

ویژگیهای الکتریکی، مکانیکی و اپتیکی فیلمهای نازک نیترید مس با آلایش تیتانیوم

رحمتي ، على ۲۰۱

همروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه ولی عصر رفسنجان ^۲گروه فیزیک حالت جامد، دانشکده فیزیک، دانشگاه تبریز

چکی*د*ہ

فیلمهای نازک نیترید مس با آلایش TT (Ti:Cu₃N) به روش کندوپاش مگترونی واکنشی DC با استفاده از یک هدف آلیاژی دوتایی Ti₁₃Cu₈₇ در محیط نیتروژنی خالص بر روی زیرلایههای تکبلور سیلیکن ((11)، کوارتز، اسلاید شیشهای و استیل تهیه شدند. این کار به نقش فشار نیتروژن در مشخصههای فیلمهای حاصل می-پردازد. ویزگیهای ساختاری فیلمها با روش پراش پرتو X(XRD) تعیین شد فازهای مشاهده شده ساختار مکعبی Cu₃N با آلایش TT (Nicu₃N) و ساختار fcc پردازد. ویزگیهای ساختاری فیلمها با روش پراش پرتو X(XRD) تعیین شد فازهای مشاهده شده ساختار مکعبی Cu₃N با آلایش TT (Nicu₃N) و ساختار fcc Cu تست میکروسختی ویگرز اندازه گیری شد که به شدت به ترکیب فازی حاصل شده، به شدت به ساختار و ترکیب شیمیایی فیلمها وابسته است. سختی فیلمها با تست میکروسختی ویگرز اندازه گیری شد که به شدت به ترکیب فازی فیلمها بستگی دارد. با استفاده از طیف عبور اپتیکی Visvis می موسخ می را محاسبه ضریب شده به شدت به ترکیب فازی فیلمها بستگی دارد. با استفاده از طیف عبور اپتیکی Vis- Vis (n)، ضریب خاموشی (k) و ضخامت (t) فیلمها پرداخته شد. از روی طیف جذبی فیلمها در مورد فرایند گذاره ای نیمرسانایی و مقدار گاف باندی بحث شده است. افزودن تیتانیوم و به دنبال آن نیتروژن افزوده میان شبکهای نقش مهمی در افزایش ثابت شبکه نسبت به Cu₃Cu₃Cu₄ کور کاف باندی ایته است.</sub>

Electrical, Mechanical and Optical Properties of Ti Doped CuN₃ Thin Films

Ali, Rahmati^{1, 2}

¹ Department of Physics, Vali-e-Asr University of Rafsanjan, Rafsanjan ^{*} Department of Solid State Physics, Faculty of Physics, University of Tabriz, Tabriz

Abstract

Ti doped Cu_3N (Ti: Cu_3N) thin films were deposited on Si(111), quartz, glass slide and stainless steel substrates using a binary $Ti_{13}Cu_{87}$ alloyed target by reactive DC magnetron sputtering at nitrogen ambient. This study provides insight into the importance of nitrogen pressure on the characteristic of the as-deposited Ti: Cu_3N thin films. Structural property of these films is identified by X-ray diffraction (XRD) technique. The observed phases are; cubic structure of Ti doped Cu_3N (Ti: Cu_3N) and fcc structure of Cu. The electrical resistivity of the films, deduced from measurement using four- point probe, was depending on films' structure and chemical composition. Films' hardness, measured by Vickers's microhardness test, was strongly depending on films' composition. Refractive index (n), extinction coefficient (k) and Film thickness (d) are calculated using Visnear IR transmittance. Semiconducting transition process and bandgap value are extracted from absorption coefficient. Ti addition and subsequent excess of interstitial nitrogen (N-rich) result in lattice constant expansion in comparison with Ti free Cu_3N and optical energy gap widening.

توجه زیادی را به خود معطوف کرده است [۲–۱]. Cu₃N ترکیبی است که ترکیب شیمیایی آن به شدت تابع روش و شرایط نهشت است. همینطور ترکیب شیمیایی آن به روش مشخصهیابی شیمیایی حساس است. این مادهی شبهپایدار در دمای بالاتر از C° ۲۵۰ به

فیلمهای نیترید مس (Cu₃N) بعنوان ماده جالبی در قطعات مختلفی مانند پیوند تونلی اسپینی، حافظههای اپتیکی با ظرفیت بالا، نقاط کوانتومی مس و سلولهای خورشیدی ترکیبی آلی- معدنی

www.SID.ir

مقدمه

Cu و N2 تجزیه می گردد. در سالهای اخیر، رشد فیلمهای ترکیبی سهتایی بر پایه Cu₃N مانند (Pd, Cu)N ، (Ti, Cu)N)، (Ag, Cu)N گزارش شدهاند. [۲-۳].

