



## اندازه بهینه بلورک‌های رنگدانه فتالوسیانین مس در فیلم‌های نازک گیرنده‌های نوری آلی

حسین خانی<sup>۱</sup>، سید روح‌الله عقدائی<sup>۲\*</sup>، رسول ازئیان<sup>۳</sup>

۱- کارشناس ارشد، دانشکده فیزیک، دانشگاه علم و صنعت ایران، تهران، ایران، صندوق پستی: ۱۳۱۱۴-۱۶۸۴۶

۲- دانشیار، دانشکده فیزیک، دانشگاه علم و صنعت ایران، تهران، ایران، صندوق پستی: ۱۳۱۱۴-۱۶۸۴۶

۳- استادیار، دانشکده فیزیک، دانشگاه علم و صنعت ایران، تهران، ایران، صندوق پستی: ۱۳۱۱۴-۱۶۸۴۶

تاریخ دریافت: ۱۳۸۸/۵/۲۶ تاریخ پذیرش: ۱۳۸۸/۱۱/۳ در دسترس به صورت الکترونیکی از: ۱۳۸۹/۳/۲۰

### چکیده

بهینه‌سازی کیفیت فیلم‌های نازک گیرنده‌های نوری آلی از مهمترین مباحث در زمینه درام‌های زیراکس و چاپگرهای لیزری به شمار می‌آید. یکی از عوامل مؤثر در آن، اندازه دانه‌های مواد تشکیل دهنده لایه تولیدکننده حامل بار می‌باشد. در نخستین بخش این پژوهش با استفاده از پراش پرتوهای X، اندازه بلورک‌ها و کرنش شبکه نمونه آسیا نشده فتالوسیانین مس و نمونه آسیا شده آن در مدت زمان‌های ۹۰، ۱۸۰ و ۲۷۰ دقیقه به روش واریانس تعیین شده است. این نمونه‌ها در لایه تولیدکننده حامل‌های بار درگیرنده‌های نوری زیراکس به کار برده و کیفیت این گیرنده‌ها با یکدیگر مقایسه شده است. در بخش دیگر با استفاده از پراش پرتوهای X، ریزساختار نمونه‌های آسیا شده فتالوسیانین مس در مدت زمان‌های ۱۵، ۳۰، ۶۰، ۹۰، ۱۸۰، ۲۷۰، ۳۶۰ و ۶۰۰ دقیقه به روش واریانس تعیین و مقدار بهینه اندازه بلورک‌های فتالوسیانین مس (در فیلم‌های نازک گیرنده‌های نوری) معرفی شده است.

واژه‌های کلیدی: گیرنده‌های نوری، پراش پرتوهای X، پهن‌شدگی خطوط پراش، ریزساختار، فتالوسیانین مس.

## Optimum Grain Size of Copper Phthalocyanine Pigments in Organic Thin Film Photoreceptors

H. Khani, S. R. Aghdaee\*, R. Ajeiyan

School of physics, Iran University of Science and Technology, P.O.Box: 16846-13114, Tehran, Iran

### Abstract

One of the great concerns in the study of organic thin film photoreceptors is to enhance the efficiency of thin film photoreceptors. This efficiency is to a great degree, affected by pigment grain size dispersed in charge generation layer. In the first part of the project the average crystallite domain size and the root-mean-square strain of non milled sample of copper phthalocyanine and samples milled for 90, 180, 270 minutes have been determined using X-ray diffraction data and variance method. These samples were used as charge generation layers in the organic photoreceptors and their performances were evaluated. In the second part, copper phthalocyanine pigments were milled for 15, 30, 60, 90, 180, 270, 360, 600 minutes and their microstructures were studied as a function of milling time. Then the optimum grain size of pigments (in organic photoreceptors) were investigated. *J. Color Sci. Tech.* 4(2010), 33-39 © Institute for Color Science and Technology.

**Keywords:** Photoreceptors, X-ray diffraction, Line broadening, Microstructure, Copper phthalocyanine.

## ۱- مقدمه

دستگاهی، اندازه کوچک دانه‌ها و کرنش<sup>۱۰</sup> شبکه می‌باشد به گونه‌ای که مطابق رابطه ۱ نیمرخ خط پراش مشاهده شده  $h(x)$ ، پیش‌پیش<sup>۱۱</sup> نیمرخ پهن‌شدگی دستگاهی  $g(x)$  و پهن‌شدگی خود نمونه  $f(x)$  است [۴،۵].

$$h(x) = g(x) * f(x) \quad (1)$$

برای تحلیل ریز ساختار مواد، ابتدا باید پهن‌شدگی ناشی از اثرات دستگاهی را از پهن‌شدگی نمونه جدا کرد. تهیه نقش پراش از یک نمونه استاندارد که پهن‌شدگی فیزیکی آن حداقل باشد می‌تواند سهم پهن‌شدگی دستگاهی را مشخص کند [۵]. از طرفی پهن‌شدگی نمونه بردو نوع است:

پهن‌شدگی ناشی از اندازه کوچک بلورک‌ها،  $\beta_s$  و پهن‌شدگی ناشی از کرنش غیر یکنواخت  $\beta_e$  که به صورت زیر به زاویه براگ  $\theta_B$  مربوط می‌شوند [۶]:

$$\beta_s \propto \frac{1}{\cos \theta_B} \quad (2)$$

$$\beta_e \propto \tan \theta_B \quad (3)$$

با توجه به روابط ۲ و ۳ می‌توان پهن‌شدگی ناشی از اندازه بلورک‌ها و پهن‌شدگی ناشی از کرنش غیر یکنواخت را از یکدیگر تفکیک کرد.

