوده و برابر با 3.262 eV است. آرایش منگنز نوع گاف نواری مستقیم اکسید روی را تغییر نمی دهد.



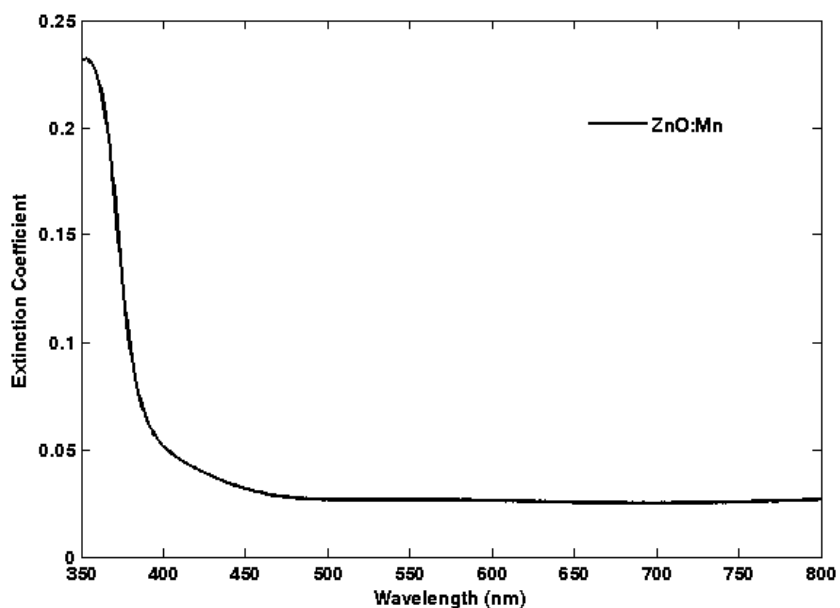
شکل (۵-۱۱): منحنی $(ah\nu)^2$ بر حسب انرژی فوتون فرودی برای نمونه بازپخت شده ZnO:Mn

۳-۲-۳-۵ ثوابت نوری

ضریب شکست و ضریب خاموشی نمونه بازپخت شده در دمای اتاق بر حسب طول موج در شکل‌های (۱۲-۵) و (۱۳-۵) نشان داده شده‌اند. بیشترین تغییرات در لبه جذب است که نشان دهنده برهمکنش قوی بین الکترون‌های ماده با نور فرودی است. ضریب شکست و ضریب خاموشی در طول موج‌های ناحیه شفاف تغییرات قابل ملاحظه‌ای را نشان نمی‌دهند.



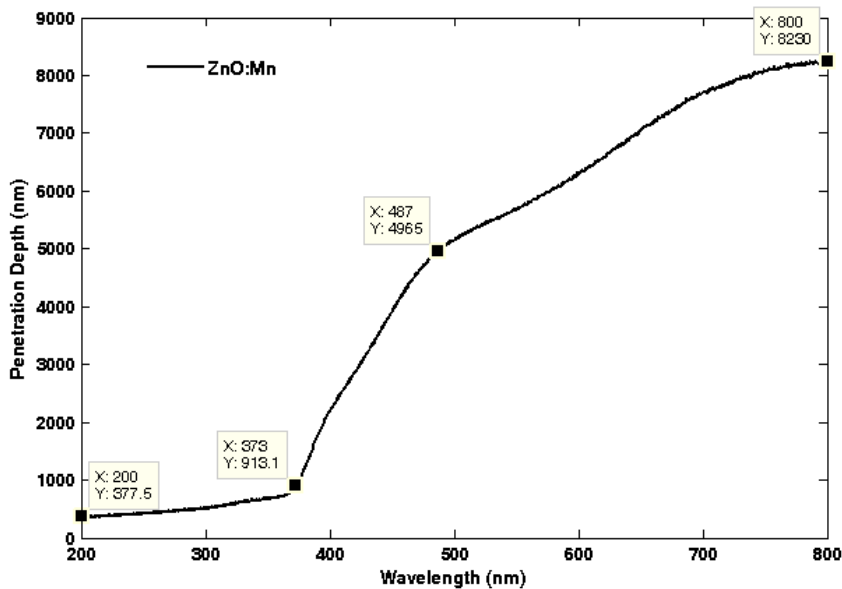
شکل (۱۲-۵): ضریب شکست نمونه بازپخت شده ZnO:Mn در دمای اتاق.



شکل (۱۳-۵): ضریب خاموشی نمونه بازپخت شده ZnO:Mn در دمای اتاق.

۵-۳-۲-۴) عمق نفوذ

شکل (۵-۱۴) عمق نفوذ نور فرودی در نمونه بازپخت شده را در بازه طول موج ۲۰۰ تا ۸۰۰ نشان می دهد. تغییرات آن بین ۳۷۷ تا ۸۲۳۰ نانومتر است. در طول موجهای کوتاه تا لبه جذب عمق نفوذ کمترین مقدار خود را بعلاوه جذب بالا دارا می باشد ولی در طول موجهای بالا افزایش می یابد. این افزایش تا طول موج ۴۸۷ نانومتر به طور خطی با شیب بیشتری نسبت به طول موجهای بالاتر صورت می گیرد.



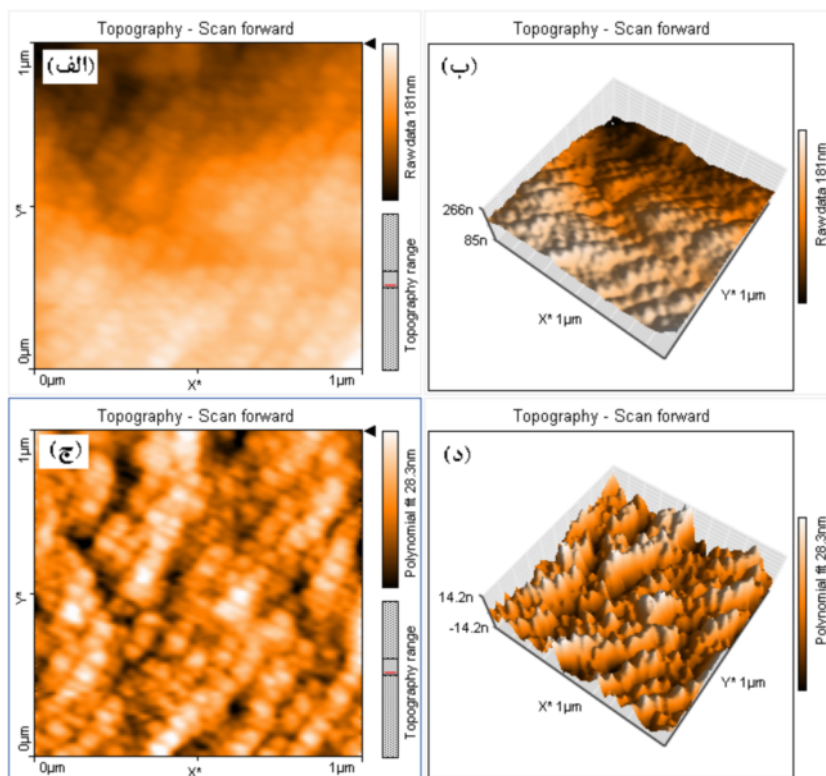
شکل (۵-۱۴): عمق نفوذ نمونه بازپخت شده ZnO:Mn در دمای اتاق.

۵-۴) اکسید روی آلائیده با آهن

۵-۴-۱) ساختارسنجی

۵-۴-۱-۱) مورفولوژی سطح

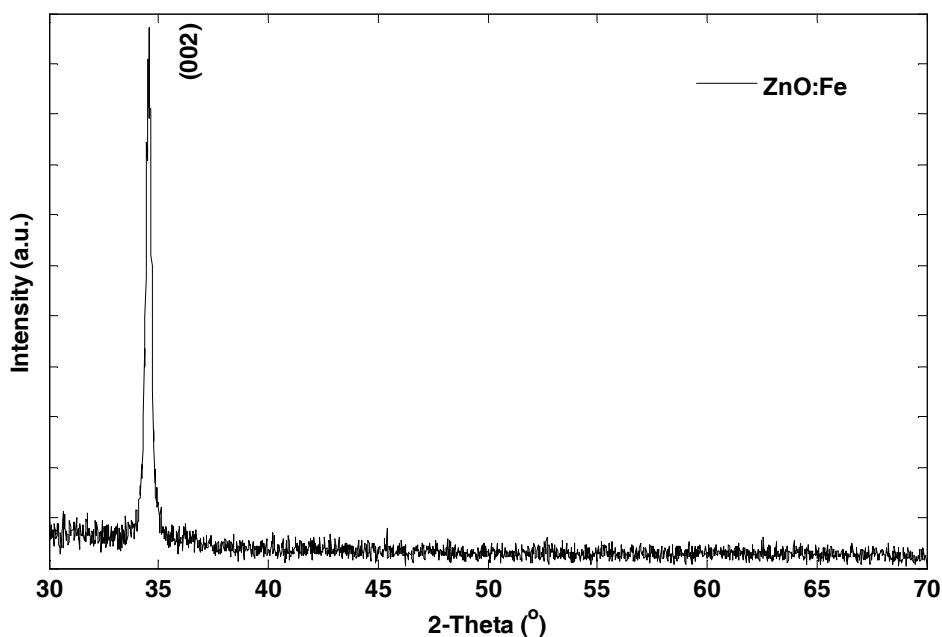
شکل (۵-۱۵) مورفولوژی سطح نمونه ZnO:Fe را نشان می دهد. شکل‌های (الف) {ب} و (ج) {د} نمایش توپوگرافی دو بعدی {سه بعدی} سطح به ترتیب برای داده های اولیه و برازش شده آن با چند جمله ایها است. مقدار جذر میانگین مربع زبری سطح محاسبه شده برابر $5/3218$ nm می باشد از این رو نمونه دارای سطح نسبتاً صاف می باشد.



شکل (۵-۱۵): مورفولوژی سطح نمونه. (الف) {ب} و {ج} {د} نمایش توپوگرافی دو بعدی {سه بعدی} سطح به ترتیب برای داده های اولیه (تصاویر بالا) و برازش شده با چند جمله ای (تصاویر پائین).

۵-۴-۱-۲) طیف XRD

طیف XRD نمونه در دمای اتاق در شکل (۵-۱۶) نشان داده شده است. نمودار هیچ فاز ثانویه مربوط به اکسید آهن یا خوشه های آن را نشان نمی دهد. جهت ارجح رشد (۰۰۲) در راستای محور Z است. جهت های دیگر شکل آمورفی دارند. ثابت های شبکه در جهت های a و c به ترتیب برابر $3/249$ و $5/207$ بر حسب آنگستروم است. اندازه دانه های محاسبه شده با استفاده از رابطه شرر برابر $33/5122$ nm می باشد.

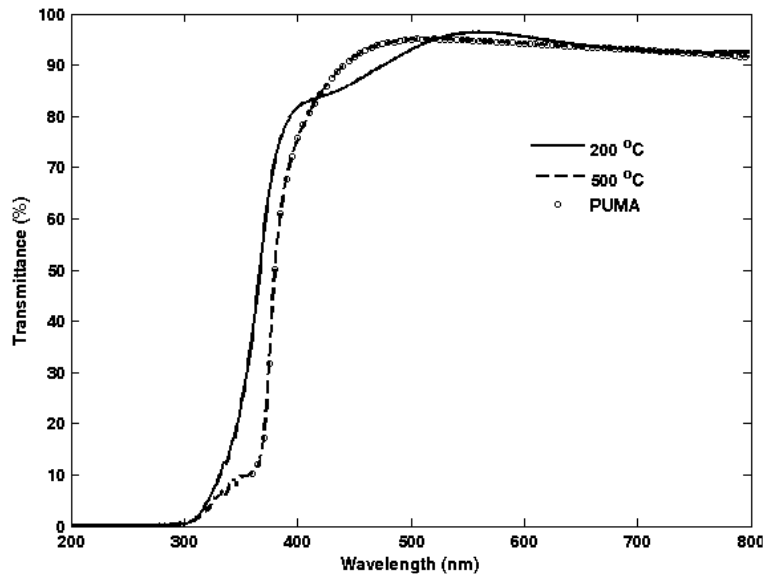


شکل (۵-۱۶): طیف XRD نمونه بازپخت شده اکسید روی آلائیده با آهن در دمای اتاق.

۵-۴-۲) خواص نوری

۵-۴-۲-۱) طیف تراگسیل

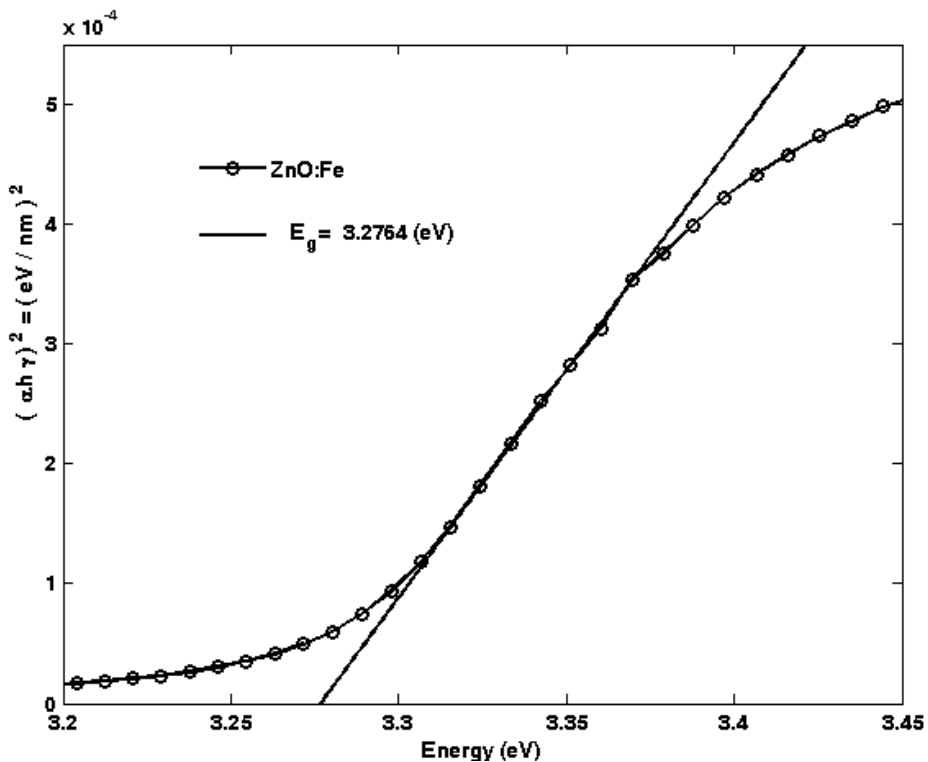
شکل (۵-۱۷) طیف تراگسیل نمونه ها را در دمای خشک سازی و باز پخت نشان می دهد. تغییرات درصد تراگسیل در ناحیه مرئی بین ۸۵ تا ۹۵ درصد است. افزایش دما باعث کاهش طیف شده و نیز الگوی تداخلی را نیز از بین می برد. بیشترین کاهش طیف تراگسیل در لبه جذب است زیرا برهمکنش نور با ماده زیاد می باشد.



شکل (۵-۱۷): طیف تراگسیل در دمای اتاق برای نمونه در دمای خشک سازی و باز پخت.

۵-۴-۲-۲) گاف نواری

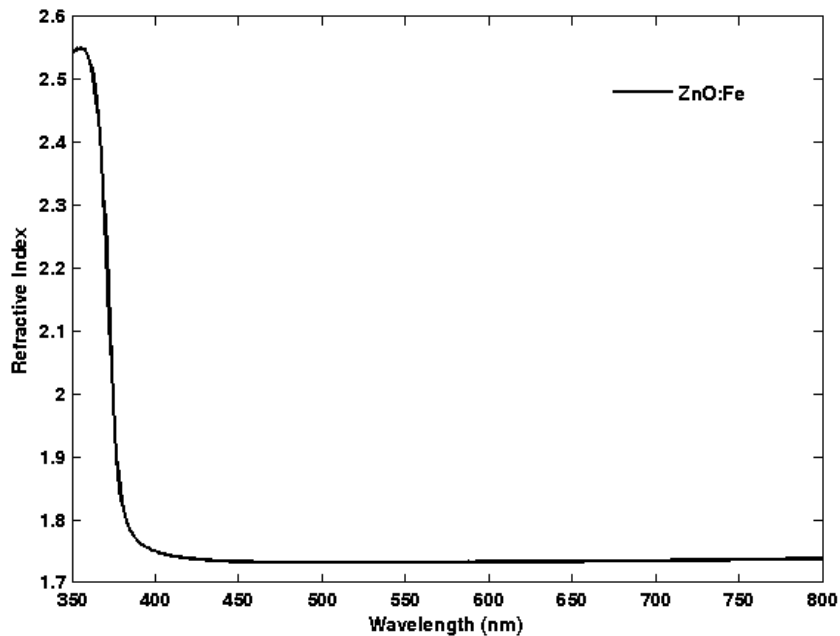
تغییرات $(\alpha h \nu)^2$ بر حسب انرژی نمونه بازپخت شده در شکل (۵-۱۸) نشان داده شده است. انرژی گاف برای نمونه مسقیم و برابر با 3.2764 eV است.



شکل (۵-۱۸): منحنی $(\alpha h \nu)^2$ بر حسب انرژی فوتون فرودی برای نمونه بازپخت شده ZnO:Fe.

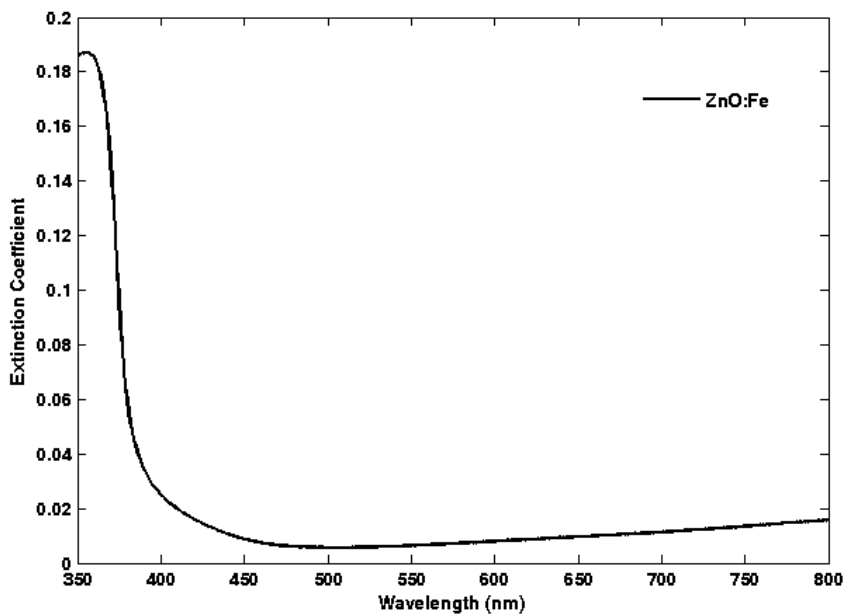
۳-۲-۴-۵ ثوابت نوری

شکل (۱۹-۵) ضریب شکست نمونه بازپخت شده را در دمای اتاق نشان می دهد. ضریب شکست در طول موجهای ناحیه شفاف تغییرات قابل ملاحظه ای ندارد ولی در لبه جذب این تغییرات زیاد است.