آزمایش و روشها

فیلمهای نازک نیترید مس با استفاده از کندوپاش مگنترونی واکنشی DC از یک هدف آلیاژی دوتایی Ti₁₃Cu₈₇ بر روی زیرلایههای تکبلور سیلیکن (۱۱۱)، کوارتز، اسلاید شیشهای و استیل در اتمسفر خالص نیتروژن و دو فشار ٤/٠ و Pa ٨/٠ نهشته میشوند. اتاقک سیستم کندوپاش از طریق پمپهای چرخنده و تربومولکولی تا فشار Pa ^{٤-} ۲ × ۷ تخلیه میگردد. توان کندوپاشی، دمای زیرفیلم و فاصله هدف- زیرفیلم به ترتیب در ۸۰W

X مشخصهیابی ساختاری فیلمها بوسیله پراش سنج پرتو (Siemens D5000) با تابش CuK α در مد روبشی 20 انجام می شود. مقاومت ویژه فیلمها از اندازه گیری پروب چهار سوزنی حاصل می شود. سختی فیلمها با تست میکروسختی ویکرز اندازه-گیری می شود. مطالعه اپتیکی با اندازه گیری عبور در بازه طول-گیری می شود. مطالعه اپتیکی با اندازه گیری عبور در بازه طول موجی ۱۱۰۰nm – ۲۰۰۰ با استفاده از طیف سنج نوری (Shimadzu, UV 1700 Pharma Spec) در دمای اتاق انجام می شود. با استفاده از یک روش مهندسی معکوس ضخامت، از روی ضریب جذب نوع فرایند گذارهای نیمرسانایی (مستقیم یا غیر مستقیم) و مقدار انرژی گاف باندی در آنها تعیین می شود.

نتايج و بحث

ویژگیهای ساختاری

شکل ۱ دیاگرامهای پراش پرتو X فیلمهای Cu₃N با افزودنی (Ti:Cu₃N)Ti نهشته شده بر روی زیرفیلم سیلیکن (۱۱۱) در دو فشار نیتروزنی مختلف را نشان میدهد. فازهای شبه– Cu₃N و Cu ظاهر می گردند و هیچگونه بازتابهایی از فازهای تیتانیوم فلزی یا نیترید تیتانیوم در دیاگرام XRD دیده نمی شود

افزودن تیتانیوم به Cu₃N ساختار بلوری فیلم آنرا تغییر نمیدهد. ثابت شبکه Ti:Cu₃N (جدول ۱) بزرگتر از مقدار نظری آن برای

Cu₃N فاقد Ti (^A ا ۲۵ ۲۵، [۳]) است. ساختار Cu₃N در مرکز سلول واحد دارای جایگاه خالی است [۱]، اتمهای Ti نمی توانند در مرکز سلول Cu₃N دارای تناسب عنصری قرار گیرند، [۷] . تشکیل جایگاههای تهی از Cu در شبکه Cu₃N که با اتمهای Ti اشغال شدهاند افزایش در ثابت شبکه [۷] را بخوبی توجیه می کند. افزودن Ti در شبکه Cu₃N بعنوان یک بافر عمل می کند که منجر به افزایش نیتروژن افزوده در فیلمها می گردد که در توافق با این است که تمامی فیلمها دارای فوق تناسب عنصری N هستند، [۸]



شکل ۱ دیاگرام XRD لایههای Ti- Cu- N نهشتی بر روی زیرلایه (۱۱۱) Si در فشارهای نیتروژنی مختلف، [۷]

جدول ۱ - مشخصات تخلیه مگنترونی (پتانسیل هدف کاتدی V_d و جریان تخلیه I)، ثابت شبکه (**a**₀)، و آهنگ نهشت (R) فیلمهای Ti:Cu₃N در فشارهای نیتروژنی مختلف

P _{N2} (Pa)	V _d (V)	I _t (mA)	a ₀ (Å)	$\rho_{(\mu\Omega)}$.cm	R (A°min ⁻¹)
• / ٤	٤٠٨	۲	٣/٨٣٠٣	11	٣/٣٠
•/٨	۳۸۲	۲۲.	٣/٨٣٦٢	٧٥٣	٣/٨٤

مقاومت ويژه فيلمها

مقاومت ویژه فیلمها در جدول ۱ آمده است. فیلمها از نظر الکتریکی رفتاری شبه-فلزی دارند. افزودن تیتانیوم به فیلمهای Cu₃N تغییر جدی در مقاومت ویژه آنها ایجاد نمیکند. افزودن تیتانیوم منجر به غنیشدگی N و تشکیل پیوندهای آویزان حول

اتمهای Ti و اتمهای N میانشبکهای میگردد که الکترونهای آزاد را به دام میاندازد و حفرههای آزاد در نقش حامل جهش میکنند [۸].