یکی از روشهای تعیین ریز ساختار مواد بلوری، روش واریانس است. واریانس یا گشتاور دوم خط پراش حول مرکز خط پراش،  $\theta_0$ ، در گستره  $\pm \sigma$  به صورت زیر تعریف می‌شود [۷-۹]:

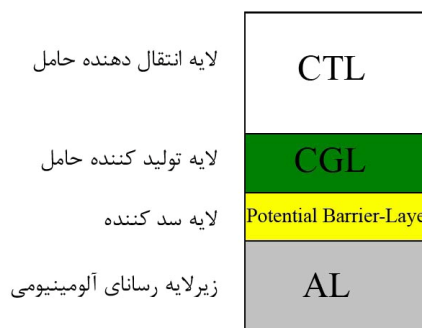
$$W(\sigma) = \frac{\int_{2\theta_0 - \sigma}^{2\theta_0 + \sigma} (2\theta - 2\theta_0)^2 I(2\theta) d(2\theta)}{\int_{-\infty}^{+\infty} I(2\theta) d(2\theta)} \quad (4)$$

اگر شدت خط پراش در دنباله خط با عکس مجذور فاصله از مرکز قله کاهش یابد، واریانس تابع خطی از گستره  $\sigma$  است [۸، ۹].

$$W(\sigma) = W_0 + k\sigma \quad (5)$$

در این رابطه،  $k$  و  $W_0$  شیب و عرض از مبدأ واریانس هستند. با در

گیرنده‌های نوری<sup>۱</sup> آلی عموماً از چند لایه تشکیل شده‌اند که هر لایه وظیفه خاصی را انجام می‌دهد: (۱) لایه تولید کننده بار (CGL)<sup>۲</sup>، که لایه‌های نازک و متشکل از رنگدانه‌های آلی است و با تابش نور، به طور مؤثری قادر به تولید الکترون - حفره است، (۲) لایه ضخیم‌تری که انتقال دهنده بار (CTL)<sup>۳</sup> است و برای طول موج‌های ۱۰۰۰-۴۵۰ نانومتر کاملاً شفاف است، (۳) لایه سدکننده پتانسیل<sup>۴</sup> که بین لایه تولید کننده بار و یک زیرلایه رسانای الکتریکی قرار دارد (شکل ۱) [۲].



شکل ۱: طرح‌واره‌ای از یک گیرنده نوری آلی دولایه‌ای.

فتالوسیانین‌ها از جمله موادی هستند که به عنوان لایه تولیدکننده بار در گیرنده‌های نوری و سلول‌های فوتوولتائیک<sup>۵</sup> آلی به کار می‌روند. رسانش نوری<sup>۶</sup> بسیار خوب فتالوسیانین‌ها از دیر باز مورد توجه بوده، و ابزار فوتوالکتریک ساخته شده از آنها مورد بررسی بسیاری از محققان قرار گرفته است. کوچکتر شدن اندازه رنگدانه در فیلم‌های نازک، به معنای بزرگتر شدن سطوح خارجی آنها و لذا، افزایش سطح مقطع برخورد نهایی فوتون‌ها با لایه تولید کننده بار است. بنابراین جذب و تولید حامل‌های بار و به دنبال آن، بهره کوانتومی حامل‌ها افزایش می‌یابد [۱]. افزون بر آن، استحکام مکانیکی لایه، از پارامترهای مهم دیگر برای تولید صفحات گیرنده نوری و سلول‌های خورشیدی است که با کاهش اندازه دانه‌ها<sup>۷</sup>، افزایش می‌یابد [۳].

یکی از راهکارهای تعیین ریز ساختار<sup>۸</sup> مواد بلوری، استفاده از پراش پرتوهای X به وسیله نمونه و تحلیل پهن‌شدگی خطوط پراش<sup>۹</sup> است. پهن‌شدگی خطوط پراش ناشی از عوامل مختلف از جمله اثرات

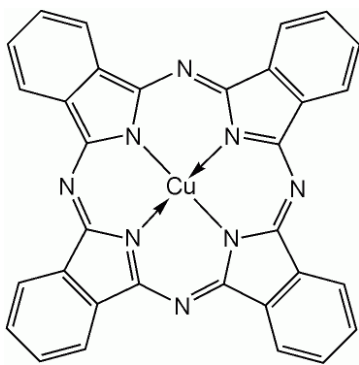
- 1- Photoreceptors
- 2- Charge Generation Layer
- 3- Charge Transport Layer
- 4- Potential barrier-layer
- 5- Photovoltaic
- 6- Photo conductivity
- 7- Grain size
- 8- Micro-structure
- 9- Line broadening

10- Strain  
11- Convolution

## ۲- بخش تجربی

## ۲-۱- مواد

مولکول فتالوسیانین مس، یک ترکیب آلی-فلزی با فرمول شیمیایی  $C_{32}H_{16}CuN_8$  و نام اختصاری CuPc است؛ مولکولی با یک حلقه آروماتیک مسطح<sup>۴</sup>، که یون مس در مرکز این حلقه قرار دارد و دو پیوند کووالانسی و دو پیوند داتیو<sup>۵</sup> را تشکیل می‌دهد.