شکل (۱۹-۵): ضریب شکست نمونه بازپخت شده ZnO:Fe

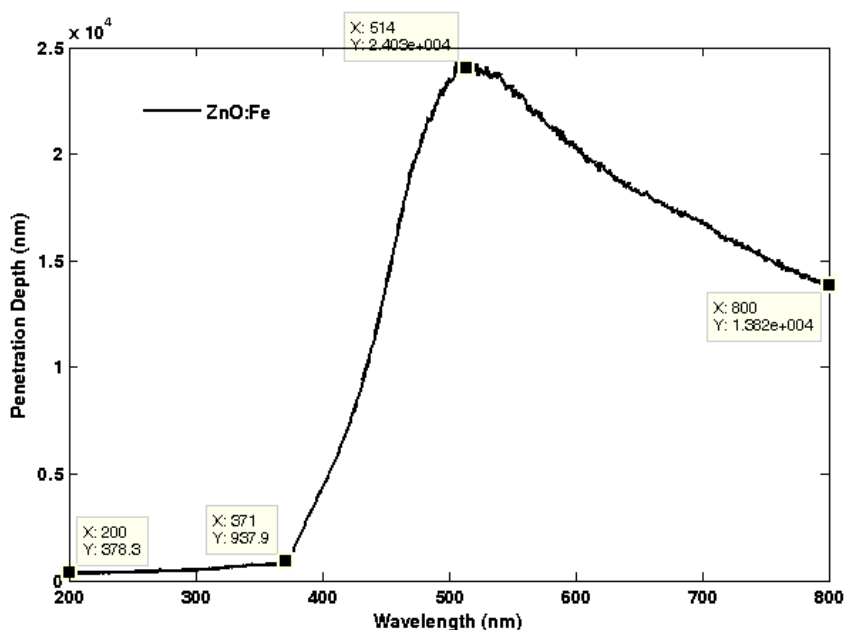
ضریب خاموشی نمونه بازپخت شده برای دمای اتاق در شکل (۲۰-۵) نشان داده شده است. ضریب خاموشی در طول موجهای ناحیه شفاف بتدریج با افزایش طول موج افزایش می یابد.



شکل (۲۰-۵): ضریب خاموشی نمونه بازپخت شده ZnO:Fe

۴-۲-۴-۵ عمق نفوذ

شکل (۲۱-۵) عمق نفوذ نمونه بازپخت شده ZnO:Fe را در طول موجهای بین ۲۰۰ تا ۸۰۰ نانومتر در دمای اتاق نشان می دهد. تغییرات آن بین ۳۷۸ تا ۲۴×10^3 نانومتر است. در طول موجهای کوتاه تا لبه جذب عمق نفوذ کمترین مقدار خود را دارد ولی در طول موجهای بین ۳۷۰ تا ۵۱۵ نانومتر تقریباً با شیب خطی افزایش یافته ولی بعد از آن بطور خطی کاهش می یابد.



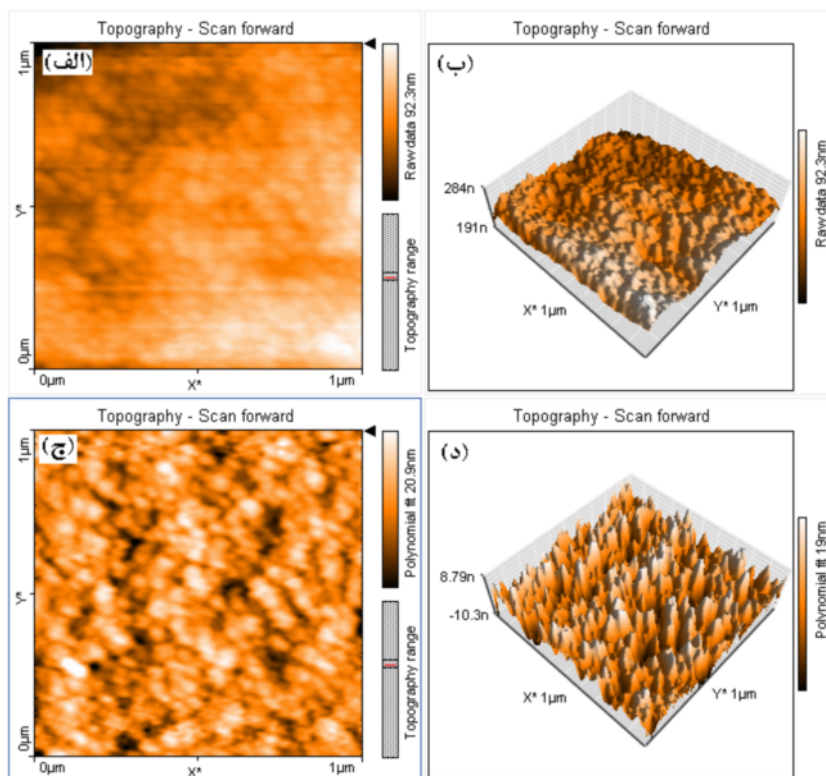
شکل (۲۱-۵): عمق نفوذ نمونه بازپخت شده ZnO:Fe بر حسب طول موج نور فرودی.

۵-۵ اکسید روی آلاییده با کبالت

۱-۵-۵ خواص ساختاری

۱-۱-۵-۵ مورفولوژی سطح

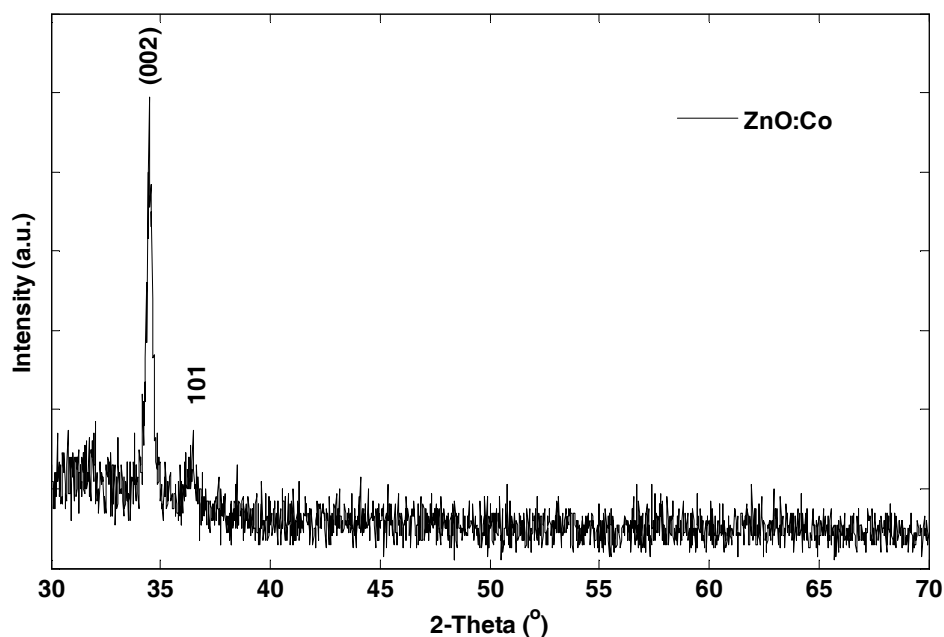
شکل (۲۲-۵) مورفولوژی سطح نمونه ZnO:Co حاصل از اندازه گیریهای AFM را نشان می دهد. شکل‌های (الف) {ب} و (ج) {د} نمایش توپوگرافی دو بعدی {سه بعدی} سطح به ترتیب برای داده های اولیه و برازش آن با چند جمله ایها است. مقدار جذر میانگین مربع زبری سطح محاسبه شده برای سطح برابر $۳/۵۷۵۴$ nm می باشد از این رو نمونه دارای سطح صافی است.



شکل (۵-۲۲): مورفولوژی سطح نمونه. (الف) {ب} و {ج} {د} نمایش توپوگرافی دو بعدی {سه بعدی} سطح به ترتیب برای داده های اولیه (تصاویر بالا) و برازش شده با چند جمله ای (تصاویر پائین).

۵-۱-۵-۲) طیف XRD

شکل (۵-۲۳) طیف XRD اکسید روی آلانئیده با کبالت را برای دمای بازپخت نشان می دهد. همان طوری که در این طیف مشاهده می گردد علاوه بر قله (002) ، قله (101) نیز وجود دارد. جهت های دیگر ساختار حجمی آن در طیف دیده نمی شود و احتمالاً حالت آمورفی غالب است. ثابت های شبکه در جهت های a و c به ترتیب برابر $3/242$ و $5/176$ بر حسب آنگسترم است که اندکی از حالت حجمی خود کمتر است. اندازه دانه های محاسبه شده با استفاده از رابطه شرر برابر $30/1779$ nm است.

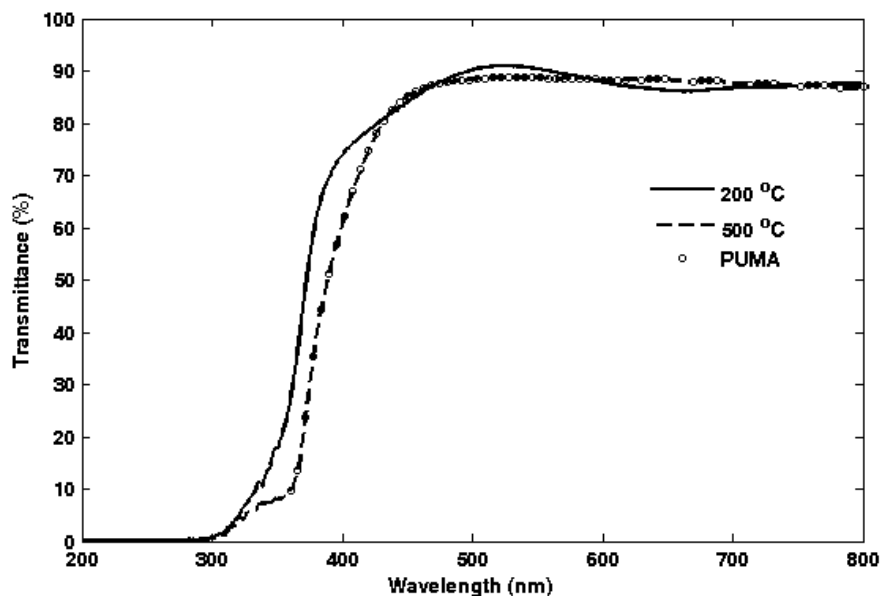


شکل (۵-۲۳): طیف XRD نمونه بازپخت شده اکسید روی آلاینده با کبالت در دمای اتاق.

۵-۵-۲) خواص نوری

۵-۵-۲-۱) طیف تراگسیل

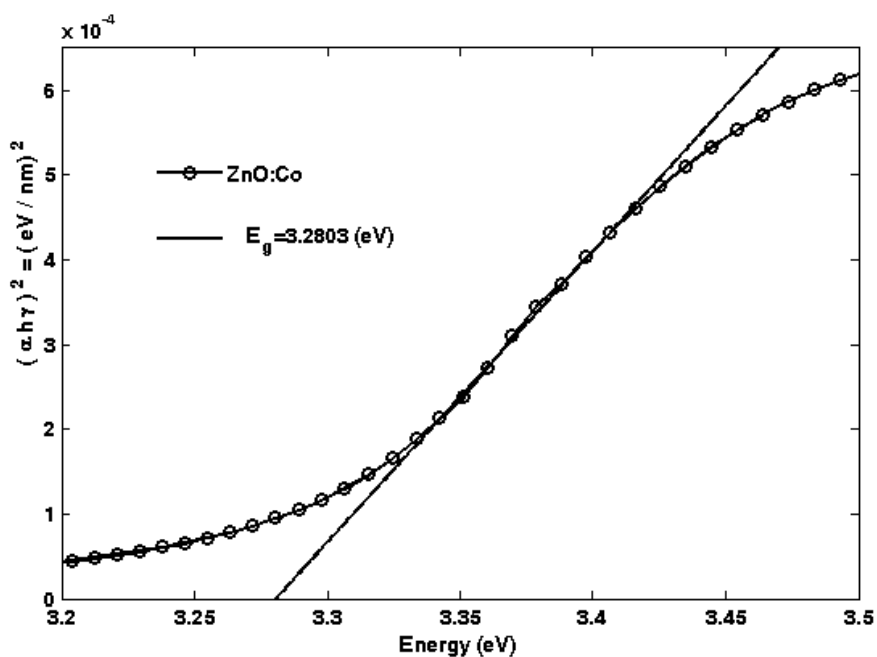
شکل (۵-۲۴) طیف تراگسیل نمونه را در دمای اتاق برای دمای خشک سازی و بازپخت نشان می دهد. طیفها در ناحیه شفاف دارای طیف تراگسیل بین ۸۰ تا ۹۰ درصد هستند و هرچه به لبه جذب نزدیکتر می شود، کاهش چشمگیری را نشان می دهد تا به حد اقل خود برسد. طیف تراگسیل نمونه در دمای خشک سازی تا حدودی شکل نوسانی دارد. بعلت تبخیر مواد آلی، طیف تراگسیل نمونه بازپخت شده اندکی کاهش یافته و بعلت عدم سطوح موازی الگوی نوسانی دیگر مشاهده نمی شود. داده های تجربی توسط روش پوما برازش شده اند که توافق خوبی با آن دارند.



شکل (۲۴-۵): طیف تراگسیل نمونه بازپخت شده و نشده ZnO:CO در دمای اتاق بر حسب طول موج نور فرودی.

۲-۲-۵-۵ گاف نواری

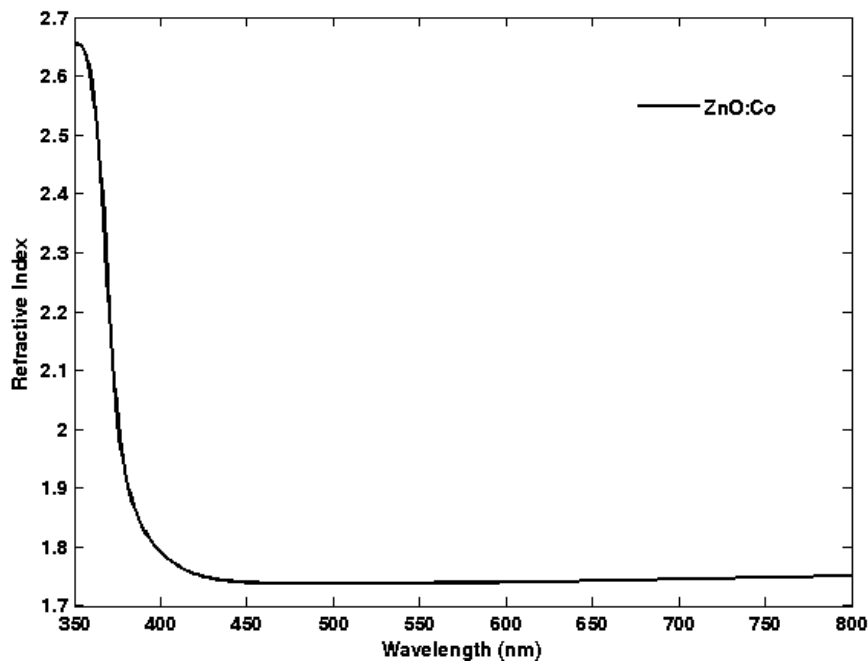
شکل (۲۵-۵) برازش قسمت خطی منحنی $(\alpha h\nu)^2$ بر حسب انرژی نمونه بازپخت شده را نشان می دهد که تقاطع آن با محور انرژی، گاف انرژی را می دهد. انرژی گاف مسقیم برابر با 3.2803 eV است.



شکل (۲۵-۵): منحنی $(\alpha h\nu)^2$ بر حسب انرژی فوتون فرودی برای نمونه بازپخت شده ZnO:Co

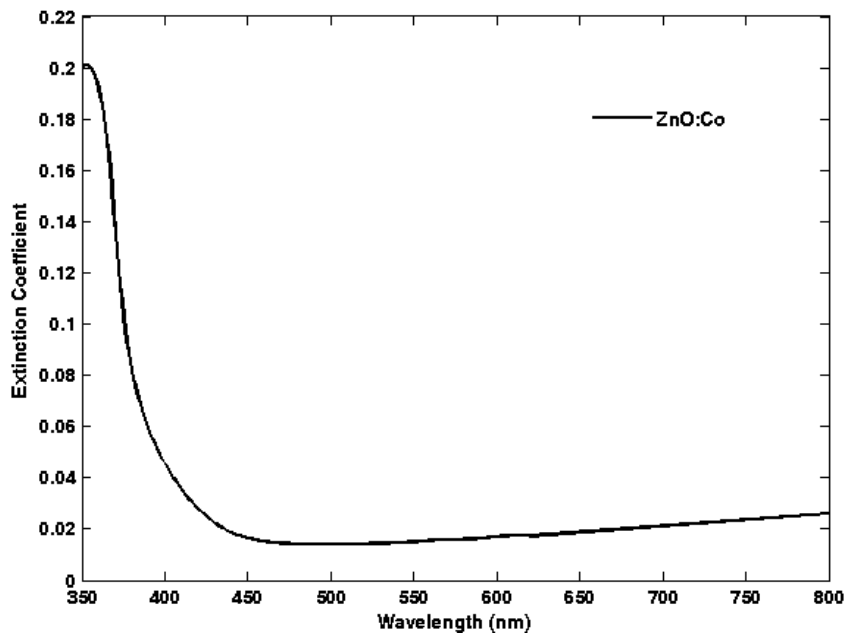
۵-۲-۳) ثوابت نوری

شکل (۵-۲۶) ضریب شکست نمونه بازپخت شده ZnO:Co را بر حسب طول موج نور فرودی نشان می دهد. بیشترین تغییرات ضریب شکست با طول موج مربوط به لبه جذب می باشد. ضریب شکست در طول موجهای ناحیه شفاف تغییرات قابل ملاحظه ای ندارد.



شکل (۵-۲۶): ضریب شکست نمونه بازپخت شده ZnO:Co در دمای اتاق.

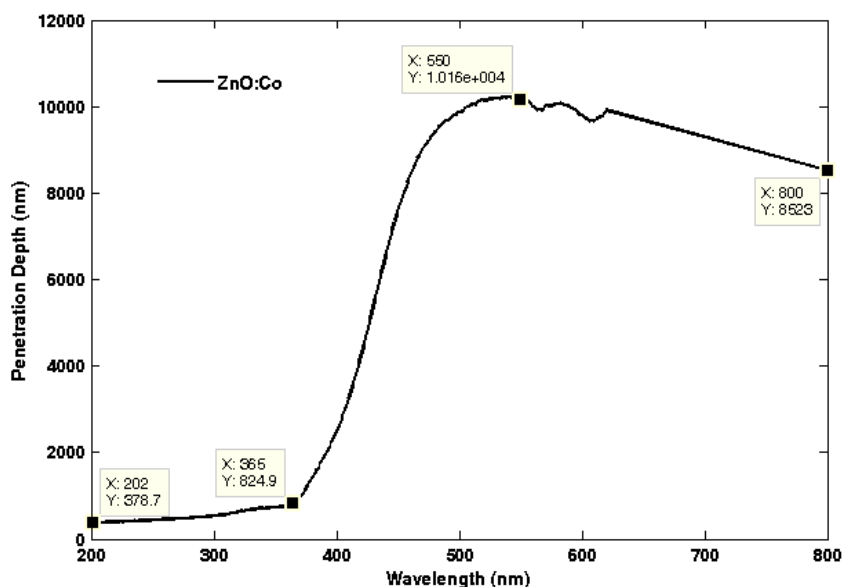
شکل (۵-۲۷) ضریب خاموشی نمونه بازپخت شده ZnO:Co را در دمای اتاق نشان می دهد. ضریب خاموشی وابسته به طول موج بین ۰/۰۱ تا ۰/۲ تغییر می کند. بیشترین تغییرات در لبه جذب است که نشان دهنده برهمکنش قوی بین الکترونهاى ماده با نور فرودى است. ضریب خاموشی در طول موجهای ناحیه شفاف با شیب ملایمی افزایش می یابد.



شکل (۲۷-۵): ضریب خاموشی نمونه بازپخت شده ZnO:Co در دمای اتاق.

۵-۲-۴) عمق نفوذ

شکل (۲۸-۵) عمق نفوذ نمونه بازپخت شده ZnO:Co را در طول موج بین ۲۰۰ تا ۸۰۰ نانومتر در دمای اتاق نشان می دهد. تغییرات آن بین ۳۷۸ تا 10^4 نانومتر است. در طول موجهای کوتاه تا لبه جذب عمق نفوذ کمترین مقدار خود را دارد ولی در طول موجهای بین ۳۶۵ تا ۴۹۰ نانومتر تقریباً با شیب خطی افزایش یافته ولی از طول موج ۵۵۰ تا ۸۰۰ نانومتر بطور خطی کاهش می یابد.