شکل ۲: ساختار یک مولکول فتالوسیانین مس.

فتالوسیانین‌ها از خواص مغناطیسی و نیم‌رسانایی خوبی برخوردار نیستند اما با توجه به پایداری آنها در برابر گرما، گزینه مناسبی برای فیلم‌های نازک نیم‌رسانای آلی به شمار می‌روند. فتالوسیانین‌ها و دیگر مواد آلی، بسته به روش تولید یا شرایط رشد، در شکل‌های بلوری مختلفی ظاهر می‌شوند. این ویژگی را «چند شکلی بودن»<sup>۶</sup> می‌خوانند. رایج‌ترین شکل فتالوسیانین‌ها، فازهای  $\alpha$  و  $\beta$  هستند که سلول‌های واحد آنها به ترتیب، شبه اورتورومبیک<sup>۷</sup> و مونوکلینیک<sup>۸</sup> است [۱۰].

## ۲-۲- روش کار

در مرحله اول، نمونه فتالوسیانین مس (تهیه شده از پژوهشگاه علوم و فناوری رنگ)، توسط دستگاه آسیای ماهواره‌ای، در مدت زمان‌های ۹۰، ۱۸۰، ۲۷۰ دقیقه آسیا شد. سپس از نمونه‌های آسیا شده و آسیا نشده و نمونه بس بلور  $\alpha - Al_2O_3$  (نمونه استاندارد)، به روش روبش پله‌ای با تابش  $CuK\alpha$  با طول موج  $\lambda = 1.5418 \text{ \AA}$  و با استفاده از پراش‌سنج Pw3710 ساخت شرکت Philips نقش پراش گرفته شد که جزئیات جمع‌آوری داده‌های پراش در جدول ۱ و نقش‌های پراش مربوطه در شکل‌های ۳ و ۴ آورده شده است.

دست داشتن شیب و عرض از مبدأ واریانس نیم‌مرخ مشاهده شده و نیم‌مرخ هندسی دستگاه، می‌توان شیب و عرض از مبدأ واریانس نیم‌مرخ خالص نمونه، یعنی  $k_f$  و  $W_{of}$  را از روابط زیر محاسبه کرد [۸، ۹]:

$$W_{of} = W_{oh} - W_{og} + (1/2)\pi^2 \kappa_g \kappa_f \quad (6)$$

$$\kappa_f = \kappa_h - \kappa_g \quad (7)$$

که در این روابط،  $W_{oh}$  و  $\kappa_h$ ، عرض از مبدأ و شیب واریانس نیم‌مرخ مشاهده شده و  $W_{og}$  و  $\kappa_g$  نیز عرض از مبدأ و شیب واریانس نیم‌مرخ دستگاهی هستند.

اندازه بلورک‌ها D و کرنش شبکه  $e$  از روابط ۸ و ۹ به دست می‌آیند [۸، ۹]:

$$W_{of} = 4 \tan^2 \theta_o < e^2 > \quad (8)$$

$$k_f = \frac{\lambda K}{\pi^2 \cos^2 \theta_o D} \quad (9)$$

پارامتر  $K$  به شکل بلورک‌ها بستگی دارد.

تجربه نشان داده است که در اغلب موارد، می‌توان شکل خطوط پراش را با تابع شبه ویت (P-V)<sup>۱</sup> توصیف کرد. بدین سان، واریانس نیم‌مرخ را می‌توان بر حسب مشخصات نیم‌مرخ، به صورت زیر نوشت [۸، ۹]:

$$W(\sigma) = \beta^{-1} w^3 [\pi^{1/2} 2^{-1} (1-\eta)(\ln 2)^{-3/2} - \eta\pi] + 2\beta^{-1} \eta w^2 \sigma \quad (10)$$

$$W_o = \beta^{-1} w^3 [\pi^{1/2} 2^{-1} (1-\eta)(\ln 2)^{-3/2} - \eta\pi] \quad (11)$$

$$\kappa = 2\beta^{-1} \eta w^2 \quad (12)$$

$$\beta = w [\pi\eta + (1-\eta) \left(\frac{\pi}{\ln 2}\right)^2] \quad (13)$$

که در آن  $\beta$  پهنای انتگرالی،  $2w$  پهنای نیم‌مرخ در نیمه ارتفاع (FWHM) و  $\eta$  سهم تابع کوشی در تابع (P-V) است.

در این مطالعه با استفاده از پراش پرتوهای X و روش واریانس، ریزساختار نمونه‌های فتالوسیانین مس<sup>۲</sup>، تعیین و مقدار پهنه اندازه بلورک‌ها برای گیرنده‌های نوری معرفی شده است.