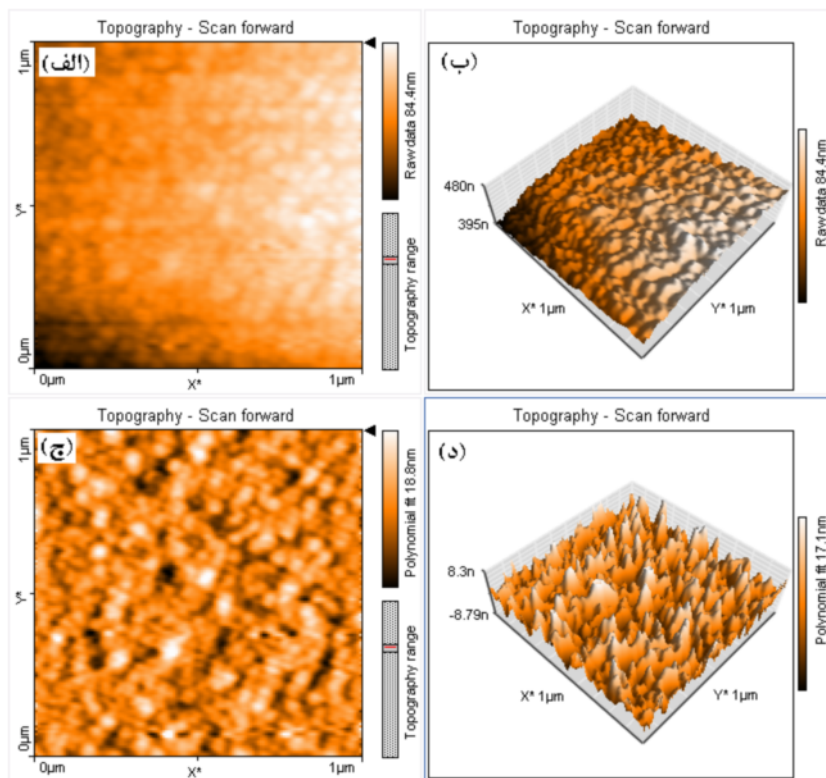
شکل (۲۸-۵): عمق نفوذ نمونه بازپخت شده ZnO:Co بر حسب نور فرودی.

۵-۶) اکسید روی آلاییده با نیکل

۵-۶-۱) ساختار سنجی

۵-۶-۱-۱) مورفولوژی سطح

شکل (۵-۲۹) مورفولوژی سطح نمونه ZnO:Ni را نشان می دهد. شکل‌های (الف) {ب} و {ج} (د) { نمایش توپوگرافی دو بعدی {سه بعدی} سطح به ترتیب برای داده های اولیه و برازش آن با چند جمله ای است. مقدار جذر میانگین مربع زبری سطح محاسبه شده برابر $2/943 \text{ nm}$ می باشد از اینرو نمونه دارای سطح نرمی است.

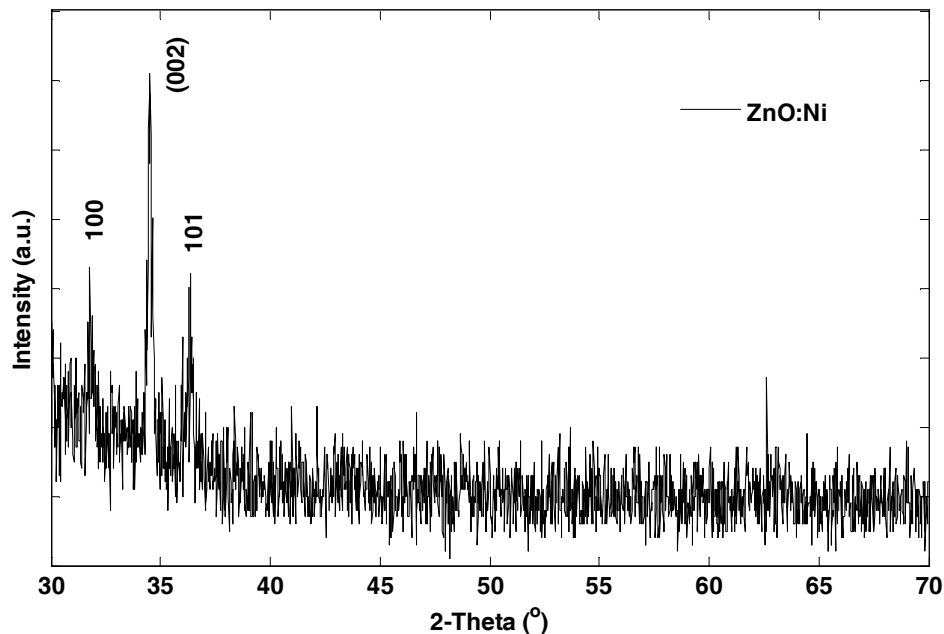


شکل (۵-۲۹): مورفولوژی سطح نمونه. (الف) {ب} و {ج} (د) { نمایش توپوگرافی دو بعدی {سه بعدی} سطح به ترتیب برای داده های اولیه (تصاویر بالا) و برازش شده با چند جمله ای (تصاویر پایین).

۵-۶-۱-۲) طیف XRD

طیف XRD نمونه بازپخت شده اکسید روی آلاییده با نیکل در دمای اتاق در شکل (۵-۳۰) نشان داده شده است. طیف قله های (۰۰۲)، (۰۰۱) و (۱۰۱) را نشان می دهد. جهت‌های دیگر ساختار حجمی

آن در طیف دیده نمی شود. ثابتهای شبکه در جهتهای a و c به ترتیب برابر ۳/۲۴۲ و ۵/۱۷۱ بر حسب آنگسترم است. اندازه دانه های محاسبه شده با استفاده از رابطه شرر برابر ۲۹/۷۵۶۷ nm است.

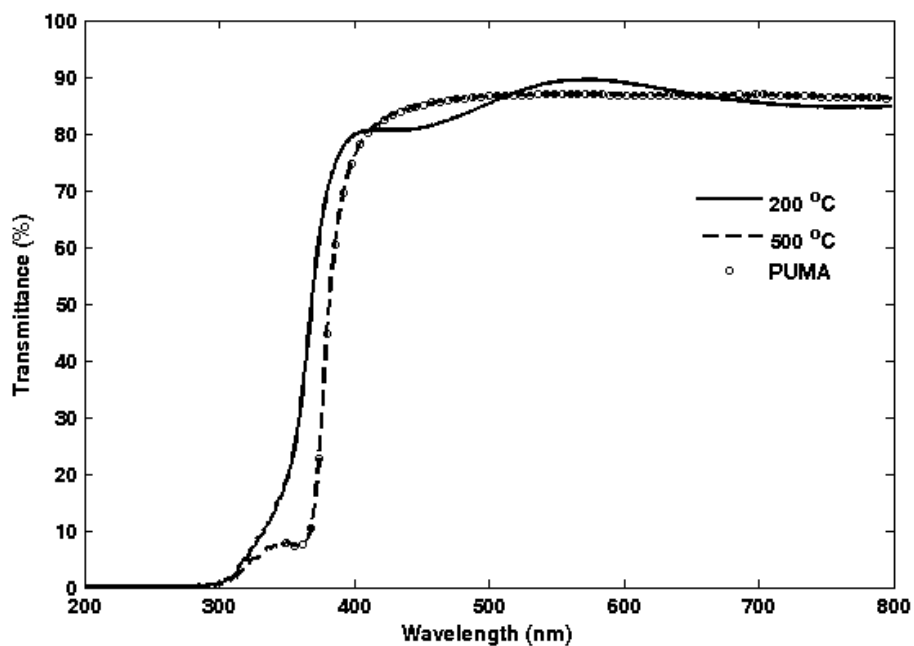


شکل (۵-۳۰): طیف XRD نمونه بازپخت شده اکسید روی آلاییده با نیکل در دمای اتاق.

۵-۶-۲) خواص نوری

۵-۶-۲-۱) طیف تراگسیل

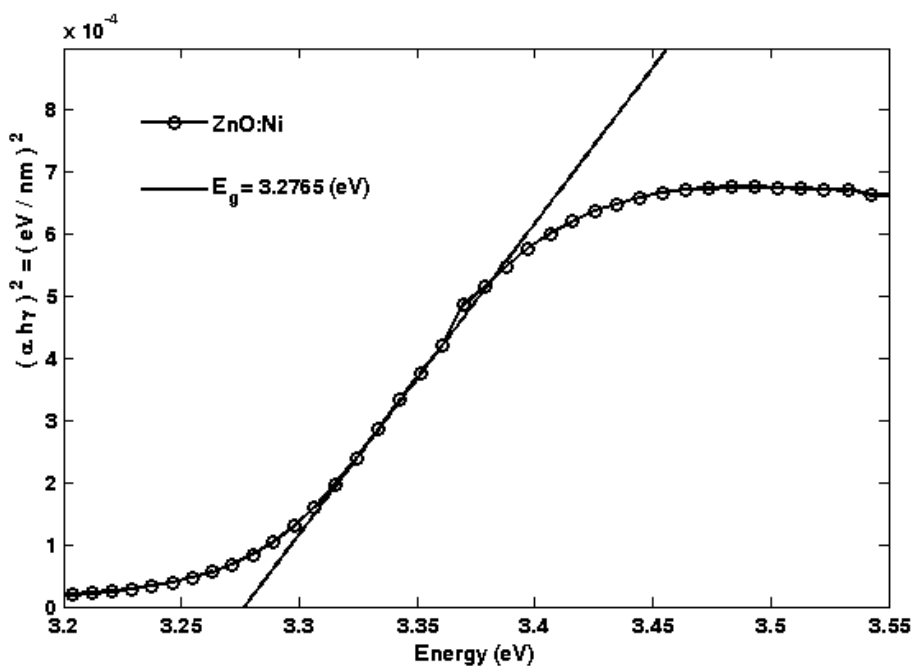
شکل (۵-۳۱) طیف تراگسیل ZnO:Ni در دمای اتاق برای دمای خشک سازی و بازپخت را نشان می دهد. تغییرات طیف تراگسیل در ناحیه شفاف بین ۸۰ تا ۹۰ درصد است ولی در ناحیه جذب کاهش قابل توجه ای دارد. شکل به خوبی نقش اثر دما را نشان می دهد. مشاهده می شود که افزایش دما تا دمای بازپخت باعث از بین رفتن الگوی تداخلی می شود و نمونه اندکی بعلت تبخیر مواد آلی چگالتر می شود. طیف تراگسیل حاصل از محاسبات پوما توافق خوبی با دادههای تجربی دارد.



شکل (۵-۳۱): طیف تراگسیل نمونه ZnO:Ni در دمای اتاق برای دمای خشک سازی و بازپخت.

۵-۶-۲-۲) گاف نواری

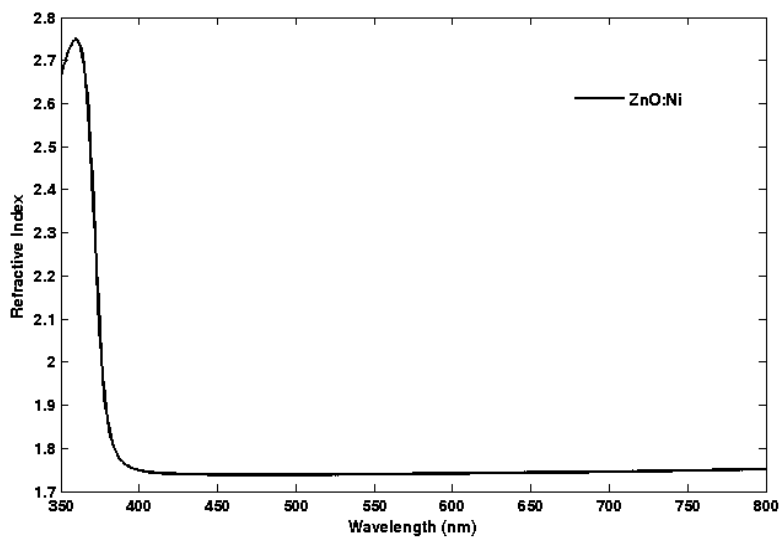
گاف نواری محاسبه شده نمونه بازپخت شده در دمای اتاق مطابق شکل (۵-۳۲) است. انرژی گاف مسقیم و برابر با 3.2764 eV است.



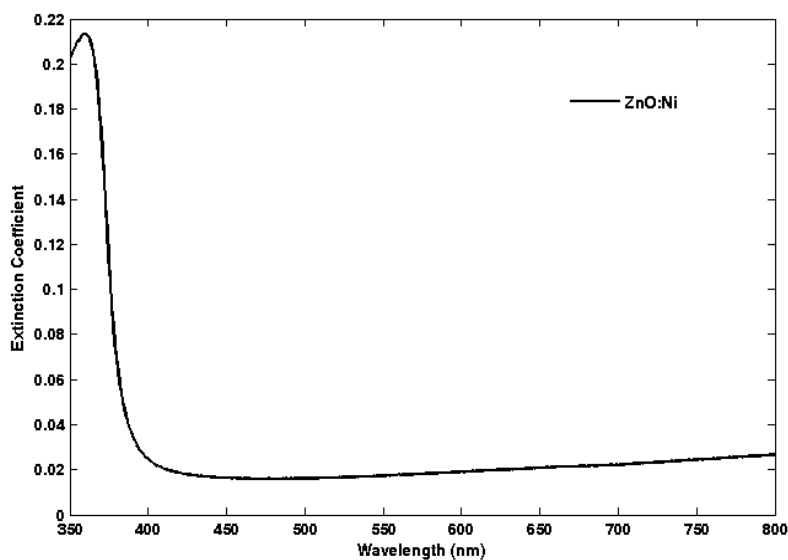
شکل (۵-۳۲): منحنی $(\alpha h\nu)^2$ بر حسب انرژی فوتون فرودی برای نمونه بازپخت شده ZnO:Ni.

۵-۶-۲-۳) ثوابت نوری

ضریب شکست و ضریب خاموشی بر حسب طول موج نور فرودی نمونه بازپخت شده ZnO:Ni در شکل‌های (۳۳-۵) و (۳۴-۵) نشان داده شده است. همانطور که دیده می‌شود ضریب شکست ماده در ناحیه شفاف تغییرات قابل توجهی ندارد ولی در لبه جذب که برهمکنش نور با ماده زیاد است تغییرات زیادی وجود دارد. ضریب خاموشی نمونه بازپخت شده در لبه جذب تغییرات قابل ملاحظه‌ای دارد ولی در طول موج‌های بلند تغییرات آن خطی با شیب ملایم مثبت است.



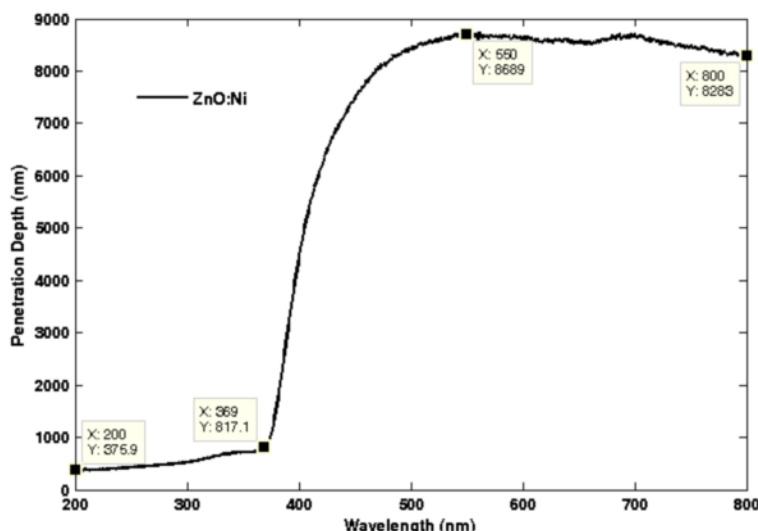
شکل (۳۳-۵): ضریب شکست نمونه بازپخت شده ZnO:Ni در دمای اتاق بر حسب نور فرودی.



شکل (۳۴-۵): ضریب خاموشی نمونه بازپخت شده ZnO:Ni در دمای اتاق بر حسب نور فرودی.

۵-۶-۲-۴) عمق نفوذ

شکل (۵-۳) عمق نفوذ نمونه بازپخت شده ZnO:Ni را در طول موج بین ۲۰۰ تا ۸۰۰ نانومتر نشان می دهد. تغییرات آن بین ۳۷۵ تا ۸۶۹۰ نانومتر است. در طول موجهای کوتاه تا لبه جذب عمق نفوذ کمترین مقدار خود را دارد ولی در طول موجهای ناحیه بنفش (مرئی) تقریباً با شیب خطی (ملایم) افزایش (کاهش) می یابد.



شکل (۵-۳): عمق نفوذ نمونه بازپخت شده ZnO:Ni در دمای اتاق بر حسب طول موج نور فرودی.

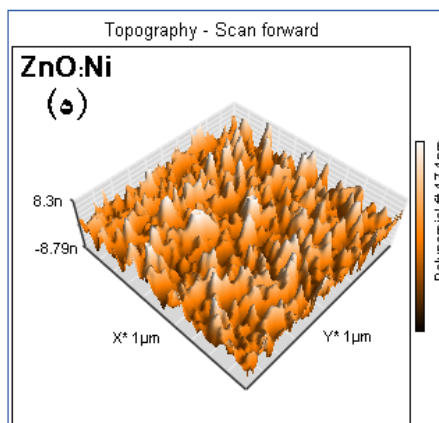
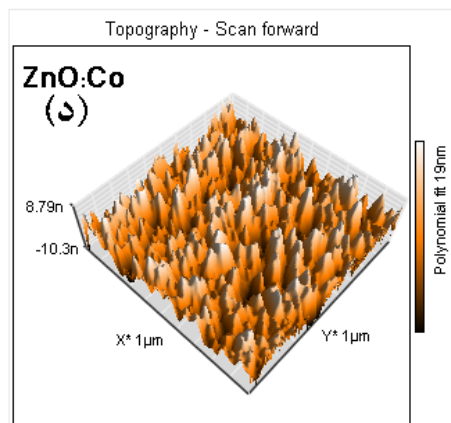
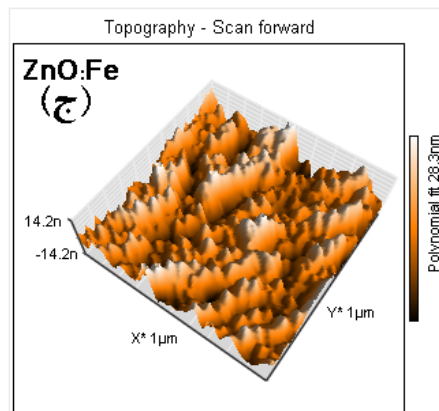
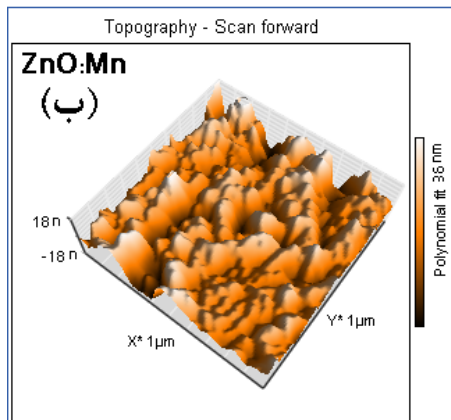
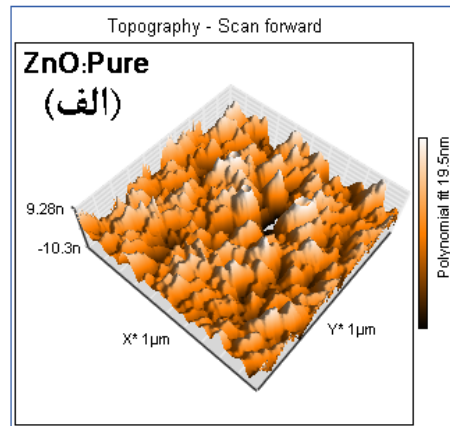
۵-۷) بحث و نتیجه گیری

۵-۷-۱) ساختار سنجی

۵-۷-۱-۱) مورفولوژی سطح

مطالعه مورفولوژی سطح در فصل مشترک لایه های نازک دارای اهمیت زیادی است زیرا می تواند خواص فیزیکی ماده را تحت تاثیر قرار دهد و تلاش می شود با استفاده از روشهای رشد یا مواد اولیه آنرا کنترل کرد. شکل (۵-۳۶) تصاویر AFM لایه های رشد داده شده با عناصر واسطه مختلف را نشان می دهد. شکلهای (الف)، (ب)، (ج)، (د) و (ه) توپوگرافی سه بعدی با ابعاد $1 \times 1 \mu\text{m}$ از نمونه های مورد مطالعه برآزش شده با چند جمله ایها را نشان می دهند. نتایج حاصل از این مطالعه در جدول (۵-۱) ذکر شده است. یکی از این ویژگیها سطح زبری آن است که ممکن است به دمای

بازپخت نهائی نیز وابسته باشد. همانطوری که در جدول دیده می شود، ویژگیهای فیزیکی سطح به شعاع یونی عناصر واسطه آلائیده وابسته است. هرچه شعاع یونی عناصر واسطه آلائیده بیشتر می شود جذر میانگین مربع زبری سطح افزایش می یابد. این مسئله ممکن است به دلیل افزایش اندازه دانه ها با افزایش شعاع یونی عناصر آلائش شده باشد.



شکل (۵-۳۶): تصاویر AFM نمونه های بازپخت شده عناصر واسطه با آلائش سه درصدی از عناصر واسطه.

(الف) اکسید روی خالص، (ب) ZnO:Mn، (ج) ZnO:Fe، (د) ZnO:Co و (ه) ZnO:Ni

جدول (۵-۱): بعضی از ویژگیهای سطح نمونه ها حاصل از تصاویر AFM.

Ni ⁺²	Co ⁺²	Zn ⁺² -pure	Fe ⁺²	Mn ⁺²	نوع آرایش	
۵۵	۵۸	۶۰	۶۳	۶۶	شعاع یونی (pm)	
غیر تماسی					نوع تصویر برداری AFM	
چند جمله ای					نوع برازش	
۱/۰۰۸					ناحیه جاروب شده (pm ²)	
۲/۳۰۸۴	۲/۸۴۳۳	۲/۸۳۸۷	۴/۲۵۸۸	۵/۲۹۷	متوسط زبری ^۱	نوع زبری ناحیه (nm)
۳۰/۴۴۲	۳۰/۴۷۹	۳۰/۴۵۶	۳۰/۴۵۲	۳۰/۴۵۴	میانگین زبری ^۲ (pm)	
۲/۹۴۳۳	۳/۵۷۵۴	۴/۵۸۷۳	۵/۳۲۱۸	۶/۵۸۷۳	جذر میانگین مربع زبری ^۳	
۱۴/۸۷۸	۱۶/۵۵۶	۱۳/۸۴	۱۷/۰۱۴	۲۱/۸۷۳	حد اکثر ارتفاع قله (nm)	
-۱۰/۲۶۹	-۲۲/۲۶۳	-۱۴/۰۵۴	-۱۹/۹۱۳	-۲۰/۲۱۵	حد اقل عمق دره (nm)	
۲۵/۱۴۷	۳۸/۸۲	۲۷/۸۹۴	۳۹/۹۲۷	۴۲/۰۸۸	اختلاف ارتفاع بین قله و دره (nm)	

۵-۷-۱-۲) طیف XRD

شکل (۵-۳۷) الگوی پراش اشعه X همه نمونه ها که توسط دستگاه Bruker AXS با خط تابش CuK α با طول موج ۱/۵۴۰۶ A^۰ گرفته شده است را نشان می دهد. طیف XRD در دمای اتاق و با گام ۰.۰۲ از ۳۰ تا ۷۰ درجه ثبت شده اند. جدول (۵-۲) مشخصات ریز ساختاری هر نمونه را نشان می دهد. طیف XRD نمونه ها نشانگر ساختار بلوری تک فاز هگزاگونال اکسید روی است. که در آنها هیچ اثری از تشکیل فازهای ثانویه نظیر اکسیدهای عناصر واسطه و خوشه های مربوطه دیده نمی شود.

¹ The Roughness Average

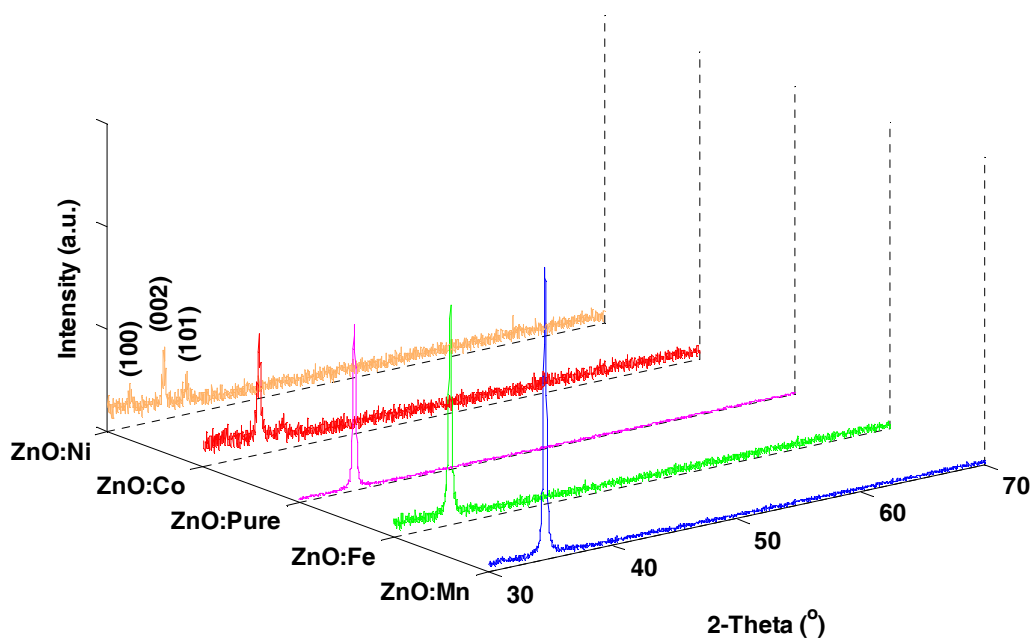
² The Mean Value

³ The Root Mean Square

الگوهای نمونه‌ها نشان می‌دهند که همه بلورها به جزء نمونه‌های آلیس یافته با نیکل و کبالت دارای راستای ترجیحی رشد در جهت (۰۰۲) هستند. نمونه‌های آلیس یافته با نیکل و کبالت علاوه بر راستای (۰۰۲) دارای قله‌های (۱۰۰) و (۱۰۱) نیز می‌باشند.

هنگامی که اکسید روی با عناصر منگنز و آهن با شعاعهای یونی بترتیب ۶۶ و ۶۳ پیکومتر آلائیده شود، این عناصر می‌توانند جانشین یونهای روی با شعاع یونی ۶۰ pm شوند. بعلاوه اینک شعاع یونی آنها از روی بیشتر است، سلول واحد اکسید روی تحت تنش قرار می‌گیرد و برای تنش زدائی سلول واحد در جهت C افزایش می‌یابد و این افزایش برای منگنز بیشتر از آهن است.

وقتی که کبالت و نیکل با شعاعهای یونی ۵۸ pm و ۵۵ pm در اکسید روی آلائیده شوند، بدلیل اینکه شعاعهای یونی آنها کمتر از روی است می‌توانند باعث کاهش ابعاد سلول واحد ساختار گردد که این بخوبی در نتایج بدست آورده در جدول (۵-۲) قابل مشاهده می‌باشد. نتایج بدست آمده نشان می‌دهد که اندازه دانه‌ها با شعاع یونی عناصر ارتباط مستقیم دارد یعنی با کاهش شعاع یونی، اندازه دانه‌ها نیز کاهش می‌یابد.



شکل (۵-۳۷): طیف XRD ثبت شده نمونه‌ها در دمای اتاق.

جدول (۵-۲): ثابتهای شبکه، اندازه دانه و موقعیت قله های طیف.

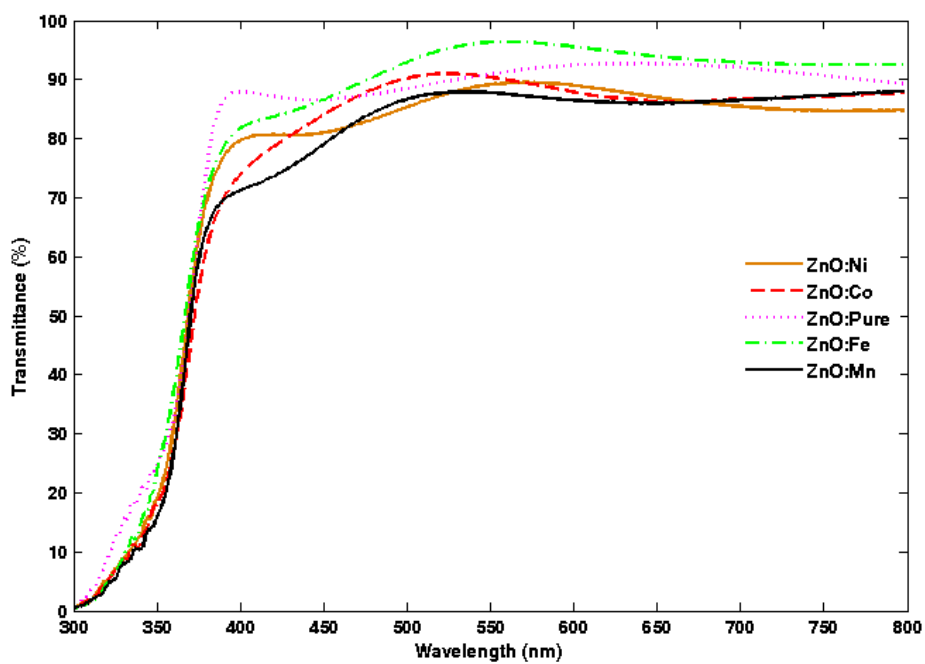
Ni	Co	Zn-Pure	Fe	Mn	نوع آرایش			
-	-	۳/۲۴۹۵	-	-	حجمی	a=b	ثابت شبکه (Å)	
۳/۲۴۲۰۰	۳/۲۴۲۰۰	۳/۲۴۹۰۰	۳/۲۴۹۰۰	۳/۲۴۹۰۰	کار حاضر			
-	-	۵/۲۰۶۹	-	-	حجمی	c		
۵/۱۷۱۰۰	۵/۱۷۶۰۰	۵/۲۰۵۰۰	۵/۲۰۷۰۰	۵/۲۰۹۰۰	کار حاضر			
۳۱.۷۸۲	۳۴/۵۵	۳۴/۴۹۸	۳۴/۴۸۳	۳۵/۵	موقعیت قله ها (°)			
۳۴/۴								
۳۶.۳۵	۳۶/۴۸				اندازه دانه ها (nm)			
۲۹/۷۵۶۷	۳۰/۱۷۷۹	۳۳/۲۵۹۶	۳۴/۵۱۲۲	۳۶/۸۹۳۲				
۱/۵۴۰۶						طول موج (Å)		

۵-۷-۲) خواص نوری

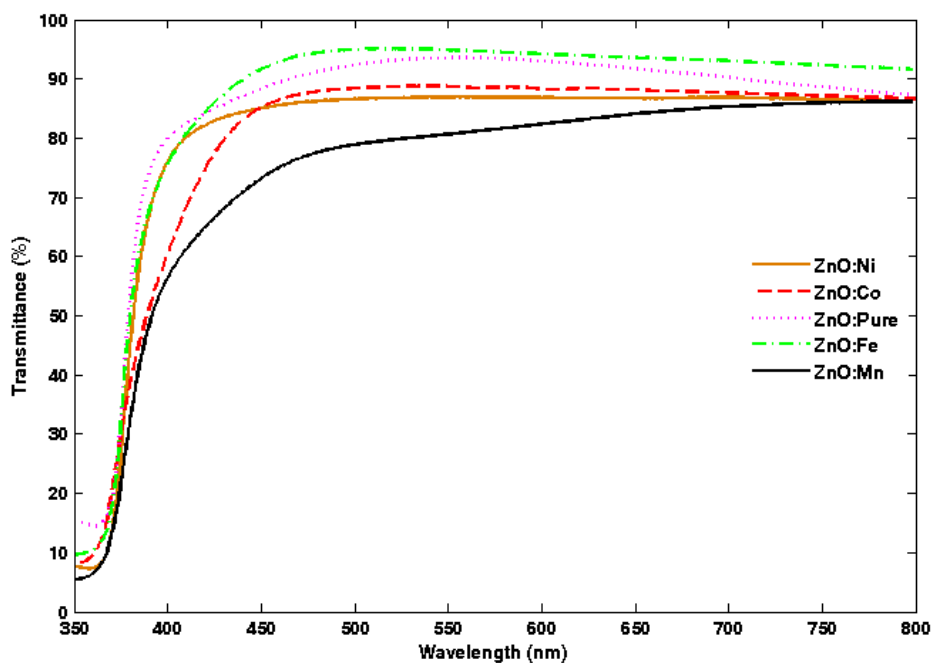
۵-۷-۲-۱) طیف تراگسیل

طیفهای تراگسیل نمونه ها ثبت شده در دمای اتاق برای دمای خشک سازی اولیه °C ۲۰۰ و دمای بازپخت °C ۵۰۰ در شکلهای (۵-۳۸) و (۵-۳۹) نشان داده شده است. طیفهای تراگسیل در بازه طول موج ۲۰۰ تا ۸۰۰ نانومتر با گام ۱ نانومتر ثبت شده اند. شکل (۵-۳۸) نشان می دهد، طیفها تراگسیل نمونه ZnO:Fe نسبت به دیگر نمونه ها بیشتر است. طیفها دارای افت و خیز ملایمی می باشند که ناشی از تداخل امواج از فصل مشترکها است. و هر چه این سطوح موازی و صافتر باشند این افت و خیزها نیز بیشتر می شود.

در طیفهای نمونه های بازپخت شده که در شکل (۵-۳۹) نشان داده شده، طیفهای تراگسیل نمونه ها در ناحیه مادون قرمز و نزدیک به ناحیه مرئی شفاف بوده ولی در لبه جذب شدیداً کاهش می یابند. از مقایسه شکلهای (۵-۳۸) و (۵-۳۹) می توان نتیجه گرفت که عمل بازپخت تغییر قابل ملاحظه ای در شفافیت نمونه ها ایجاد نمی کند ولی می تواند باعث تغییر در زبری سطوح شود.



شکل (۵-۳۸): طیف نور تراگسیل همه نمونه ها در دمای اتاق برای دمای خشک سازی.

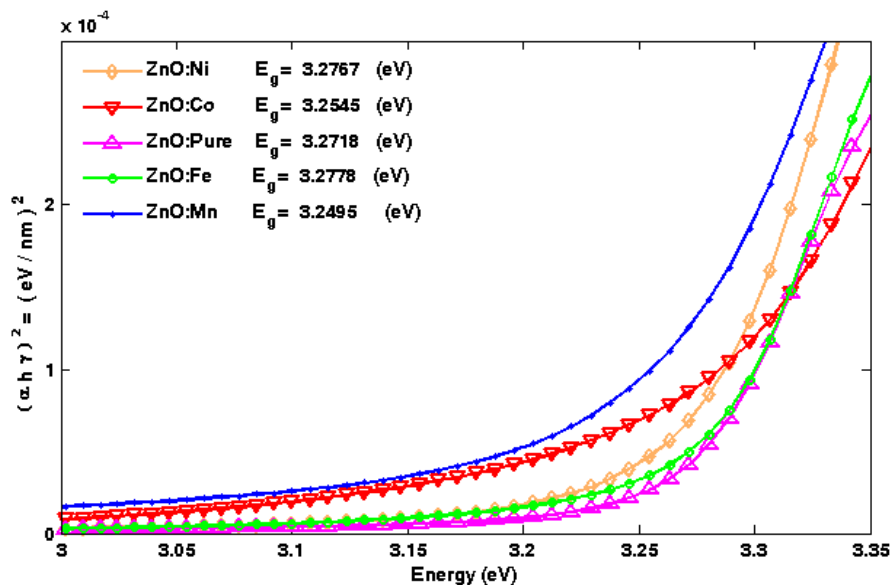


شکل (۵-۳۹): طیف نور تراگسیل همه نمونه های بازپخت شده در دمای اتاق.

۵-۷-۲-۲) گاف نواری

شکل (۵-۴۰) نمودار $(\alpha h\nu)^2$ بر حسب $h\nu$ نمونه های بازپخت شده را نشان می دهد. نتایج بدست آمده نشان می دهند که تغییرات گاف نواری نمونه ها از الگوی خاصی پیروی نمی کنند. زیرا ساختار نواری ماده به پارامترهای مختلفی از جمله اندازه دانه ها، خواص مغناطیسی عناصر واسطه آلاینده شده، دمای باز پخت و پتانسیلهای ناخواسته ناشی از در رفتگیها در هنگام رشد وابسته است.

گاف نواری اکسید منگنز (۴/۲ eV) و اکسید نیکل (۳/۶ eV) از اکسید روی (۳/۳۲ eV) بیشتر است. همچنین گاف انرژی اکسید کبالت (۲/۲ eV) از اکسید روی کمتر است. میزان تغییرات گاف انرژی اکسید روی آلاینش یافته با این عناصر نسبت به اکسید روی خالص از قانون وگارد قابل پیش بینی است. مکانیزم این تغییرات به برهمکنش بین اوربیتالهای *s* و *p* ماده میزبان و اوربیتال *d* عناصر واسطه نسبت داده شده است [۹۳، ۹۴].

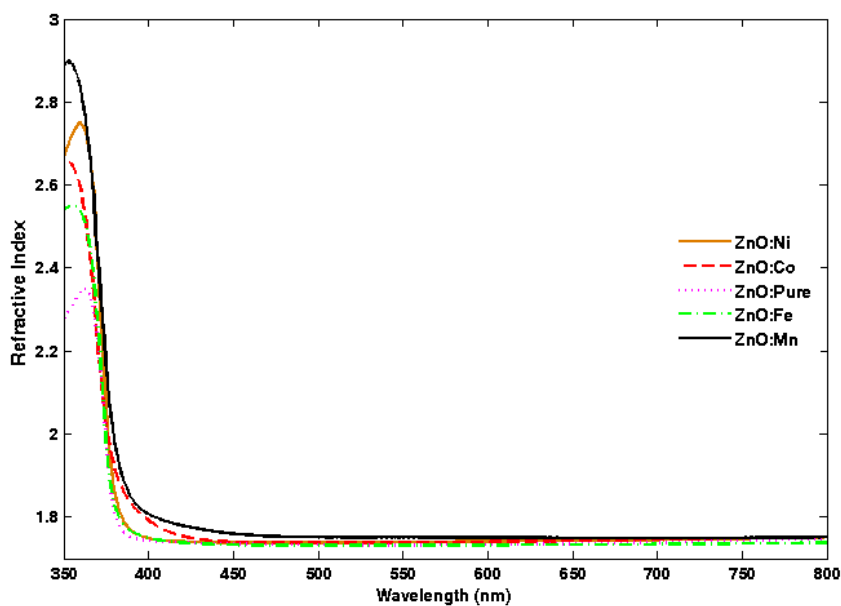


شکل (۵-۴۰): نمودار $(\alpha h\nu)^2$ بر حسب انرژی نمونه های بازپخت شده با آلاینش سه درصد از عناصر واسطه.

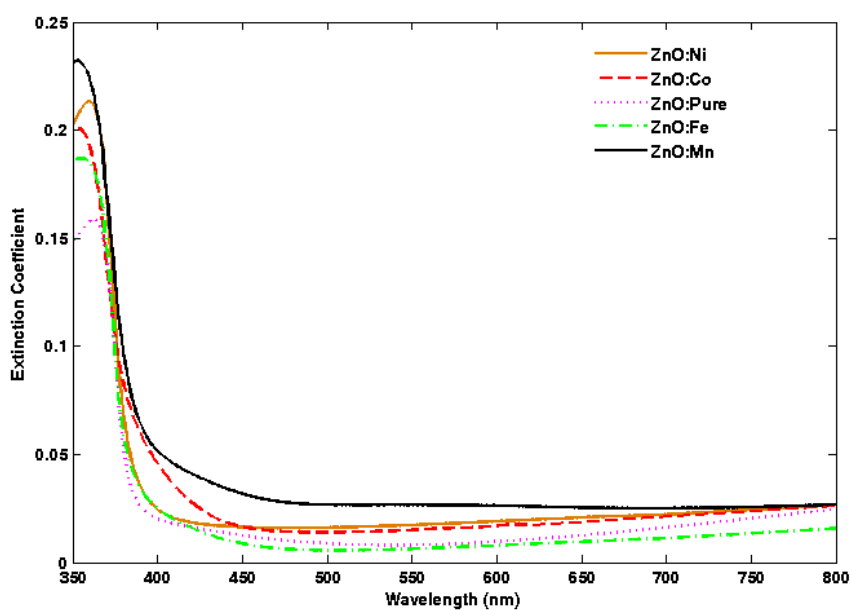
۵-۷-۲-۳) ثوابت اپتیکی

در شکل‌های (۵-۴۱) و (۵-۴۲) ضرایب شکست و خاموشی محاسبه شده از روش کمینه کردن غیر مقید نقاط و برازش آن با روابط کوشی نشان داده شده است. در ناحیه ای که نمونه ها شفاف هستند،

در ضرایب شکست تغییرات قابل ملاحظه ای مشاهده نمی شود ولی در نزدیکی لبه جذب که برهمکنش نور فرودی با الکترونهای ماده زیاد می باشد، تغییرات چشمگیری وجود دارد. مقدار ضرایب خاموشی در ناحیه مرئی طیف تا حدودی وابسته به نوع آرایش است که ممکن است بدلیل تفاوت در ضریب جذب عناصر واسطه باشد.