- 3- Organometallic
- 4- Aromatic macrocyclic ring
- 5- Dative bond
- 6- Polymorphism
- 7- Quasi-orthorhombic
- 8- Monoclinic

- 1- Pseudo-Voight
- 2- Copper-Phthalocyanine

جدول ۱: شرایط جمع آوری داده‌های پراش.

نمونه	گستره روبش ( $2\theta^\circ$ )	گام ( $\Delta 2\theta^\circ$ )	زمان شمارش (ثانیه)
CuPc	۴-۱۱	۰,۰۲	۵
$\alpha$ -Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub>	۲۰-۱۳۰	۰,۰۲	۵

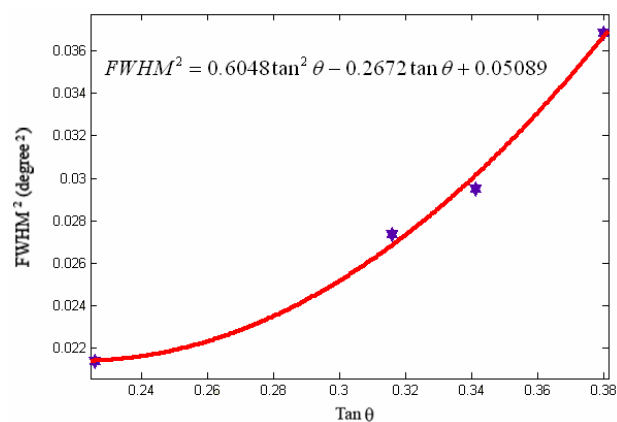
از مقایسه نقش‌های پراش شکل ۴ با نقش‌های پراش پایگاه اطلاعاتی PDF نتیجه می‌شود که نمونه آسیا نشده در فاز  $\beta$  قرار دارد و در نمونه‌های آسیا شده، خط پراش  $\bar{1}01$  و ۰۰۲ ناپدید شده و خط‌های ۱، ۲ (با همپوشانی شدید) و ۳ از فاز  $\alpha$  ظاهر می‌شوند. ولی خط ۱۰۱ از فاز  $\beta$  تغییری نکرده و فقط شدت آن کمتر می‌شود. بنابراین برای تحلیل ریزساختار از این خط استفاده شد.

برای تصحیح اثرات دستگاهی، داده‌های پراش نمونه استاندارد در زوایای کوچک پراش ۲۰ تا ۴۳ درجه به کمک نرم‌افزار XFIT با تابع شبه ویت برازش و پارامترهای نیم‌رخ ( $\eta$  و  $FWHM$ ) چهار خط پراش که در این بازه قرار دارند، تعیین گردید. مقادیر به دست آمده در روابط ۱۴ و ۱۵ و نمودار تغییرات  $FWHM^2$  برحسب  $\tan(\theta)$  و  $1-\eta$  رسم شد (شکل ۵ و ۶).

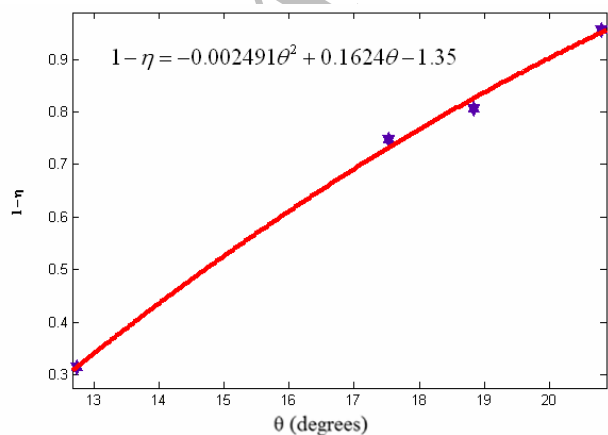
$$(FWHM)^2 = U \tan^2 \theta + V \tan \theta + W \quad (14)$$

$$1 - \eta = c\theta^2 + b\theta + a \quad (15)$$

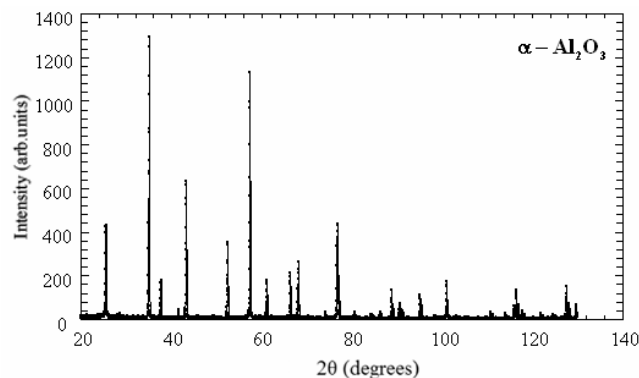
از این نمودارها که رفتار دستگاه در پهن شدن خطوط پراش در بازه ۲۰-۴۳ درجه را نشان می‌دهند، به شرح زیر برای تصحیح اثرات دستگاه استفاده شد.