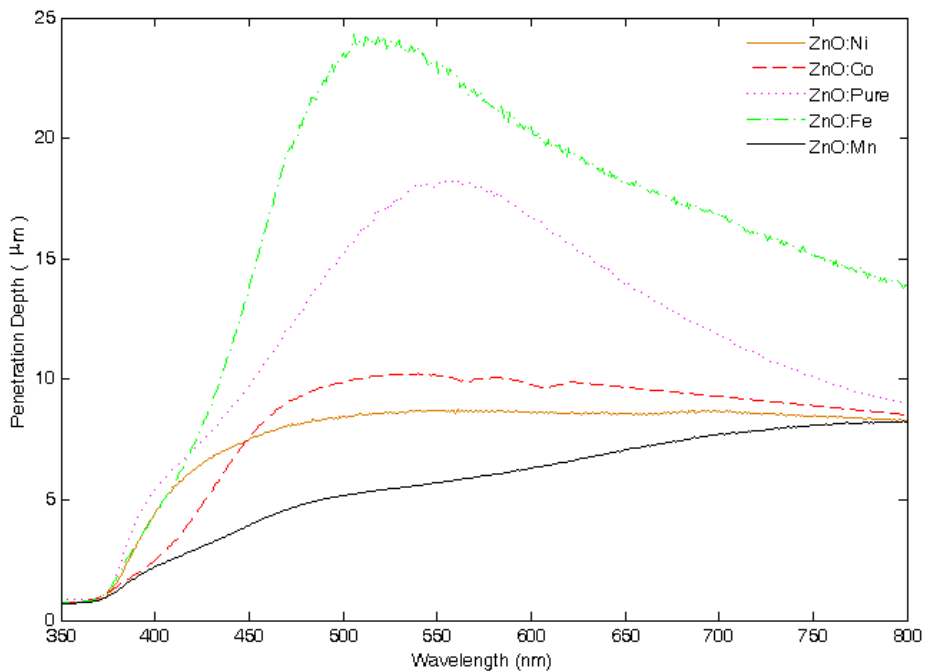
شکل (۴۱-۵): ضرایب شکست نمونه های بازیخت شده بر حسب تابعی از طول موج نور فرودی.



شکل (۴۲-۵): ضرایب خاموشی نمونه های بازیخت شده بر حسب تابعی از طول موج نور فرودی.

۵-۷-۲-۴) عمق نفوذ

همانطوری که در شکل (۵-۴۳) دیده می شود عمق نفوذ از لبه جذب تا طول موجهای حدود ۵۰۰ nm افزایش و سپس کاهش می یابد. نقطه شروع کاهش عمق نفوذ برای نمونه های مختلف، متفاوت می باشد اما رفتار نمونه آرایش یافته با منگنز قدری متفاوت می باشد. در طیف جذبی نمونه پودری اکسید روی آرایش یافته با کبالت یک جذب در طول موج حدود ۵۵۰ nm گزارش شده است [۹۵]. این ساختار جذبی به گذارهای داخلی اتمی $d-d$ ناشی از شکافت میدان بلور عنصر کبالت نسبت داده شده است. این ساختار جذبی در شکل (۵-۴۳) نیز قابل مشاهده است. وقتی عناصر واسطه با شعاعهای یونی متفاوت جایگزین یونهای روی در ترکیب شوند باعث ایجاد اعوجاج در ساختار شده که این اعوجاج اطراف عنصر واسطه ممکن است خواص اپتیکی لایه ها را تحت تاثیر قرار دهد [۹۶].



شکل (۵-۴۳): محاسبه عمق نفوذ نمونه های بازپخت شده بر حسب تابعی از طول موج نور فرودی.

۵-۸) مطالعه خواص مغناطیسی نمونه ها

۵-۸-۱) تاریخچه

نمونه کامل اکسید روی خالص بدلیل اینکه اوربیتال d یون روی کاملاً پر است نباید خاصیت مغناطیسی داشته باشد. مشاهده خاصیت مغناطیسی گزارش شده در چنین موادی ممکن است به دلیل وجود تهی جاهای اکسیژن^۱ باشد [۹۷]. این تهی جاها عامل ایجاد تراز بین نواری در اکسید روی است که ماده را به نوع n تبدیل می کند [۹۸، ۹۹]. منشأ آن که چگونه تهی جاها می توانند تولید گشتاور مغناطیسی کنند هنوز مشخص نیست. اگر منشأ خاصیت مغناطیسی، تهی جاهای حاصل از اکسیژن باشد نقش آلایش عناصر واسطه در این مواد چیست؟ آیا آلایش عناصر واسطه خاصیت مغناطیسی اکسید روی را افزایش می دهد یا خیر؟ محاسبات کامپیوتری انجام شده روی این ترکیبات پیش بینی نموده است که قرار گرفتن عناصر واسطه در جایگاه یون روی در اکسید روی، باعث ایجاد خاصیت فرو مغناطیسی در دمای اتاق می شود. تجربه نیز این پیشگویی را برای مواد دیگری که با روشهای رشد متفاوت تهیه شدند، تصدیق می کند [۱۰۰، ۱۰۱]. گشتاور مغناطیسی مشاهده شده در اکسید روی خالص و آلاییده شده با منگنز در حدود 5×10^{-3} emu/gr است [۱۰۲، ۱۰۳] ولی گزارشات موجود در این خصوص نیز تا حدودی به نحوه و شرایط محیطی رشد این ماده بستگی دارد. به عنوان مثال در دمای اتاق، بعضی از گروهها خاصیت فرو مغناطیس و بعضی دیگر نیز خاصیت پارامغناطیس را گزارش نموده اند. در ادامه این بخش به ارائه نتایج حاصل از اندازه گیری منحنی پسماند روی نمونه های اکسید روی خالص و آلایش یافته با منگنز، نیکل، آهن و کبالت می پردازیم که به روش سل-ژل تهیه شده اند.

اندازه گیریهای مغناطیسی توسط دستگاه The Quantum design PPMS در دانشگاه تامکینگ کشور تایوان توسط گروه پروفیسور چاوو^۲ در دمای اتاق انجام گرفته است. در اینجا ذکر این نکته ضروری است که بگوئیم بدلیل ضخامت کم لایه های رشد داده شده (حدود ۳۰۰ nm)، این لایه ها دارای

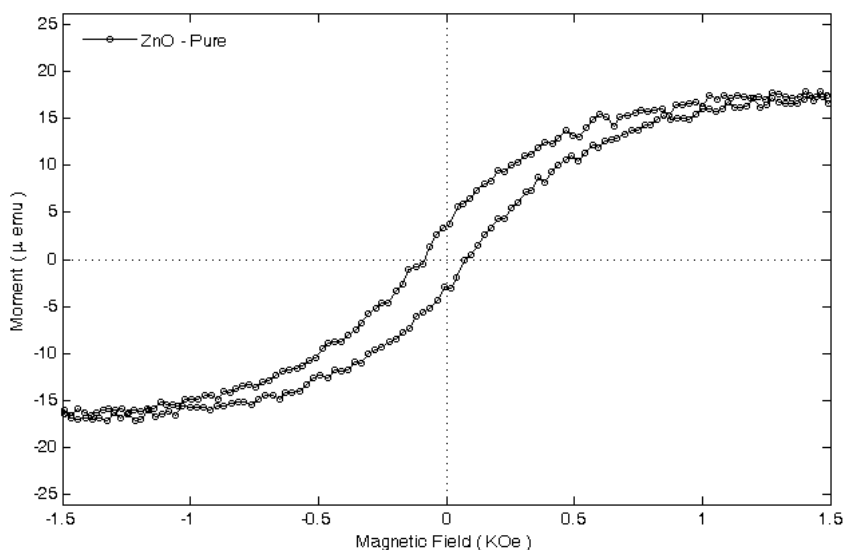
¹ Oxygen vacancy

² Chao

مغناطش کوچکی هستند. نمونه های مورد استفاده چون بایستی در دستگاههای اندازه گیری مغناطیسی دارای ابعاد حدود $3\text{mm} \times 3\text{mm}$ باشند دستگاههای اندازه گیری مغناطیسی موجود در ایران قادر به اندازه گیریهای مغناطش این نمونه ها با حساسیت لازم نبودند.

۵-۸-۲) منحنی پسماند اکسید روی خالص

منحنی تغییرات گشتاور مغناطیسی بر حسب میدان اعمالی برای نمونه اکسید روی خالص در شکل (۵-۴۴) نشان داده شده است. همان طوری که مشاهده می شود نمونه مطالعه شده، حلقه پسماند واضحی را در دمای اتاق نشان می دهد. مقدار میدان مغناطیس زدا^۱ استخراج شده از این منحنی $84/07 \text{ Oe}$ می باشد که به همراه گشتاور مغناطیسی خودبخودی و اشباع در جدول (۵-۳) گزارش شده است. همانطور که نمودار نشان می دهد اکسید روی خالص تهیه شده، در دمای اتاق از خود خاصیت فرومغناطیسی نشان می دهد. لازم به ذکر است که میدان مغناطیس زدا از تقاطع منحنی گشتاور با محور میدان در چرخه کاهش میدان بدست آمده است و گشتاور اشباع بیشترین مقدار گشتاور مغناطیسی می باشد.

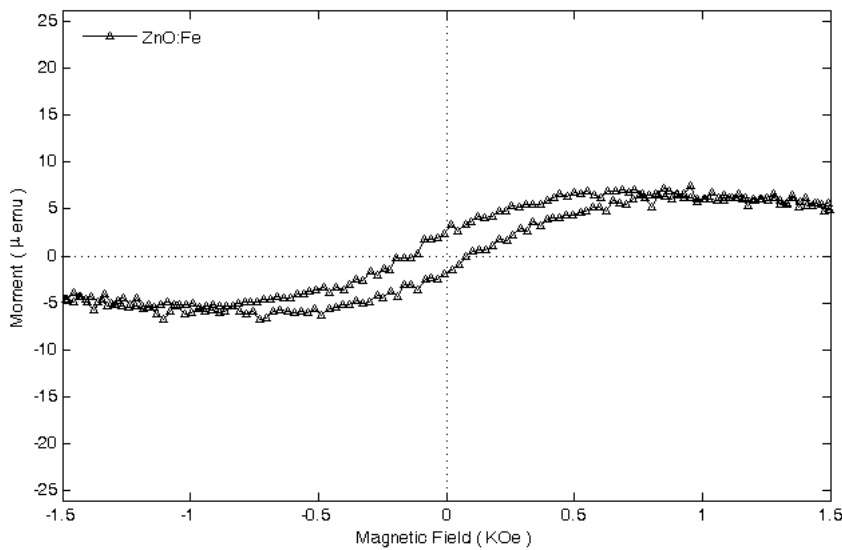


شکل (۵-۴۴): حلقه پسماند اکسید روی خالص در دمای اتاق.

¹ Coercive Field

۵-۸-۳) منحنی پسماند اکسید روی با آرایش آهن

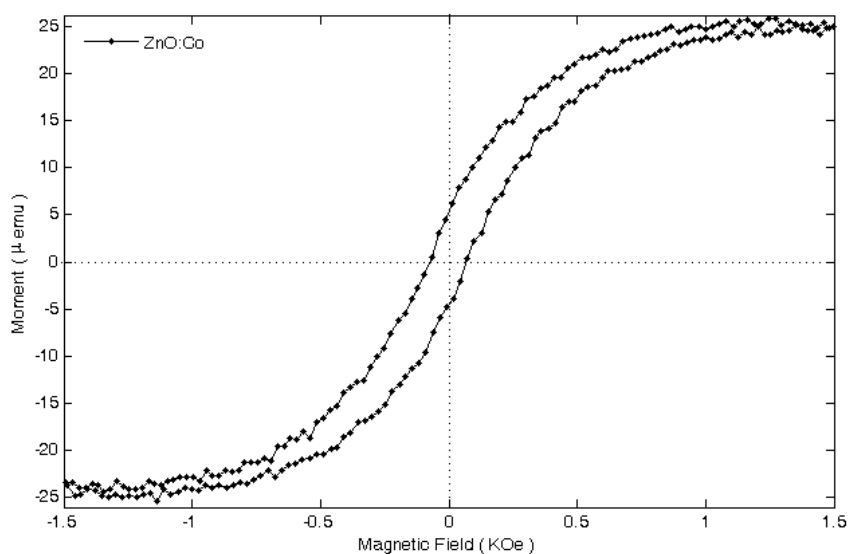
در شکل (۵-۴۵) حلقه پسماند نمونه آلاییده با آهن نشان داده شده است که در این شکل به طور واضح حلقه پسماند مشاهده می گردد. میدان مغناطیس زدا برابر $118/28 \text{ Oe}$ و این نمونه در میدان حدود 1000 Oe به حالت اشباع می رسد.



شکل (۵-۴۵): حلقه پسماند اکسید روی آلاییده با آهن در دمای اتاق.

۵-۸-۴) منحنی پسماند اکسید روی با آرایش کبالت

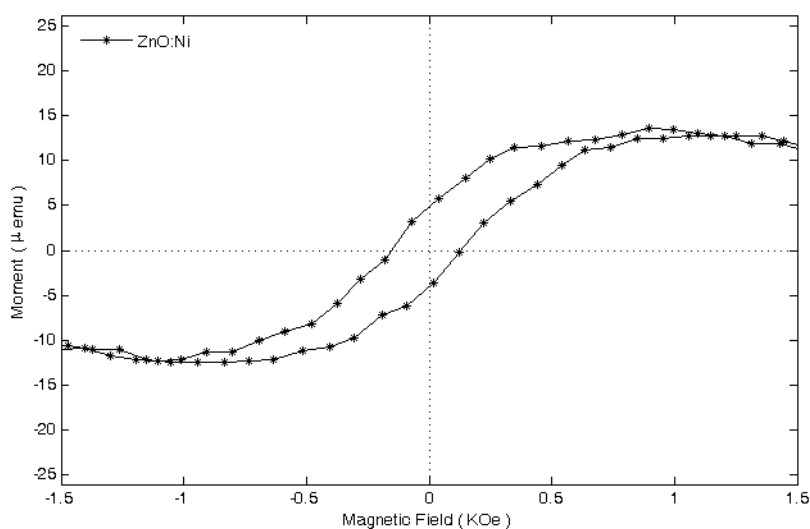
حلقه پسماند اکسید روی آرایش یافته با کبالت در شکل (۵-۴۶) نشان داده شده است. حلقه پسماند در دمای اتاق نشانگر خاصیت فرومغناطیسی نمونه است. مقادیر میدان مغناطیس زدا و گشتاور اشباع با نمونه قبلی متفاوت می باشد. مقادیر میدان مغناطیس زدا، گشتاور مغناطیسی خودبخودی و اشباع آن در جدول (۵-۳) ذکر شده است.



شکل (۴۶-۵): حلقه پسماند اکسید روی آلاییده با کبالت در دمای اتاق.

۵-۸-۵ حلقه پسماند اکسید روی با آرایش نیکل

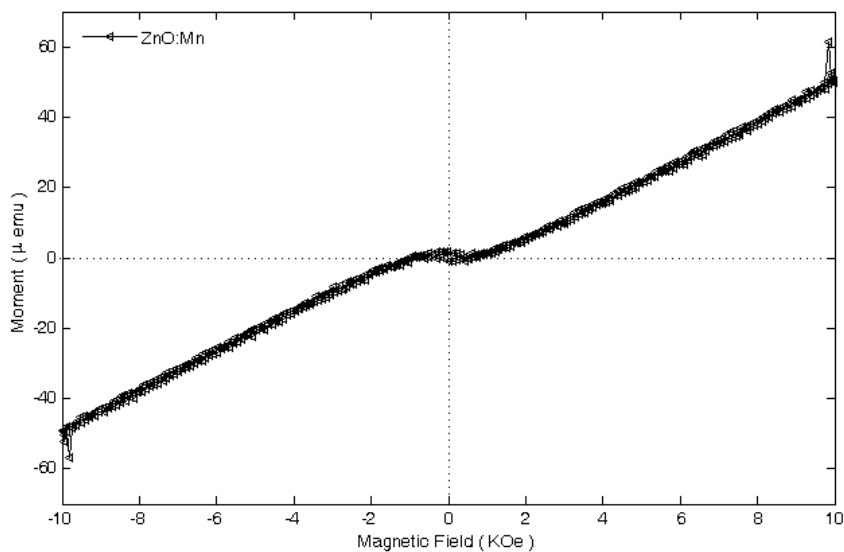
گشتاور مغناطیسی نمونه آرایش یافته با نیکل بر حسب میدان مغناطیسی برای چرخه افزایش و کاهش میدان در شکل (۴۷-۵) آورده شده است. مشابه نمونه های دیگر برای این نمونه نیز حلقه پسماند و مغناطش اشباع قابل مشاهده است. نتایج استخراج شده از شکل در جدول (۳-۵) آورده شده است.



شکل (۴۷-۵): حلقه پسماند اکسید روی آلاییده با نیکل در دمای اتاق.

۵-۸-۶) خواص مغناطیسی اکسید روی با آلایش منگنز

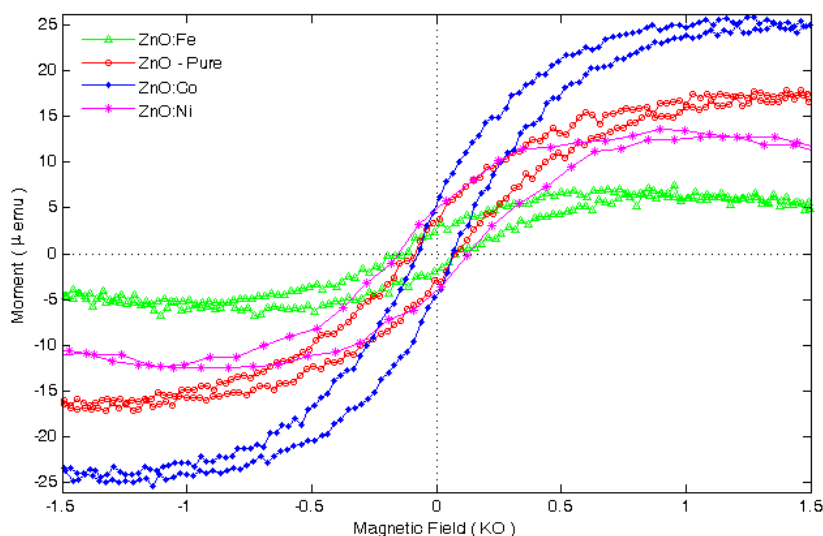
حلقه پسماند نمونه ZnO:Mn در دمای اتاق در شکل (۵-۴۸) نشان داده شده است. همانطوری که از شکل دیده می شود تا میدانهای به بزرگی ۱۰۰۰۰ Oe هم نمونه حالت اشباع از خود نشان نمی دهد و هیچ حلقه پسماندی مشاهده نمی گردد. این شکل نشانگر این واقعیت است که نمونه در دمای اتاق خاصیت پارامغناطیسی دارد.



شکل (۵-۴۸): حلقه پسماند اکسید روی آلاییده با منگنز در دمای اتاق.

۵-۸-۷) جمع بندی نتایج

جهت مقایسه داده ها، حلقه پسماند نمونه های مطالعه شده در شکل (۵-۴۹) رسم شده است. همچنین نتایج استخراج شده از این منحنی ها در جدول (۵-۳) آورده شده است. مقایسه میدان مغناطیس زدای نمونه های دارای آلایش و بدون آلایش نشان می دهد که نمونه با آلایش کبالت دارای کمترین مقدار میدان مغناطیس زدا و نیکل دارای بیشترین مقدار است، لیکن گشتاور مغناطیسی اشباع و خود بخودی نمونه با آلایش کبالت دارای بیشترین مقدار نسبت به دیگر نمونه ها است.



شکل (۵-۴۹): حلقه پسماند اکسید روی خالص و آلاییده با آهن، کبالت و نیکل در دمای اتاق.

جدول (۵-۳): ویژگیهای مغناطیسی اکسید روی خالص و آلاییده شده با آهن، کبالت، منگنز و نیکل در دمای اتاق.

ZnO:Ni	ZnO:Co	ZnO:Fe	ZnO:Mn	ZnO-Pure	ویژه گیهای مغناطیسی	
۳۰۰					دما (درجه کلوین)	
					خاصیت مغناطیسی مشاهده شده	
فرومغناطیس	فرومغناطیس	فرومغناطیس	پارامغناطیس	فرومغناطیس	میدان مغناطیس زدا (Oe)	
۱۴۹/۳۲۸۹۸	۷۴/۸۲۳۶۸	۱۱۸/۲۸۲۵۸	-	۸۴/۰۷۱۴۹		
۱۲/۷۶	۲۵	۶/۵۹۶	-	۱۷/۴	اشباع	
۵/۰۳	۵/۳۳	۲/۶۸	-	۳/۴۶	گشتاور مغناطیسی (μ emu) خود بخودی	

ویژگیهای مغناطیسی اکسید روی خالص و آلاییده با عناصر واسطه توسط دیگر گروهها نیز گزارش شده است. نکته ای که در اینجا بایستی بدان توجه نمود این است که ویژگیهای مغناطیسی گزارش شده برای یک آلایش خالص نیز ممکن است متفاوت باشد زیرا این ویژگیها عموماً به روش رشد، نوع ساختار و شرایط محیطی وابسته هستند.

گروه توتا^۱ و همکاران با روش سل-ژل نمونه های پودری اکسید روی خالص و آلایش یافته با نیکل، کبالت و منگنز را تهیه نمودند [۶۹]. اندازه ذرات گزارش شده توسط این گروه برای نمونه های دارای آلایش ۲ درصد از عناصر فوق و بدون آلایش بین ۱۵-۱۸ نانو متر بوده است. آنها خاصیت فرومغناطیسی را تنها برای نمونه آلایش یافته با نیکل در دمای اتاق مشاهده کرده اند و حلقه

¹ Subhash Thota

پسماندی برای نمونه های با این درصد آلیش از عناصر منگنز و کبالت مشاهده ننموده اند. در جدول (۴-۵) نتایج کار آنها آورده شده است. همانطور که این نتایج نشان می دهد برای نمونه با آلیش حدود ۵ درصد که نزدیک به درصد آلیش نمونه مورد مطالعه در این رساله است، میدان مغناطیس زدا در دمای ۳۲۰ کلوین حدود ۱۹۴ اورستد است که از مقدار بدست آمده برای لایه های نازک مطالعه شده در این رساله (حدود ۱۴۹ اورستد) بیشتر می باشد.

جدول (۴-۵): کمیت‌های مغناطیسی نمونه پودری آلیش یافته با درصدهای مختلف نیکل مربوط به گروه توتا [۶۹].
 H_c میدان مغناطیس زدا، M_s مغناطش اشباع و M_r مغناطش خودبخودی.

نمونه	دما(کلوین)	H_c (Oe)	M_s ($emug^{-1}$)	M_r ($emug^{-1}$)
$Zn_{0.95}Ni_{0.5}O$	۱۰	۶۶۰	۱/۴۰۷	۰/۱۱۸
$Zn_{0.85}Ni_{0.15}O$	۱۰	۷۹۳	۱/۶۶۱	۰/۱۲۸
$Zn_{0.75}Ni_{0.25}O$	۱۰	۸۷۹	۲/۸۶۱	۰/۲۰۰
$Zn_{0.95}Ni_{0.5}O$	۳۲۰	۱۹۴	۰/۱۸۰	۰/۰۳۸
$Zn_{0.85}Ni_{0.15}O$	۳۲۰	۲۱۹	۰/۲۱۸	۰/۰۴۲
$Zn_{0.75}Ni_{0.25}O$	۳۲۰	۲۶۷	۰/۹۸۸	۰/۰۵۴

در نمونه های کپه ای اکسید روی آلیش یافته با ۲ و ۴ درصد از عنصر منگنز، گروه سینگهال^۱ و همکاران مشاهده نمودند که تنها نمونه شامل ۲ درصد آلیش دارای خاصیت فرو مغناطیسی در دمای اتاق می باشد. آنها دلیل این مسئله را وجود منگنز با ظرفیتهای ۳ و ۴ در نمونه با آلیش بیشتر می دانند که باعث می شود خاصیت فرومغناطیسی در این نمونه ها دیده نشود [۱۰۴].

همچنین گروه لیو^۲ و همکاران نیز نانو ذرات $Zn_{0.97}Fe_{0.03}O$ با اندازه ذرات حدود ۴۰ nm را به روش سل- ژل رشد دادند [۱۰۵]. نمونه های آماده شده توسط این گروه حلقه پسماند با مغناطش اشباع در حدود $0.13 \mu_B$ بر اتم آهن در دمای اتاق نشان می دهد. آنها با اندازه گیری تغییرات مغناطش بر حسب دما، دمای کوری این نمونه ها را حدود ۳۳۵ کلوین بدست آورده اند. میدان مغناطیس زدای

¹ R.K. Singhal

² H. Liu

نمونه حدود ۱۰۰ اورستد گزارش شده که خیلی نزدیک به نتیجه گزارش شده در جدول (۵-۳) می باشد.

نتایج حاصل از کار گروه جیون یانگ^۱ و همکاران نیز در جدول (۵-۵) آورده شده است. نمونه های مورد مطالعه این گروه به شکل پودر بوده اند که به روش سل-ژل آماده شده اند [۱۰۶]. لازم به ذکر است که این نمونه ها در حضور گاز آرگون و هیدروژن بازپخت شده اند. میدان مغناطیس زدای گزارش شده برای این نمونه ها در دمای ۲۹۵ کلوین بین ۲۰۰ تا ۲۲۰ اورستد است.

جدول (۵-۵): گشتاور مغناطیسی نمونه های آلیش یافته با درصد های مختلف آهن در دماهای ۶۲ و ۲۹۵ کلوین مربوط به گروه جیون یانگ [۱۰۶].

درصد آلیش	M(μ_B/Fe) ۶۲ کلوین	M(μ_B/Fe) ۲۹۵ کلوین
۰/۰۱	۰/۰۶۸	۰/۰۲۹
۰/۰۳	۰/۰۸۱	۰/۰۳۳
۰/۰۵	۰/۱۰۹	۰/۰۵۳
۰/۰۷	۰/۱۵۶	۰/۰۹۹
۰/۱۰	۰/۰۹۹	۰/۰۵۵

گروه جی یانگ در مطالعه نمونه های پودری تهیه شده به روش سل-ژل با درصد های مختلف ۳ و ۵ و ۱۰ در دمای اتاق خاصیت فرومغناطیسی را مشاهده نموده اند اما نمونه ها در دمای ۱۵۰ کلوین دارای حلقه پسماند با میدان مغناطیس زدای ۱۸۰ اورستد هستند.

همچنین پودر های حاصله از روش سل-ژل مربوط به نمونه های $Zn_{1-x}Co_xO$ آماده شده با درصد های مختلف ۳، ۵ و ۱۰ توسط گروه جی یانگ^۲ خاصیت مغناطیسی در دماهای گوناگون از خود نشان داده اند. در دمای اتاق تمام نمونه های مطالعه شده تا میدان مغناطیسی ۱۵ کیلو اورستد خاصیت پارامغناطیسی از خود نشان می دهند. برای نمونه دارای آلیش ۵ درصد در دمای ۱۵۰ کلوین حلقه

¹ Geun Young Ahn
² J.H. Yang

پسماند مشاهده شده است. گشتاور مغناطیسی اشباع (خودبخودی) این نمونه $0.1 \mu_B$ (0.02 emu/g)

بر اتم کبالت گزارش شده است. میدان مغناطیس زدا بیش از ۱۸۰ اورستد بوده است [۱۰۷].

خاصیت فرومغناطیسی در دمای اتاق برای نمونه هائی که در این رساله آماده و مطالعه شده اند جالب توجه است. زیرا برای کاربرد DMS ها در اسپینترونیک نیاز به دمای کوری در حدود دمای اتاق یا بالاتر است. با توجه به حساسیت روش سل-ژل به شرایط و پارامترهای محیطی بایستی مطالعات بیشتری صورت پذیرد تا اینکه بتوانیم نمونه هایی با خواص مشاهده شده و کیفیت بهتر را دوباره رشد و تکرار کنیم. با توجه به مطالعات انجام شده در این رساله برای تکمیل این کار موارد زیر پیشنهاد می گردد:

الف) تهیه نمونه های بیشتر با روش سل-ژل و مطالعه خواص مغناطیسی آنها برای بررسی تکرار پذیر بودن نتایج بدست آمده.

ب) رشد لایه های $Zn_{1-x}TM_xO$ با تغییر درصد آرایش از هر عنصر واسطه و بررسی مجدد خواص فیزیکی و مقایسه نتایج.

ج) بررسی چگونگی تغییر خواص مغناطیسی لایه های آماده شده در اثر تغییر ضخامت لایه ها.

د) مطالعه تئوری مکانیزم مربوط به خواص مغناطیسی مشاهده شده به منظور تحلیل بهتر نتایج تجربی بدست آمده.

فصل ششم

محاسبهٔ تحرک الکترون در DMS

همه حاملها (الکترون/حفره) که تحت پتانسیل تناوبی بلور بدون هیچگونه نیروی خارجی در یک بلور حرکت می کنند دارای سرعت ثابتی هستند. زمانی که نیروئی (الکتریکی، مغناطیسی یا میدانهای گرمائی) به حاملهای بار تزریقی اعمال شود، تابع توزیع حاملها تغییر می کند و پراکندگی رخ می دهد [۱۰۸]. در دیدگاه کلاسیکی این نیرو باعث تغییر شتاب حاملها می شود ولی در مکانیک کوانتومی باعث انتقال حالت حامل از یک حالت کوانتومی بلاخ به به حالت کوانتومی مجاز دیگر می شود. چون عوامل پتانسیل پراکندگی در قیاس با پتانسیل اصلی بلور کوچک هستند، می توان از تئوری اختلال کوانتومی استفاده کرد. امروزه مکانیزم پراکندگی در نیمرساناهای ساختار حجمی پدیده شناخته شده ای است و می توان آنها را به دو دسته ذاتی و غیر ذاتی تقسیم کرد. پتانسیل های پراکندگی در مکانیزم ذاتی بطور غیر عمد و با رشد حجمی بلور بطور طبیعی بوجود می آیند. ارتعاشات فونونی (نوری [۱۰۹] و صوتی [۱۱۰]) و پیزوالکتریک [۱۱۱] نمونه ای از مکانیزم های ذاتی هستند. پتانسیلهای پراکندگی غیر ذاتی بطور عمده همراه با رشد حجمی بلور بوجود می آیند. پراکندگی از ناخالصیهای یونی [۱۱۲]، ناخالصیهای خنثی [۱۱۳]، نواقض نقطه ای و عدم حضور یونها در شبکه [۱۱۴] نمونه هایی از پتانسیلهای پراکندگی غیر ذاتی هستند. در ساختار کوانتومی [۱۱۵]، مکانیزم های دیگر پراکندگی همچون زبری فصل مشترکها [۱۱۶]، اثر آلیاژی شدن چاه ها [۱۱۷] و غیره را می توان نام برد. حاملهای بار در نیمرسانا با زمان واهلش، میانگین میسر آزاد و تحرک پذیری مشخص می شوند. تحرک پذیری الکترون که متناسب با میانگین زمان واهلش است یک کمیت مثبت میکروسکوپی و ماکروسکوپی می باشد. تحرک پذیری حامل بار طبق تعریف برابر با میانگین سرعت سوق الکترون در واحد میدان الکتریکی با واحد $(\text{cm})^2/(\text{V}\cdot\text{s})$ است. توصیف میکروسکوپی آن $(e\langle\tau\rangle/m^*)$ به دو پارامتر مهم فیزیکی زمان واهلش و جرم مؤثر حامل وابسته است. اساساً جرم مؤثر به ویژگیهای خالص ماده وابسته می باشد حال آنکه زمان واهلش قویاً به نوع پتانسیل برهمکنش وابسته است. در پراکندگی کوانتومی، حاملها از حالت کوانتومی بلاخ $|nk\rangle$ به حالت

کوانتومی بلاخ مجاز دیگر $|n'k'\rangle$ منتقل می شود. برای انتقال بین نواری $n = n'$ است. اگر از پراکندگی چندگانه صرف نظر شود تقریب بور در مکانیک کوانتومی صادق است. نرخ پراکندگی در مکانیک کوانتومی توسط رابطه پلائی فرمی بیان می شود که برابر است با [۱]:

$$W(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \mathbf{k}' | H_s(\mathbf{r}) | \mathbf{k} \rangle|^2 \delta(E_{k'} - E_k) \quad (1-6)$$

که در آن $H_s(\mathbf{r})$ پتانسیل پراکندگی و δ تابع دیراک می باشند که نشان می دهد برخورد از نوع کشسان است. با توجه به تابع موج بلاخ حامل $|\mathbf{k}\rangle$ که ترکیبی از یک موج تخت و یک تابع تناوبی $u_k(\mathbf{r})$ است، عناصر ماتریس در معادله (۱-۶) را می توان بصورت زیر نوشت:

$$\langle \mathbf{k}' | H_s(\mathbf{r}) | \mathbf{k} \rangle = \int e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}} u_{k'}^*(\mathbf{r}) u_k(\mathbf{r}) H_s(\mathbf{r}) d^3r \quad (2-6)$$

از آنجای که $u_k(\mathbf{r})$ و $u_{k'}(\mathbf{r})$ توابع تناوبی از Γ هستند پس حاصل ضرب آنها $u_k^*(\mathbf{r}) u_{k'}(\mathbf{r})$ نیز تابع تناوبی از Γ خواهد بود و می توان آن را بر حسب سری فوریه بسط داد:

$$u_{k'}^*(\mathbf{r}) u_k(\mathbf{r}) = \sum_G e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}} B_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}(\mathbf{G}) \quad (3-6)$$

که

$$B_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}(\mathbf{G}) = \frac{1}{\Omega} \int e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{r}} u_{k'}^*(\mathbf{r}) u_k(\mathbf{r}) d^3r \quad (4-6)$$

که در این رابطه \mathbf{G} بردار انتقال شبکه وارون در ساختار بلوری است. با استفاده از معادله (۳-۶)، می توان معادله (۲-۶) را به شکل زیر باز نویسی کرد:

$$\langle \mathbf{k}' | H_s(\mathbf{r}) | \mathbf{k} \rangle = \sum_G B_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}(\mathbf{G}) \int e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{G}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{r}} H_s(\mathbf{r}) d^3r \quad (5-6)$$

با توجه به $e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}$ ، $\mathbf{q} = \mathbf{k} + \mathbf{G} - \mathbf{k}'$ را می توان به صورت زیر نوشت:

$$e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} = \sum_l i^l (2l+1) j_l(qr) P_l(\hat{\mathbf{q}}\cdot\hat{\mathbf{r}}) \quad (6-6)$$

با قرار دادن رابطه (۶-۶) در رابطه (۵-۶) داریم:

$$\langle \mathbf{k}' | H_s(\mathbf{r}) | \mathbf{k} \rangle = \sum_l \sum_G i^l (2l+1) B_{\mathbf{k}'\mathbf{k}}(\mathbf{G}) \int j_l(qr) P_l(\hat{\mathbf{q}}\cdot\hat{\mathbf{r}}) H_s(\mathbf{r}) d^3r \quad (7-6)$$

اگر پتانسیل برهمکنشی ضعیف و نسبت به پارامترهای دیگر به آرامی تغییر کند، تمام ضرایب بسط در معادله (۶-۷) بجز $G = 0$ برابر صفر است. اگر تابع تناوبی $u_k(\mathbf{r})$ وابستگی ضعیفی به k در نزدیکی لبه جذب نواری داشته باشد می توان از $u_k(\mathbf{r})$ بجای $u_{k'}(\mathbf{r})$ استفاده کرد. از رابطه (۶-۴) می توان نتیجه گرفت که $B_{k'k}(0) \approx 1/\Omega$ است. پس داریم:

$$\langle \mathbf{k}' | H_s(\mathbf{r}) | \mathbf{k} \rangle = \frac{1}{\Omega} \sum_l i^l (2l+1) \int j_l(qr) P_l(\hat{\mathbf{q}} \cdot \hat{\mathbf{r}}) H_s(\mathbf{r}) d^3r \quad (۸-۶)$$

۲-۶ پتانسیل پراکندگی تبادلی

در مواد DMS، نوعی دیگر از پتانسیل پراکندگی وجود دارد که منشاء آن گشتاور مغناطیسی جایگزیده اتمهای مغناطیسی است. برهمکنش تبادلی بین گشتاور مغناطیسی اتمهای مغناطیسی آلائیده و حاملهای متحرک ماده میزبان سبب واهلش اسپینی شده و جهت اسپین حاملها را تغییر می دهد. استتار پتانسیل کولنی اتمهای ناخالصی سبب جفت شدگی حالتیهای الکترونی مختلف می شود. غلظت آلایش اتم مغناطیسی در مواد DMS تقریباً کم است ولی پتانسیلهای برهمکنش تبادلی و نیز ناخالصی از پتانسیل برهمکنش های دیگر همچون پتانسیل برهمکنش فونونی خصوصاً در دمای پائین بسیار قوی تر است. زمانی که عناصر واسطه همچون آهن، کبالت، منگنز، کروم در جایگاه یکی از اتمهای ماده میزبان قرار گیرند دو نوع پتانسیل برهمکنشی الکتریکی و مغناطیسی بوجود می آید که هر یک بطور جداگانه در تحرک پذیری الکترونها نقش داشته و باید بطور مستقل محاسبه شوند. در اینجا ما تنها سهم مغناطیسی در فاز پارامغناطیس را بررسی می کنیم.

اگر برهمکنش بین اسپین حاملهای متحرک ماده با گشتاور مغناطیسی جایگزیده اتمهای عناصر واسطه وجود نداشته باشد، مواد DMS همانند نیمرساناهای غیرمغناطیسی هستند. علت تغییر خواص فیزیکی از جمله عامل لاندائوی بزرگ g ، اثر زمین بزرگ در شکافت گاف نواری، چرخش بزرگ فاراده و مقاومت مغناطیسی بزرگ نمونه های از برهمکنش بین اسپین حاملهای متحرک ماده با گشتاور

مغناطیسی جایگزیده اتمهای عناصر واسطه می باشند. در نهایت باید گفت که گشتاور مغناطیسی جایگزیده اتمهای عناصر واسطه بسیار مهم است.

در این مطالعه ماده DMS را در فاز پارامغناطیس در نظر گرفته ایم که در عدم حضور میدان مغناطیسی، مغناطش خودبخودی وجود ندارد. زمانی که میدان مغناطیسی به ماده پارامغناطیس اعمال نشود جهت گیری مغناطش هر اتم تصادفی است. فرض شده که آرایش اتمهای مغناطیسی در ماده میزبان کم است، از اینرو از برهمکنش بین اتمهای مغناطیسی صرفنظر می شود و همچنین فرض می شود که توزیع اتمهای آلاییده یکنواخت باشد و هیچگونه خوشه هایی از اتمهای مغناطیسی در ماده میزبان وجود نداشته باشد. بعلاوه عدم وجود مغناطش خودبخودی و یا میدان خارجی، برای محاسبات برهمکنش بین حاملها و اتمها از تئوریهای دیگر همچون میدان متوسط نمی توان استفاده کرد. در چنین DMS هایی برای پتانسیل برهمکنش بین حاملهای نواری ماده میزبان با میدان مغناطیسی حاصل از اتمهای آلاییده از دو مدل برهمکنش گشتاور دو قطبی و مدل هایزنبرگ استفاده شده است.