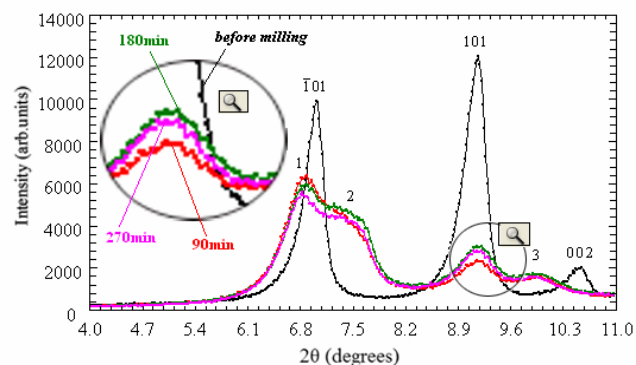
شکل ۵: نمودار تغییرات  $FWHM^2$  برحسب  $\tan\theta$ .



شکل ۶: نمودار تغییرات  $1-\eta$  برحسب  $\theta$ .



شکل ۳: نقش پراش نمونه استاندارد  $\alpha$ -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>.



شکل ۴: مقایسه نقش پراش نمونه فتالوسیانین مس آسیا نشده و نمونه آسیا شده آن در مدت زمان‌های ۹۰، ۱۸۰، و ۲۷۰ دقیقه.

با استفاده از نرم افزار XFIT نقش پراش نمونه‌ها با تابع شبه ویت ( $P-V$ ) برازش و مشخصات خط‌های پراش ( $\eta$  و  $FWHM$ ) تعیین شدند.

نقش پراش موجود در پایگاه اطلاعاتی PDF نشان می‌دهد که نمونه فتالوسیانین با فاز  $\beta$  در محدوده ۴-۱۱ درجه، دارای سه خط در زوایای پراش  $2\theta_{101} = 7.04^\circ$ ،  $2\theta_{010} = 9.22^\circ$  و  $2\theta_{002} = 10.6^\circ$  است. نمونه با فاز  $\alpha$  نیز، در این محدوده دارای سه خط پراش با اندیس‌های میلر ناشناخته است که در شکل ۴ با اعداد ۱، ۲ و ۳ نشان داده شده‌اند. زوایای پراش این خط‌ها عبارتند از:  $2\theta_1 = 6.69^\circ$ ،  $2\theta_2 = 7.3^\circ$  و  $2\theta_3 = 9.9^\circ$ .

1- Profile diffraction file

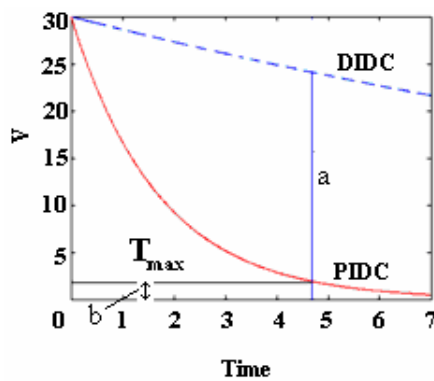
بازه  $2\theta = 4 - 12^\circ$  با گام  $0.02^\circ$  و زمان شمارش  $10$  ثانیه با دستگاه pw3710 ساخت شرکت فیلیپس نقش پراش تهیه شد که نقش‌های مربوطه در شکل ۸ آورده شده است.

**جدول ۲:** اندازه بلورک‌ها و کرنش شبکه نمونه‌های فتالوسیانین مس آسیا شده در مدت زمان‌های  $0, 90, 180, 270$  دقیقه.

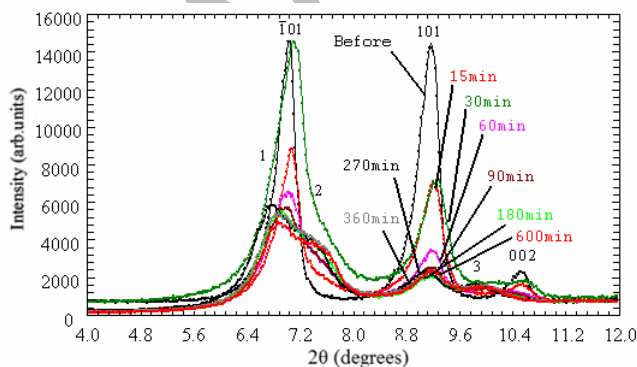
زمان آسیا کردن (دقیقه)	اندازه بلورک‌ها ( $A^\circ$ )	کرنش شبکه ( $<e^2> \times 10^{-4}$ )
0	124	2
90	76	5
180	64	6
270	55	8

**جدول ۳:** پارامترهای a, b و  $T_{max}$  برای گیرنده‌های نوری شامل فتالوسیانین مس آسیا شده در مدت زمان‌های  $90, 180, 270$  دقیقه.

زمان آسیا کردن (دقیقه)	a(V)	b(V)	$T_{max}(ms)$
90	10.41	6.24	392
180	11.22	5.91	336
270	16.56	3.74	19



شکل ۷: نمونه‌ای از یک منحنی تخلیه الکتریکی تاریکی و روشنایی [۲].



شکل ۸: مقایسه نقش پراش نمونه فتالوسیانین مس آسیا نشده و نمونه آسیا شده آن در مدت زمان‌های  $15, 30, 60, 90, 180, 270, 360, 600$  و  $600$  دقیقه.

همان‌گونه که پیشتر آمد، خط پراشی که برای تعیین ریز ساختار مورد استفاده قرار گرفت، خط 101 است. این خط در زاویه پراش  $9.22^\circ$  درجه ظاهر می‌شود. با قرار دادن زاویه براگ این خط در روابط ۱۶ و ۱۷ یا با استفاده از نمودارهای ۵ و ۶، مقادیر  $FWHM = 2w$  و  $\eta$  متناظر خط 101 تعیین و نیمرخ پهن‌شدگی دستگاهی در این زاویه شبیه‌سازی شد. سپس با قرار دادن این مقادیر در رابطه ۱۱ و ۱۲،  $k_g$  و  $W_{og}$  پارامترهای واریانس نیمرخ پهن‌شدگی تعیین و با استفاده از روابط ۶ و ۷ اثرات دستگاه تصحیح و سپس با به کار بردن روابط ۸ و ۹ کرنش شبکه و اندازه بلورک‌ها محاسبه شدند که خلاصه آن در جدول ۲ درج شده است.

$$1 - \eta = -0.002491\theta^2 + 0.1624\theta - 1.35 \quad (16)$$

$$FWHM^2 = 0.6048 \tan^2 \theta - 0.2672 \tan \theta + 0.05089 \quad (17)$$

### ۳- نتایج و بحث

نمونه‌های آسیا شده به عنوان لایه تولید کننده حامل بار در فیلم‌های نازک گیرنده‌های نوری به کار برده، منحنی تخلیه الکتریکی تاریکی<sup>۱</sup> و تخلیه الکتریکی روشنایی<sup>۲</sup> گیرنده‌ها، رسم شد. شکل ۷، نمونه‌ای از یک منحنی تخلیه الکتریکی تاریکی و روشنایی است که در آن محور عمودی ولتاژ اعمال شده بر روی گیرنده، محور افقی زمان تخلیه الکتریکی گیرنده، خط a اختلاف بین منحنی تخلیه الکتریکی تاریکی و روشنایی و خط b پتانسیل باقی‌مانده را نشان می‌دهد. هرچه اختلاف بین منحنی تخلیه الکتریکی تاریکی و روشنایی بیشتر و پتانسیل باقی‌مانده کمتر باشد، کیفیت گیرنده نوری بهتر است. در شکل ۷، پارامتر  $T_{max}$  مدت زمانی است که طول می‌کشد اختلاف بین دو منحنی تخلیه الکتریکی تاریکی و روشنایی بیشینه شود. هرچه این پارامتر کوچکتر باشد، سرعت عملکرد گیرنده نوری بیشتر است. پارامترهای یادشده، برای گیرنده‌های نوری به دست آمده از نمونه‌های آسیا شده در  $90, 180, 270$  دقیقه در جدول ۳ آورده شده‌اند. مقایسه این پارامترها نشان می‌دهد نمونه آسیا شده در  $270$  دقیقه که میانگین اندازه بلورک‌های آن  $55 A^\circ$  است، نتیجه بسیار مطلوبی (کیفیت بالای گیرنده نوری) را به دست می‌دهد.

برای بررسی بیشتر در مرحله دوم، نمونه بس بلور فتالوسیانین مس در بازه‌های زمانی  $15, 30, 60, 90, 180, 270, 360, 600$  و  $600$  دقیقه با دستگاه آسیای ماهواره ای با جام‌های فولادی شامل ۳ گلوله فولادی به قطر  $20$  میلی‌متر و گلوله فولادی دیگر به قطر  $15$  میلی‌متر و سرعت چرخش  $2800$  rpm آسیا شد. از نمونه‌های آسیا شده و نمونه آسیا نشده با استفاده از تابش  $CuK\alpha$  به طول موج  $\lambda = 1.5418 A^\circ$  در

- 1- Dark Induced Discharge Curve(DIDC)
- 2- Photo Induced Discharge Curve(PIDC)
- 3- Cup

در برابر خردشدگی بیشتر می‌شود و از مرحله‌ای به بعد، نمونه به صورت خمیر مانند در می‌آید. به طور مشابه انتظار می‌رود در مرحله اول نیز، کاهش اندازه بلورک‌ها و افزایش کرنش شبکه، پس از ۲۷۰ دقیقه به صورت منحنی خط‌چین در شکل ۹ و ۱۰ باشد. با توجه به ابعاد مولکول فتالوسیانین مس خردکردن بیشتر نمونه مناسب به نظر نمی‌رسد زیرا ممکن است پیوندهای مولکولی نمونه شکسته شوند، همچنین ممکن است گلوله‌ها و جام فولادی دستگاه آسیا سائیده شده و با نمونه مخلوط گردد. با توجه به نتایج به دست آمده در مرحله اول و دوم، نمونه فتالوسیانین مس آسیا شده در ۲۷۰ دقیقه (با اندازه بلورک  $55 \text{ \AA}$  در مرحله اول و  $51 \text{ \AA}$  در مرحله دوم) گزینه‌ای بسیار مناسب برای لایه CGL می‌باشد.