۶-۲-۱) برهمکنش دوقطبی - دوقطبی

زمانی که یکی از اتمهای عناصر واسطه همچون منگنز، کروم و آهن در نیمرسانائی آلاییده می شود، پتانسیل برهمکنش تبدالی بین الکترون جایگزیده لایه d (باسپین s ، گشتاور زاویه ای L و گشتاور کل J) یون مغناطیسی و حالتها ی غیر جایگزیده s و p اتم میزبان بوجود می آید. عامل g لاندائو طبق تعریف برابر است با:

$$g = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)} \quad (۹-۶)$$

گشتاور زاویه ای کل یون مغناطیسی برابر با $\mu_l = -\frac{g_l \mu_B}{\hbar} \mathbf{J}$ است که $\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_0}$ گشتاور مغناطیسی بور می باشد. برای هر الکترون غیر جایگزیده نواری g_0 برابر با دو و گشتاور مغناطیسی آن برابر

است. بعلت سنگین بودن جرم هسته یون مغناطیسی در مقابل جرم الکترون نواری اتم $\mu_e = -\frac{2\mu_B}{\hbar} \mathbf{s}$

میزبان از جابجائی آن صرف نظر می شود و بعنوان مبدأ مختصات در نظر گرفته می شود. هامیلتونی

برهمکنش دو قطبی - دوقطبی را می توان بصورت زیر نوشت:

$$H = -\frac{8\pi}{3} \mu_e \cdot \mu_l \delta(\mathbf{r}) + \frac{\mu_e \cdot \mu_l}{r^3} - 3 \frac{(\mu_e \cdot \mathbf{r})(\mu_l \cdot \mathbf{r})}{r^5} \quad (10-6)$$

$$= H_1 + H_2 + H_3$$

هامیلتونی برهمکنش دوقطبی - دو قطبی از سه جمله تشکیل شده است که سهم هر یک باید بطور

جداگانه محاسبه شود. در پراکندهگیهای کشسان که انرژی جنبشی ثابت است سهم تحرک پذیری

الکترون برای جمله دوم معادله (10-6) صفر است و هیچ نقشی در آن ندارد. عناصر ماتریسی برای

جمله اول برابر است با:

$$\langle \mathbf{k}' | H_1(\mathbf{r}) | \mathbf{k} \rangle = -\frac{8\pi}{3\Omega} g_l \mu_B^2 2 \left(\frac{S \cdot J}{\hbar^2} \right) \quad (11-6)$$

$$= -\frac{8\pi}{3\Omega} g_l \mu_B^2 \left[F(F+1) - J(J+1) - \frac{3}{4} \right]$$

در اینجا $F = s + J$ گشتاور کل، $s = 1/2$ و Ω حجم است. جدول (1-6) حالت های مختلف عناصر

ماتریسی $\langle \mathbf{k}' | H_1(\mathbf{r}) | \mathbf{k} \rangle$ را نشان می دهد. برای Mn^{2+} و Fe^{3+} آرایش پایه الکترونی، حالت پایه و

عامل g به ترتیب برابر با $6S_{5/2}$ ، $3d5$ و 2 است. برای $S = 1/2$ و $I = 5/2$ ، اسپین کل برابر با 3 (هفتگانه)

و 2 (پنجگانه) است. به ازای F برابر 2 و 3 مقدار داخل کروشه به ترتیب برابر $-\frac{7}{4}$ و $-\frac{5}{4}$ خواهد شد.

برای عناصر ماتریسی $\langle \mathbf{k}' | H_3(\mathbf{r}) | \mathbf{k} \rangle$ می توان نوشت:

$$\langle \mathbf{k}' | H_3(\mathbf{r}) | \mathbf{k} \rangle = \left(\frac{-6\mu_B^2 g_l}{r^3} \right) \frac{(\mathbf{s} \cdot \mathbf{r}_o)(\mathbf{J} \cdot \mathbf{r}_o)}{\hbar^2} \quad (12-6)$$

در اینجا \mathbf{r}_o بردار واحد مکان الکترون تا یون مغناطیسی است:

$$\hat{\mathbf{r}}_o = (\sin \theta \cos \phi) \hat{\mathbf{i}} + (\sin \theta \sin \phi) \hat{\mathbf{j}} + \cos \theta \hat{\mathbf{k}} \quad (13-6)$$

جدول (۶-۱): نمایش عناصر ماتریسی $\langle \mathbf{k}' | H_1(\mathbf{r}) | \mathbf{k} \rangle$ برای یونهای گروه $3d$.

یون مغناطیسی	آرایش پایه	حالت پایه	g لاندائو	گشتاور کل		$g_l \left[F(F+1) - J(J+1) - \frac{3}{4} \right]$
				گشتاور کل	گشتاور کل	
Ti^{+3}, V^{+4}	$3d^1$	${}^2D_{3/2}$	4/5	1, 2	1	-18/5
					2	6/5
V^{+3}	$3d^2$	3F_2	2/3	3/2, 5/2	3/2	-10/3
					5/2	4/3
V^{+2}, Cr^{+3}, Mn^{+4}	$3d^3$	${}^4F_{3/2}$	2/5	1, 2	1	-5/3
					2	3/5
Cr^{+2}, Mn^{+3}	$3d^4$	5D_0	3/2	1/2	1/2	0
Mn^{+2}, Fe^{+3}	$3d^5$	${}^6S_{5/2}$	2	2, 3	2	-7
					3	5
Fe^{+2}	$3d^6$	5D_4	3/2	7/2, 9/2	7/2	-15/2
					9/2	6
Co^{+2}	$3d^7$	${}^4F_{9/2}$	4/3	4, 5	4	-22/3
					5	6
Ni^{+2}	$3d^8$	3F_4	5/4	7/2, 9/2	7/2	-25/4
					9/2	5
Cu^{+2}	$3d^9$	${}^2D_{5/2}$	6/5	2, 3	2	-21/5
					3	3

با توجه به عملگر $\mathbf{J} = J_x \hat{i} + J_y \hat{j} + J_z \hat{k}$ و عملگر بالابرنده (J_+) و پائین آورنده (J_-)

($J_{\pm} = J_x \pm iJ_y$) و همچنین روابط

$$\sin(\phi) = \frac{1}{2i} (e^{i\phi} - e^{-i\phi}) \longrightarrow \sin^2(\phi) = -\frac{1}{4} (e^{2i\phi} + e^{-2i\phi} - 2)$$

$$\cos(\phi) = \frac{1}{2} (e^{i\phi} + e^{-i\phi}) \longrightarrow \cos^2(\phi) = \frac{1}{4} (e^{2i\phi} + e^{-2i\phi} + 2) \quad (۱۴-۶)$$

برای ($\mathbf{J} \cdot \mathbf{r}_o$) می توان نوشت:

$$(\mathbf{J} \cdot \mathbf{r}_o) = \left(\frac{\sin \theta e^{i\phi}}{2} \right) J_- + \left(\frac{\sin \theta e^{-i\phi}}{2} \right) J_+ + \cos \theta J_z \quad (۱۵-۶)$$

تمام این روابط برای رابطه ($\mathbf{s} \cdot \mathbf{r}_o$) نیز صادق است کافی است بجای \mathbf{J} عبارت \mathbf{S} قرار گیرد. ضرب

$(\mathbf{s} \cdot \mathbf{r}_o)(\mathbf{J} \cdot \mathbf{r}_o)$ نه جمله را در بر می گیرد که عبارت است از:

$$\begin{aligned}
(\mathbf{s} \cdot \mathbf{r}_o)(\mathbf{J} \cdot \mathbf{r}_o) &= \sqrt{\frac{2\pi}{15}} Y_{22} s_- J_- + \sqrt{\frac{2\pi}{15}} Y_{22}^* s_+ J_+ \\
&+ \left(\sqrt{\frac{16\pi}{45}} Y_{20} + 3 \right) s_z J_z - \sqrt{\frac{2\pi}{15}} Y_{21}^* (s_z J_+ + s_+ J_z) \\
&- \sqrt{\frac{2\pi}{15}} Y_{21} (s_z J_- + s_- J_z) - \left(\sqrt{\frac{4\pi}{45}} Y_{20} + \frac{1}{2} \right) (s_- J_+ + s_+ J_-)
\end{aligned} \quad (16-6)$$

که Y_{im} تابع هارمونیک کروی است. با استفاده از رابطه (۸-۶)، (۶-۱۲) و (۶-۱۵) محاسبات نشان می دهد که عناصر ماتریسی $\langle \mathbf{k}' | H_3(\mathbf{r}) | \mathbf{k} \rangle$ در تقریب اول پراکندگی برابر صفر است و هیچ نقشی در تحرک الکترونها ندارد. نرخ پراکندگی کل با توجه به کل یون مغناطیسی (N_I) برابر است با:

$$W(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{128\pi^3 g_I^2 \mu_B^4}{9\hbar\Omega} n_I \left[F(F+1) - J(J+1) - \frac{3}{4} \right]^2 \delta(E_{\mathbf{k}'} - E_{\mathbf{k}}) \quad (17-6)$$

n_I غلظت یون مغناطیسی طبق تعریف برابر با N_I/Ω است. برای نیمرسانائی با نواری انرژی سهمی شکل، زمان واهلش برابر است با [۱]:

$$\begin{aligned}
\frac{1}{\tau(E_k)} &= \sum_m \int W(k, k') [1 - \cos\theta_{kk'}] \frac{d^3 k'}{(2\pi)^3} d^3 r \\
(2F+1) \frac{\pi\Omega}{(2\pi)^3} \left(\frac{2m^*}{\hbar^2} \right)^{3/2} \int W(k, k') [1 - \cos\theta_{kk'}] E'^{1/2} dE' d(\cos\theta) & \quad (18-6) \\
\frac{(2F+1)16\pi g_I^2 \mu_B^4}{9\hbar} n_I [F(F+1) - J(J+1) - \frac{3}{4}]^2 \int \delta(E_{\mathbf{k}'} - E_{\mathbf{k}}) [1 - \cos\theta] E'^{1/2} dE' d\cos\theta &
\end{aligned}$$

m ویژه مقادیر عملگر $F_z = s_z + I_z$ است. برای یک حالت خاص F ، $2F+1$ حالت مجاز وجود دارد که انرژی همه آنها یکسان است. با در نظر گرفتن جهت محور قطبی در راستای بردار \mathbf{k} می توان قسمت زایه ای را محاسبه کرد.

$$\frac{1}{\tau(E_k)} = \frac{(2F+1)32\pi g_I^2 \mu_B^4}{9\hbar} n_I [F(F+1) - J(J+1) - \frac{3}{4}]^2 E_k^{1/2} \quad (19-6)$$

طبق تعریف تحرک پذیری داریم:

$$\mu = \frac{e}{m^*} \langle \tau \rangle = \frac{\int \tau(E) f_0 E^{3/2} dE}{\int f_0 E^{3/2} dE} = \frac{e}{m^*} \frac{\int \tau(E) e^{-\beta E} E^{3/2} dE}{\int e^{-\beta E} E^{3/2} dE} \quad (20-6)$$

با توجه به رابطه (۶-۱۸)، تحرک پذیری الکترون را می توان محاسبه نمود که برابر است با:

$$\mu = \left\{ \frac{(2F+1)8\sqrt{\pi}g_i^2\mu_B^4}{3\hbar} n_i [F(F+1) - J(J+1) - \frac{3}{4}]^{-1} (k_B T)^{-1/2} \right\} \quad (21-6)$$

یعنی تحرک پذیری الکترون وابستگی $(T)^{-1/2}$ را نشان می دهد. هر چه دما کاهش می یابد تحرک پذیری الکترونها افزایش می یابد اما این افزایش توجیه فیزیکی ندارد. انتظار می رود هرچه دما کاهش یابد انرژی جنبشی حاملها کاسته شده و نرخ پراکندگی بعلت قوی تر شدن انرژی برهمکنش بیشتر و در نتیجه تحرک پذیری حاملها کاهش می یابد. از اینرو مدل برهمکنش گشتاور دو قطبی مدلی ریاضی مناسبی برای توصیف برهمکنش در مواد DMS در فاز پارامغناطیس نیست و نیازمند به استفاده از مدل دیگری هستیم.

۲-۲-۶) برهمکنش مدل هایزبرگ

هامیلتونی برهمکنش تبادل بین الکترون نواری با اسپین s با الکترونهای $3d$ یونهای مغناطیسی در مدل برهمکنش هایزبرگی بصورت زیر است:

$$H_s = \sum_i J(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \mathbf{I}_i \cdot \mathbf{s} \quad (22-6)$$

که بردارهای \mathbf{r} , \mathbf{R} , $J(\mathbf{r}-\mathbf{R})$ و \mathbf{I}_i به ترتیب مکان الکترون نواری ماده میزبان، مکان i امین جایگاه یون مغناطیسی، ضریب جفت شدگی تبادل بین آنها و گشتاور زاویه ای کل یون مغناطیسی هستند. در این مدل منشأ میدان مغناطیسی از گشتاورهای مغناطیسی و یا حلقه های جریان نیست که از معادلات ماکسول بدست آید بلکه منشأ مکانیک کوانتومی دارد (نیروهای تبادلی). بر اساس فرضیات قبلی هامیلتون برهمکنش تبادل را می توان به یک سیستم دو جسمی تقلیل داد:

$$H_s = J(\mathbf{r}) \mathbf{I} \cdot \mathbf{s} \quad (23-6)$$

بعلت غلظت پائین آرایش یونهای مغناطیسی می توان از برهمکنش مغناطیسی آنها در DMS صرف نظر کرد. در معادله (22-6) جمله $\mathbf{I} \cdot \mathbf{s}$ براحتی قابل محاسبه است اما خود انرژی الکترواستاتیکی $J(\mathbf{r})$ در مواد مختلف ساختار پیچیده ای دارد. در اینجا برای محاسبه تحرک پذیری الکترونها چندین نوع جفت شدگی در نظر گرفته شده است. جدول (2-6) محاسبات تحرک پذیری الکترونها برای

جفت شدگی نوعی را نشان می دهد. در محاسبات از معادلات (۱-۶)، (۲-۶)، (۹-۶) و (۱۵-۶) استفاده شده است. محاسبات تئوری همه پتانسیلها نشان می دهد که تحرک پذیری الکترون با کاهش (افزایش) دما کاهش (افزایش) می یابد. کاهش تحرک پذیری الکترون با کاهش دما به این حقیقت مربوط است که پتانسیل پراکندگی تبدالی برای حاملهای با انرژی کم، قوی تر از حاملهای با انرژی بالاتر است، از اینرو نرخ پراکندگی را افزایش می دهد. دمای بالا حاملهای سریعتری را تولید می کند در نتیجه نرخ پراکندگی را کاهش داده که خود باعث افزایش تحرک پذیری الکترونها می شود. عبارت دیگر پتانسیل برهمکنش تبدالی در دماهای بالا نسبت به دیگر پتانسیل ها، همچون پتانسیل برهمکنش فونونی، ضعیفتر می شود.

جدول (۲-۶): ضریب جفت شدگی تبدالی، عنصر ماتریسی و تحرک پذیری الکترون برای پتانسیلهای برهمکنشی گوناگون

$J(r, \theta, \varphi)$	عنصر ماتریسی	تحرک پذیری الکترون
$\frac{1}{r^2}$	$\left(\frac{2\pi^2}{\Omega}\right)\left(\frac{\mathbf{s}\cdot\mathbf{I}}{q}\right)$	$\frac{8 e \hbar^2}{3\pi^{1/2} (2m)^{3/2} n_l (2F+1) (\mathbf{s}\cdot\mathbf{I})^2} (k_B T)^{1/2}$
$e^{-\alpha r}$	$\frac{8\alpha}{\pi\Omega} \frac{(\mathbf{s}\cdot\mathbf{I})}{(\alpha^2 + q^2)^2}$	$\frac{12}{\pi} \left(\frac{2m}{\pi}\right)^{1/2} \frac{\alpha^2}{(2F+1) (\mathbf{s}\cdot\mathbf{I})^2 n_l} \left[\frac{(kT)^{3/2}}{1 - \frac{1+3\frac{T}{T_0}}{\left(1+\frac{T}{T_0}\right)^3}} \right], T_0 = \frac{\hbar^2 \alpha^2}{24mk}$
$j_{l'}(kr) Y_{l'm}$	$\frac{\pi \sqrt{4\pi(2l+1)}}{2\Omega} i^{l'} (\mathbf{s}\cdot\mathbf{I}) \frac{\delta(q-k)}{q^2}$	$\frac{140 e}{\pi^2 \hbar n_l (2F+1) (2l+1) (\mathbf{s}\cdot\mathbf{I})^2} (k_B T)^2$

۳-۶ نتیجه گیری

با در نظر گرفتن برهمکنش دوقطبی-دوقطبی نمی توان رفتار تحرک پذیری مواد DMS را در فاز پارامغناطیس توجیه نمود و باید از مدل هایزنبِرگ که منشأ کوانتومی دارد، استفاده کرد. بعلت فراوانی هم در مواد میزبان و هم در آرایش یونهای مغناطیسی، مواد DMS گوناگونی می توان تولید کرد که شکل ضریب جفت شدگی $J(\mathbf{r})$ گوناگون باشد بعبارت دیگر $J(\mathbf{r})$ قویاً با نوع DMS وابسته است. از اینرو قانون کلی برای تحرک پذیری الکترونها نمی توان پیدا کرد که در همه مواد DMS در فاز پارامغناطیس صادق باشد. نتایج محاسبات به راحتی اثر کاندو را پیش بینی می کنند. قابل توجه است که نتایج تنها در فاز پارامغناطیسی برای $(T \gg T_c)$ صادق است زیرا در فاز فرومغناطیس بعلت میدان مغناطیسی خودبخودی شکل برهمکنشها متفاوت خواهد بود در نتیجه شکل روابط تحرک پذیری الکترونها متفاوت خواهد شد.

پیوستها

معرفی نظری روش پوما (PUMA)

ضخامت یکی از مهمترین پارامترهای مربوط به یک لایه نازک است که خواص مختلف فیزیکی لایه مستقیماً به آن مربوط می شود. دانستن ضخامت لایه نازک امری ضروری است از اینرو روشهای مختلف اندازگیری تئوری و تجربی فراوانی وجود دارد. یکی از روشهای تئوری برای محاسبه ضخامت لایه ها استفاده از روش کمینه کردن غیر مقید نقاط و برازش آن با روابط کوشی است که توسط ایوان چامبولیرون^۱ و همکاران ارائه شده است که در مورد نیمرساناها و عایقها در ناحیه پراکندگی معتبر است [۸۲]. آنها با استفاده از بهینه سازی نقطه ای برای حداقل برازش مربع طیف های تراگسیل تجربی مقادیر ضریب شکست $n(\lambda)$ و ضریب میرایی $k(\lambda)$ محاسبه می شوند. در این روش با تغییر دادن مقادیر $n(\lambda)$ ، $k(\lambda)$ و d (ضخامت لایه نازک) برای هر طول موج (λ) جوابی برای معادله (الف-۱) بدست می آید.

$$T_m = \frac{Ax}{B - Cx + Dx^2} \quad (\text{الف-۱})$$

در این رابطه A ، B ، C ، D و φ برابر است با:

$$\begin{aligned} A &= \epsilon n_s (n^2 + k^2) \\ B &= [(n+1)^2 + k^2][(n+1)(n+n_s) + k^2] \\ C &= [(n^2 - 1 + k^2)(n^2 - n_s^2 + k^2) - 2k^2(n_s^2 + 1)]^2 \cos \varphi - \\ &\quad k[2(n^2 - n_s^2 + k^2) + (n_s^2 + 1)(n^2 - 1 + k^2)]^2 \sin \varphi \\ D &= [(n-1)^2 + k^2][(n-1)(n-n_s) + k^2] \\ \varphi &= \frac{4\pi nd}{\lambda} \end{aligned}$$

¹ Ivan Chambouleyron

n_s ضریب شکست زیر لایه است. مجموعه جوابهایی را که به ازاء آنها، عبارت

$$T_i, \sum_{i=1}^N [T_i - T_m(\lambda_i, n_i, s, d)]^2$$

مقدار تجربی تراگیسیل مربوط به i امین طول موج و N تعداد اندازه گیری هستند.