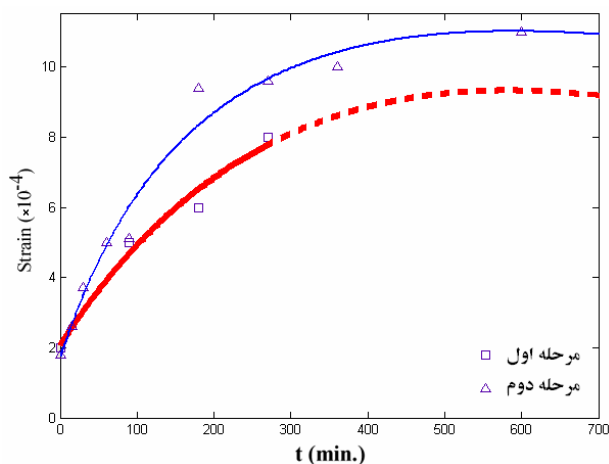
داده‌های پراش به دست آمده مشابه مرحله اول تجزیه و تحلیل و پارامترهای ریزساختار آنها محاسبه شد که خلاصه آن در جدول ۴ درج شده است.

در شکل ۹ و ۱۰، نمودار اندازه بلورک‌ها و کرنش شبکه، برحسب زمان آسیا رسم شده است. در این شکل‌ها مقادیر به دست آمده از مرحله اول (جدول ۲) نیز نشان داده شده‌اند.

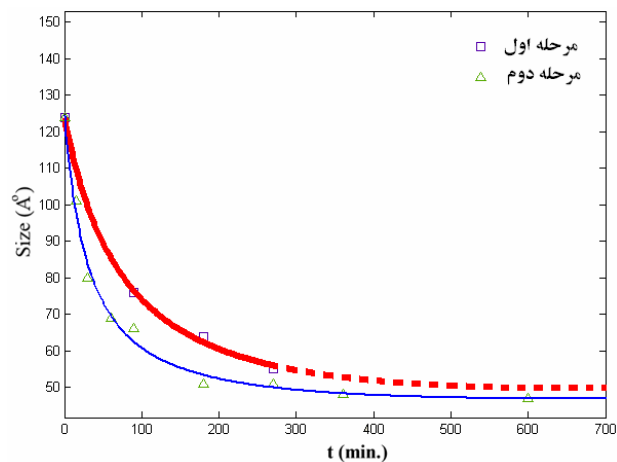
چنانچه ملاحظه می‌شود آهنگ کاهش اندازه بلورک‌ها و افزایش کرنش شبکه از زمان ۰ تا ۹۰ دقیقه سریع است. اما پس از آن، به شدت کند شده و اندازه بلورک‌ها و کرنش شبکه در زمان‌های بالاتر از ۲۷۰ دقیقه تقریباً به مقدار ثابتی میل می‌کند. در واقع با کوچکتر شدن اندازه بلورک‌ها، کرنش شبکه افزایش یافته و مقاومت نمونه

جدول ۴: اندازه بلورک‌ها، کرنش شبکه و پارامترهای به کار رفته در محاسبه آنها برای نمونه‌های CuPc.

	زمان آسیا	۰ دقیقه	۱۵ دقیقه	۳۰ دقیقه	۶۰ دقیقه	۹۰ دقیقه	۱۸۰ دقیقه	۲۷۰ دقیقه	۳۶۰ دقیقه	۶۰۰ دقیقه
	$2\theta_{101}$	۹,۱۲	۹,۱۷	۹,۲۲	۹,۱۶	۹,۱۴	۹,۱۵	۹,۰۸	۹,۱۶	۹,۱۸
مشخصات نیمرخ	$\eta \times (10^{-4})$	۳۳۸۵	۳۴۲۳	۳۴۵۷	۳۴۱۴	۳۴۰۰	۳۴۱۱	۳۳۶۱	۳۴۱۸	۳۴۳۲
دستگاهی در زاویه پراش خط ۱۰۱	$FWHM^\circ$ ( $\times 10^{-4}$ )	۱۸۲۸	۱۸۲۶	۱۸۲۴	۱۸۲۷	۱۸۲۸	۱۸۲۷	۱۸۳۰	۱۸۲۶	۱۸۲۶
	$W_{oh}(\times 10^{-6})$	-۷,۲۵	-۱۰,۲	-۱۴,۰۳	-۱۷,۸۱	-۱۹,۸	-۳۰,۸۴	-۳۰,۷۵	-۳۳,۷۸	-۳۶,۰۹
	$k_h(\times 10^{-4})$	۱۷	۲۰	۲۴	۲۷	۲۸	۳۵	۳۵	۳۷	۳۸
	$\beta_h(\times 10^{-4})$	۹۲	۱۰۵	۱۲۱	۱۳۳	۱۴۰	۱۷۴	۱۷۴	۱۸۳	۱۸۹
	$W_{og}(\times 10^{-8})$	-۴,۸۸	-۶,۷۱	-۸,۲۹	-۶,۲۶	-۵,۶۱	-۶,۱۳	-۳,۷۳	-۶,۴۷	-۷,۱۲
	$k_g(\times 10^{-4})$	۴,۳۷	۴,۴۱	۴,۴۴	۴,۴	۴,۳۸	۴,۳۹	۴,۳۵	۴,۲	۴,۴۲
	$\beta_g(\times 10^{-4})$	۳۹	۳۹	۳۹	۳۹	۳۹	۳۹	۳۹	۳۹	۳۹
	$W_{of}(\times 10^{-6})$	-۴,۴۸	-۶,۷۱	-۹,۶۶	-۱۲,۸۴	-۱۴,۶۴	-۲۴,۱۴	-۲۴,۱۳	-۲۶,۶۳	-۲۸,۷
	$k_f(\times 10^{-4})$	۱۳	۱۶	۲۰	۲۳	۲۴	۳۱	۳۱	۳۳	۳۴
	$D(\text{\AA})$	۱۲۴	۱۰۱	۸۰	۶۹	۶۶	۵۱	۵۱	۴۸	۴۷
	$\langle e^2 \rangle^{1/2} (\times 10^{-4})$	۱,۸	۲,۶	۳,۷	۵	۵,۱	۹,۴	۹,۶	۱۰	۱۱