روش کار ما در این رساله بدین صورت است که پس از بدست آوردن طیف تراگیسیل در هر طول

موج، مقادیر ضرایب شکست ($1/3 \leq n \leq 4$) و خاموشی ($0 \leq k \leq 1$) در یک محدوده خاصی

اختیار می شوند. با در نظر گرفتن یک ضخامت تقریبی، مقدار طیف تراگیسیل را محاسبه کرده و

نمودار آن را رسم می کنیم. منحنی تراگیسیل تئوری و ضرائب اپتیکی بدست آمده را با استفاده از مدل

کوشی^۱ رابطه (الف-۲) برازش می کنیم.

$$n(\lambda) = A_n + \frac{B_n}{\lambda^r} + \frac{C_n}{\lambda^f} + \dots \quad (\text{الف-۲})$$

$$k(\lambda) = A_k + \frac{B_k}{\lambda^r} + \frac{C_k}{\lambda^f} + \dots$$

در روابط فوق، ضرائب A_n, B_n, C_n, \dots و پارامترهای برازش می باشند. با در نظر گرفتن حداقل خطا،

مقدار دقیق ضخامت و سایر ثوابت اپتیکی در هر طول موج خاصی بدست می آید. عمق نفوذ نیز از

رابطه (الف-۳) بدست می آید.

$$\delta = \frac{n \lambda}{k 2\pi} \quad (\text{الف-۳})$$

در این رابطه δ عمق نفوذ است.

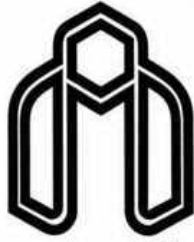
^۱Cauchy

-
- [1] Ashcroft, Neil W. Solid state physics, 1976 Saunders College Publishing.
- [2] Charles Kittel, Introduction to solid state physics, wiley Eastern Limited, 1983.
- [3] B.G Streetman, Solid State Electronic Devices, Third Edition, Prentice-Hall (1990).
- [4] J. Singh, Semiconductor Optoelectronics, Mc Grow-Hill Inc (1995.)
- [5] J. I. Pankove, E.I. Miller, J. E. Berkeyheiser, RCA. 32, 383 (1971).
- [6] B. Gil, Low-Dimensional Nitrid Semiconductors, Oxford Uni Press, First published (2002).
- [7] C.J. Brinker, G.W. Scherer, Sol-gel Science: The Physics and chemistry of Sol-Gel Processing, San Diego, CA: Academic press Inc , (1990).
- [8] C.W. Turner, Sol-Gel Process-principles and Application, Ceramic Bulletin, 70, 1487-1490, (1991).
- [9] C.W. Turner, Sol-Gel Process principles and Application, Ceramic Bulletin, 70, 1487-1490, (1991).
- [10] I.M. Thom, "Multicomponent Glass From The Sol-Gel Process", Springer Netherlands, (2004).
- [11] I.M. Thomas, Multicomponent Glass From The Sol-Gel Process 8, 2-16, (1998).
- [12] N.Bradley, D. Camana, Alkoxo and Aryloxo Derivatives of Metals, San Diego, CA: Academic Press Inc, 105-155, (2001).
- [13] W. Wang, Y. Qi, Z. Zhi, Smart Mater Struct. 16, 2673-2679, (2007).
- [14] M. Wang, J. Wang, Materials Chemistry and Physics 97, 219-225, (2006).
- [15] P.Yimsiria, M.R. Mackleyb, journal of Chemical Engineering Science 61, 3496–3505, (2006).
- [16] L.D. Landau, B.G. Levich, Acta Physiochim. U.R.S.S. 17, 36-42, (1942).
- [17] L.D. Landau, B.G. Levich, Acta Physiochim. U.R.S.S. 17, 36-42, (1942).
- [18] S. Gupta, J.C. McClure, V.P. Singh, Thin Solid Films 33, 293-299, (1997).
- [19] E. Warburg, T. Ihmori, Physics Chemistry N. F. 27, 481-485, (1886)
- [20] J.M. Luttinger and W. Kohn, Phys. Rev. 109, 1892 (1958)
- [21] I. M. Lifshitz, Soviet Phys. – JETP5, 1227 (1957).
- [22] C. Kittel, QUANTUM Theory of Solids, John Wiley & Sons.
- [23] G. Binash, P.Grunberg, F. Saurenbach, and W. Zinn, "Enhanced Magnetoresistance in Layered Magnetic Structures with Antiferromagnetic Interlayer Exchange.' Phys. Rev. B 39, 4828 (1989)
- [24] M. N. Baibich, J. M. Broto, A. Fert, F. Nguyen Van Dau, and F. Petroff. Phys. Rev. Lett., 61:2472, 1988.
- [25] N. F. Mott, Adv, Phys. 13, 325 (1964)
- [26] N. F. Mott, Proc. Royal Soc. 156, 368 (1936)
- [27] W. Oepts, M. A. M. Gijs, A. Reinders, and R. M. Jungblut, R. M. J. Van Gansewinkel, and W. J. M. de Jonge, Phys. Rev. B 53, 14024 (1996).
- [28] S. S. P. Parkin, A. Modak, and D. J. Smith, Phys. Rev B 47, 9136 (1993).
- [29] B. Dieny, V.S. Sperious, B. A. Gurney, S. S. P. Parkin, D. R. Wilhoit, K. P. Roche, S. Metin, D. T. Peterson, and S. Nadimi, J. Magn. Magn. Mat. 93, 101 (1991).

-
- [30] R. Schad. P. Belien, G. Verbanck, V. V. Moshchalkov, Y. Bruynseraede, H. E. Fischer, S. Lefebvre, and B. Bessiere, *Phys. Rev. B* 59, 1242 (1999).
- [31] R. Schad. P. Belien, G. Verbanck, C. D. Potter, H. E. Fischer, S. Lefebvre, and B. Bessiere, V. V. Moshchalkov, and Y. Bruynseraede, *Physics. Rev. B* 57, 13692 (1998)
- [32] S. S. P. Parkin, *Phys. Rev. Lett.* 71, 1641 (1993).
- [33] L. B. Steren, R. Morel, A. Barthelemy, F. Petroff, A. Fert, P. Holody, R. Loloee, and P. A. Schroeder, *J. Magn. Magn. Mat.* 140-144, 495 (1995).
- [34] L. B. Steren, A. Barthelemy, J. L. Duvail, A. Fert, R. Morel, F. Petroff, P. Holody, R. Loloee, and P. A. Schroeder, *Phys. Rev. B* 51, 292 (1995).
- [35] H. Ehrenreich, F. Spaepen, Vol, 56, Academic press, 2001, pp. 113-237
- [36] R.R. Galazka. *Inst. Phys. Conf. Ser.*,43:133, 1979.
- [37] Igor Zutic, Jaroslav Fabian, and S.Das Sarma. *Spintronics: Fundamentals and applications. Rev. Mod. Phys.*, 76:323, 2004.
- [38] G. Bauer, J. Kossut, R. Faymonville and R. Dornhasus, 1985, *Phys. Rev B* 31, 2040.
- [39] J. K. Furdyna, 1988, *Appl. Phys.* 64, R29.
- [40] Zheng, X. L, *Conf. Phys. Semicond.* World Scientific, Singapore.
- [41] Langer, J., Delerue, C., Lannoo, M., and Heinrich, H. (1988). *Phys. Rev. B* 38, 7723.
- [42] Ozaki, N., Okabayashi, I., Kumekawa, T., Nishizawa, N., Marcet, S., Kuroda, S., and Takita, K. (2005). *Appl. Phys. Lett.* 87, 192116.
- [43] K. C. Hass and Ehrenreich, *J. cryst, Growth* 86,8 (1988).
- [44] J. K. Furdyna, *J. Vac. Sci Technol*, 21, 220 (1982).
- [45] L. A. Kolodziejek, *Sci Technol. B* 4, 583 (1986).
- [46] R. Brun, 1983, *Nuovo Cimento D* 2 1911.
- [47] C.W. Bunn, *Proc. Phys. Soc. London* 47 (1935) 835.
- [48] A. Tsukazaki, A. Ohtomo, T. Onuma, M. Ohtani, T. Makino, M. Smiya, K. Ohtani, S. F. Chichibu, S. Fuke, Y. Segawa, H. Ohno, K. Koinuma, M. Kawasaki, *Nat. Mater.* 4 (2005) 42.
- [49] O. Dulub, L. A. Boatner, U. Diebold, *Surf. Sci.* 519 (2002) 201.
- [50] J. C. Phillips, *Bonds and Bands in Semiconductors*, Academic, New York, 1973.
- [51] D. R. Lide (Ed.), *CRC Handbook of Chemistry and Physics*, 73rd Edition, CRC Press, New York, 1992.
- [52] E. H. Kisi, M. M. Elcombe, *Acta Cryst.* C45 (1989) 1867.
- [53] J. E. Jaffe, A. C. Hess, *Phys. Rev. B* 48 (1993) 7903.
- [54] L. Gerward, J. S. Olsen, *J. Synchrotron Radiat.* 2 (1995) 233.
- [55] T. Kogure, Y. Bando, *J. Electron Microsc.* 47 (1993) 7903.
- [56] A. B. M. A. Ashrafi, A. Ueta, A. Avramescu, H. Kumano, I. Suemune, Y. W. Ok, T. Y. Seong, *Appl. Phys. Lett.* 76 (2000) 550.
- [57] S. K. Kim, S. Y. Seong, C. R. Cho, *Appl. Phys. Lett.* 82 (2003) 562.
- [58] C. H. Bates, W. B. White, R. Roy, *Science* 137 (1962) 993.
- [59] J. E. Jaffe, J. A. Snyder, Z. Lin, A. C. Hess, *Phys. Rev. B* 62 (2000) 1660.
- [60] D. Vogel, P. Krüger, J. Pollmann, *Phys. Rev. B* 52 (1995) R14316.
- [61] I. Ivanov, J. Pollmann, *Phys. Rev. B* 24 (1981) 7275.

-
- [62] B. K. Meyer, H. Alves, D. M. Hofmann, W. Kriegseis, D. Forster, F. Bertram, J. Christen, A. Hoffmann, M. Straßburg, M. Dworzak, U. Haboeck, A. V. Rodina, *Phys. Stat. Sol. (b)* 241 (2004) 231.
- [63] K. Ogata, K. Koike, T. Tanite, T. Komuro, F. Yan, S. Sasa, M. Inoue, M. Yano, J. *Cryst. Growth* 251 (2003) 623.
- [64] T. Makino, C. H. Chia, N. T. Tuan, H. D. Sun, Y. Segawa, M. Kawasaki, A. Ohtomo, K. Tamura, H. Koinuma, *Appl. Phys. Lett.* 77 (2000) 975.
- [65] T. Makino, Y. Segawa, M. Kawasaki, A. Ohtomo, R. Shiroki, K. Tamura, T. Yasuda, H. Koinuma, *Appl. Phys. Lett.* 78 (9) (2001) 1237.
- [66] S.W. Xue^{a,b}, X.T. Zu ^a, W.L. Zhou^c, H.X. Deng^a, X. Xiang ^a, L. Zhang ^a, H. Deng^d, *Journal of Alloys and Compounds* 448 (2008) 21–26
- [67] M. Dutta, S. Mridha, D. Basak, *Applied Surface Science* 254 (2008) 2743–2747
- [68] S. Banerjee^a, K. Rajendran^b, N. Gayathri^c, M. Sardar^c, S. Senthilkumard and V. Sengodane
- [69] S. Thota, T. Dutta, J. Kumar *J. Phys.: Condens. Matter* 18(2006)2473–2486
- [70] Wen Chen, Jing Wang, Min-rui Wang, *Vacuum* 81 (2007) 894–898
- [71] Hua-Wei Zhang , Er-Wei Shi , Zhi-Zhan Chen , Xue-Chao Liu , Bing Xiao , Li-Xin Song, *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* 305 (2006) 377–380
- [72] E. Chikoidze, Y. Dumont, F. Jomard, O. Gorochoy, *Thin Solid Films* 515 (2007) 8519–8523
- [73] Sejoon Lee, Seung-Woong Lee, Yoon Shon, Deuk Young Kim , *Materials Science and Engineering B*, 137 (2007) 40–44.
- [74] Y.M. Kim, M. Yoon, I.-W. Park, Y.J. Park, Jong H. Lyou *Solid State Communications* 129 (2004) 175–178
- [75] M. Bouloudenine, N. Viart, S. Colis, A. Dinia, *Catalysis Today* 113 (2006) 240–244
- [76] Y.B. Zhang, S. Li, T.T. Tan, H.S. Park, *Solid State Communications* 137 (2006) 142–145
- [77] M. Bouloudenine, N. Viart, S. Colis, A. Dinia, *Catalysis Today* 113 (2006) 240–244
- [78] Wenjuan Cheng, Xueming M, *Journal of Physics: Conference Series* 152 (2009) 012039
- [79] Zhi-Ren Wei, Zhi-qiang Li, Guo-Yi Dong, *Journal of Magnetism and Magnetic Material* 320 (2008) 916-918
- [80] S. Thota, T. Dutta, J. Kumar *J. Phys.: Condens. Matter* 18(2006)2473–2486
- [81] K.-T. Kim, et al., *Surf. Coat. Technol.* (2008), doi:10.1016/j.surfcoat.2008.06.078
- [82] E. G. Birgin, I. Chambouleyron, J. M. Martinez, *J. Computational Physics* 151, (1999) 862-880
- [83] L. Miao & S. Tanemura & M. Tanemura, S. P. Lau & B. K. Tay, *J Mater Sci: Mater Electron* (2007) 18:S343–S346
- [84] R. Viswanatha, S. Sapra, S. Sen Gupta, B. Satpati, P.V. Satyam, B.N. Dev, D.D. Sarma, *J. Phs. Chem. B* 108 (2004) 6303.
- [85] Boen Houn, Cheng-Lou Huang, Song-Yuan Tsai, *Journal of Crystal Growth* 307 (2007)328–333
- [86] M. Dutta, S. Mridha, D. Basak, *Applied Surface Science* 254 (2008) 2743–2747
- [87] Minrui Wang, Jing Wang, Wen Chen, Yan Cui, Liding Wang, *Materials Chemistry and Physics* 97 (2006) 219–225

-
- [88] Young-Sung Kim, Weon-Pil Tai, Su-Jeong Shu, *Thin Solid Films* 491 (2005) 153 – 160
- [89] S.W.Xue, X.T. Zu, W.L. Zhou, H.X. Deng, X. Xiang, L. Zhang, H. Deng, *Journal of Alloys and Compounds* 448 (2008) 21–26
- [90] P. Weiss, *Journal de Physique*, vol.6, p. 667, 1907.
- [91] F. H. Bitter, *Physical Review*, vol. 41, p. 507, 1932.
- [92] www.nanosurf.com
- [93] Y.B. Zhang a, S. Li, T.T. Tan, H.S. Park, *Solid State Communications*, 137 (2006) 142–145.
- [94] K. J. Kim, Y.R. Park, *Appl. Phys. Lett.* 81 (2002) 1420.
- [95] Shuxia Guo, Xingtang Zhang, Yabin Huang, Yuncai Li, Zuliang Du, *Chemical Physics Letters*, 459 (2008) 82–84.
- [96] P. Koidl, *Phys. Rev. B* 15 (1977) 2493.
- [97] V. Sridharan, *at el. Cond-mat*, 070 1932
- [98] P. H. kasai, *Phy. Rew.* 130, 989. 1963
- [99] N. Riehl *al el, Elektrochem.* 60 149 (1952)
- [100] P. Sharma, A. Gupta, K. V. Rao, F. J. Owens, R. Sharma, R. Ahuja, J. M. Osorio Guillen, B. Johansson, G. A. Gehring, *Nat. Matter*, 2(2003)673.
- [101] M. venkatesan, C. B. Fitzgerald, J. G. Lunny, J. M. D. Coey, *Phys. Rev. Lett.* 93 (2004) 177206.
- [102] J. B. Wang, G. J. Huang, X. L. Zhong, L. Z. Sun, Y. C. Zhou and E. H. Liu, *Appl. Phs. Letts.* 88 252502 (2006)
- [103] M.A. Garcia, M. L. Ruiz-Gonzales, A. Quesaga, J. L. Consta-Kramer, J. F. Fernandes, S. J. Khatib, A. Wennberg, A. C. Cablero, M. S. Marti-Gonzales, M. Villegas, F. Bronies, J. M. Gonzales-Calbert and A. Hernando, *Phys. Rev. Letts*, 94, 217206 (2005).
- [104] R.K. Singhala, M.S. Dhawana, S.K. Gaura, S.N. Doliaa, Sudhish Kumarb, T. Shripathic, U.P. Deshpandec, Y.T. Xingd, Elisa Saitovitchd, K.B. Garga, *J. Alloys Compd.* (2008), doi:[10.1016/j.jallcom.2008.10.005](https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2008.10.005)
- [105] Huilian Liu, Jinghai Yang, Yongjun Zhang¹, Lili Yang, MaobinWei¹ and Xue Ding, *J. Phys.: Condens. Matter* 21 (2009) 145803 (4pp)
- [106] Geun Young Ahn¹, Seung-Iel Park¹, Sam Jin Kim¹, Bo Wha Lee², and Chul Sung Kim¹, Member, IEEE, *IEEE TRANSACTIONS ON MAGNETICS*, VOL. 41, NO. 10, OCTOBER 2005
- [107] J.H. Yang, L.Y. Zhao, Y.J. Zhang, Y.X.Wang, H.L. Liu, *Journal of Alloys and Compounds* 473 (2009) 543–545
- [108] E. Conwell, V.F. Wiesskopf. *Phys. Rev.* 77,388(1950)
- [109] W. A. Harrison, *Phys. Rev.* 104,1281(1956)
- [110] J. Bardeen, W. Shockley, *Phys. Rev.* 80, 72 (1950)
- [111] H. J. G. Meijer, D. polder, *physica* 19, 255(1953)
- [112] H. Brooks, *Adv. Electron. Electron phys.* 7, 158(1955)
- [113] C. Erginsoy, *Phys. Rev.* 79, 1013(1950)
- [114] F. M. S Lima, A. B. Veloso, A. L. Fonseca, and O. A. C. Nunes, *Brazilian Journal of Physics*, 36,365(2006)
- [115] F. Stern, *Appl. Phys.Lett.* 43, 974 (1983)
- [116] T. Ando, *J.Phys. Soc. Jpn.* 51, 3900(1982)
- [117] G. Fishman, D. Calecki, *Physica B* 117B744 (1983)



Shahrood University of Technology

Physics department

PhD Thesis

Title:

*Properties of wide band gap nanofilm semiconductors alloyed with
transition metal elements*

By:

Mohammad Yuonesi

Supervisor(s):

Mohammad Ebrahim Ghazi

Morteza Izadifard

Date:

January 2010

Abstract:

Nowadays, the diluted magnetic semiconductors (DMS) are attracted much attention for their large applications in spintronics and abundant studies are performing both from experimental and theoretical point of views. In spintronics is struggling to use of spin property of carriers (electron/hole) in a company with their charge properties. Due to these properties, study of transition metal doped II-VI and III-IV compounds are interested. For application of these materials in spintronics, their Curie temperature must increase to room or upper temperatures. Curie temperature can be increased with a correct selection of both host and dopant material. In this thesis, zinc oxide (a wide band gap semiconductor) was chosen as a host and transition metal, Mn, Fe, Co and Ni as a dopant. The samples were grown by dip-coating sol-gel technique. Using this growth method, the undoped and doped (smaller than 5% of transition metals) nanofilms of zinc oxide with thickness between 100-300 nanometers were prepared. Then the effect of different physical parameters such as doping concentrations, annealing temperature, thickness of the film and type of solvent on the structural, optical and magnetic properties of the films were studied. The XRD spectra of the grown nanofilms showed that all samples have hexagonal structure. The morphology of surfaces of the nanofilms were investigated by atomic force microscopy (AFM) device and showed that the surfaces are smooth and have a small roughness. The transmittance spectra of samples showed that all are transparent in the visible region with transparency between 80-90 percentages. The optical constants (refractive index, extinction coefficient and penetration depth) of the nanofilms were calculated by using of pointwise unconstrained minimization algorithm and fitting the data to the Cauchy formula. The magnetic properties of the nanofilms were studied by magnetic force microscopy (MFM) and measuring hysteresis loop. The results of these measurements showed that the Mn doped film have paramagnetic property and the other films have the ferromagnetic property at room temperature. In the end, electron mobility of the carriers arising from exchange scattering potential in diluted magnetic semiconductors in the paramagnetic phase was theoretically studied by Heisenberg's model

Keywords: sol-gel, zinc oxide, transition metal, spintronics, diluted magnetic semiconductors (DMS).