شکل ۱۰: نمودار تغییرات کرنش شبکه بر حسب زمان آسیا. منحنی پایین نتایج مرحله اول آزمایش و منحنی بالا نتایج مرحله دوم را نشان می‌دهد. انتظار می‌رود منحنی به دست آمده از مرحله اول، در زمان‌های بیشتر از ۲۷۰ دقیقه به صورت خط چین درآید.



شکل ۹: نمودار تغییرات اندازه بلورک‌ها بر حسب زمان آسیا. منحنی بالا نتایج مرحله اول آزمایش و منحنی پایین نتایج مرحله دوم را نشان می‌دهد. انتظار می‌رود منحنی به دست آمده از مرحله اول، در زمان‌های بیشتر از ۲۷۰ دقیقه به صورت خط چین درآید.

#### ۴- نتیجه گیری

پس از مدتی که بستگی به شرایط آسیا کردن دارد به مقدار حدی خود میل می‌کند. نمونه اولیه بس بلور فتالوسیانین مس در فاز  $\beta$  قرار دارد و با فرآیند آسیا کردن رفته رفته فاز  $\beta$  ناپدید شده، فاز  $\alpha$  ظاهر می‌شود به گونه‌ای که با افزایش مدت زمان آسیا کردن، فاز  $\alpha$  فاز عمده را تشکیل می‌دهد. تأثیر فازها بر کیفیت گیرنده نوری در این پژوهش مورد نظر نبوده است که انجام آن را می‌توان برای بررسی بیشتر در این زمینه پیشنهاد نمود.

در صورت استفاده از نمونه فتالوسیانین مس در فیلم‌های نازک گیرنده نوری آلی به منظور دستیابی به کیفیت مطلوب، ابتدا باید نمونه اولیه بس بلور فتالوسیانین مس به مدت کافی تا رسیدن به اندازه حدود  $50 \text{ \AA}$  آسیا شود. این زمان در مورد نمونه‌های به کار رفته در این کار ۲۷۰ دقیقه تشخیص داده شد. در فرآیند آسیا کردن نمونه فتالوسیانین مس، آهنگ کاهش اندازه بلورک‌ها و افزایش کرنش شبکه در آغاز سریع اما با گذشت زمان به سرعت کند می‌شود و

#### ۵- مراجع

1. T. Saito, T. Kawanshi, A. Kakuta, Photocarrier generation of phthalocyanine particles dispersed in a polymer: effects of pigment particle size, polymer matrix and addition of fine  $\gamma$ -Alumina particles. *Jpn. J. Appl. Phys.* 32(1991), 1182-1185.
2. K. Jahanshahi, Investigation of several types of organic photoreceptor materials and comparison of their light and dark discharge curve, M.Sc Thesis, Iranian University of Science and Technology, Iran, 2006 (Persian).
3. S. Zhang, N. Ali, Nanocomposite thin films and coatings, London. Imperial college press, 2007.
4. R. Guinebrière, X-Ray diffraction by polycrystalline materials, ISTE Ltd, London. 2007.
5. M. Birkolz, Thin film analysis by X-Ray scattering, Weinheim. WILEY-VCH, 2006.
6. R. Snyder, R. Jenkin, Introduction to X-ray diffractometry, New York. John wiley & sons Inc, 1996.
7. F. B. Sanchez, A. Orits, F. L. Cumbera, Analytical formulation of the variance method of line broadening analysis for voigtian X-ray diffraction peaks. *J. Appl. Cryst.* 39(2006), 598-600.
8. V. Soleymanian, S. R. Aghdaee, Comparison methods of variance and line profile analysis for the evaluation of microstructures of materials. *Powder Diff.* 23(2008), 41-51.
9. F. B. Sanchez, F. L. Cumbera, The use of the pseudo-voigt function in the variance method of X-ray line-broadening analysis. *J. Appl. Cryst.* 15(1997), 430-438.
10. G. E. Liu, X-Ray Diffraction from thin film structures: characterization and modeling, PhD Thesis, University of California, San Diego, USA, 2007.