سختى

در جدول ۱ قطر لوزی حاصل از اثر فرورونده میکروسختی ویکرز در زیرلایه و زیرلایه بهمراه فیلم تحت بارهای مختلف آمده است. برای استخراج میکروسختی ویکرز مربوط به فیلم از رهیافت یونسون و هوگمارک [۹] استفاده می شود که از یک مدل سختی ترکیبی، عبارت

$$_{c} = H_{s} + \left[2c(\frac{t}{d}) - c^{2}(\frac{t}{d})^{2} \right] (H_{F} - H_{s})$$
(1)

	زیرفیلم و فیلم به تنهایی									
سختى	سختی فیلم و زیرلایه (GPa)			قطر اثر (d (<i>µ</i> m			ضخامت			
(GPa)	50g	25g	10g	50g	25g	10g	فیلم (nm)			
۲/۵۳	۲/۳۸	٢/٣٤	۲/۸٦	۱۹/۷	١٤/١	٨/١		زيرلايه		
٣/٣١	٣/٨٩	۲/۳٥	۲/۱۳	10/20	١٤/٠٥	٩/٤٣	٧٩	۰/۴Pa		
۲/0٨	۲/01	۲/۳٥	۲/٦٥	19/70	12/1	٨/٤	٩٢	•/APa		

جدول ٤ - مشخصات نهشت، ضخامت فيلم، قطر اثر فرورونده، سختي فـيلم + زير فيلم و فيلم به تنهايي

ویژگیهای اپتیکی

رهیافتی ساده برای تعیین ثابتهای اپتیکی، که تنها بر اساس اندازه گیری عبور اپتیکی است، وجود دارد. ضریب شکست (n)، ضریب خاموشی (k) و ضخامت فیلمهای نازکRug با آلایش T^{meas} بر روی زیرلایه ضخیم کوارتز از دادههای تجربی عبور با استفاده از کد PUMA که توسط بیرگین و همکاران [۱۱] ارائه با استفاده از کد PUMA که توسط بیرگین و همکاران [۱۱] ارائه شد، محاسبه میشوند. بیرگین و همکاران نشان دادند که از حل شد، محاسبه میشوند. بیرگین و همکاران نشان دادند که از حل مسئله پیوسته کمترین مربعات زیر با برخی قیدهای فیزیکی (۲)

می توان (n(م)، (k() و b فیلمهای مزبور را بدست آورد. شکلهای ۲ پاشندگی ضریب شکست و ضریب خاموشی بر حسب طول موج در بازه ۱۱۰۰ مان ۲۰۰۰ را نشان می دهد.



شکل ۲- پاشندگی ضریب شکست و ضریب خاموشی بر حسب طول موج در فیلمهای Ti:Cu₃N تهیهشده در فشارهای نیتروژنی مختلف

ب جذب بصورت $lpha = 4 \pi { m k} / \lambda$ با ضریب خاموشی	ضري
. است. در ناحیه جذب قوی، ضریب جذب با معادله [۱۲]	در ارتباط
$\alpha = A(E - E_g)^p / E$	(٣)
میشود که A ثابتی است که به احتمال گذار بستگی دارد،	داده
نواری و p ضریبی است که فرایند جذب اپتیکی را	E _g گاف
میکند و برای گذارهای مجاز مستقیم و غیرمستقیم به	مشخص
/ و ۲ ، برای گذارهای غیر محاز مستقیم و غیرمستقیم به	تر تىپ ە

ترتیب ۵/۰ و ۲ ، برای گذارهای غیر مجاز مستقیم و غیرمستقیم به ترتیب ۱/۵ و ۳ میباشد. با انتخاب مقدار p مناسب و رسم منحنی فیلمهای نازک Ti-Cu-N به روش کندوپاش مگنترونی واکنشی DC با استفاده از یک هدف آلیاژی دوتایی Ti₁₃Cu₈₇ در محیط نیتروژنی خالص بر روی زیرلایههای تکبلور سیلیکن (۱۱۱)، کوارتز، اسلاید شیشهای و استیل تهیه شدند. با جایگزینی اتمها Cu و تهیجاهای آن در ساختار Cu₃N با اتمهای Ti، فیلمها بلورینگی خوبی به نمایش میگذارند. مقاومت ویژه فیلمها به شدت به ساختار و ترکیب شیمیایی فیلمها وابسته است. سختی فیلمها به ترکیب فازی فیلمها بستگی دارد. ضریب شکست (n)، ضریب خاموشی (k) و ضخامت (b) فیلمها محاسبه شد. از روی گافباندی بحث شده است. افزودن تیتانیوم منجربه نیتروژن افزوده میان شبکهای می گردد که نقش مهمی در افزایش ثابت شبکه نسبت به Cu₃N به Cu₃N بایتکی گافباندی به Cu₃N فیلمها و پهن شدگی گافباندی ایتیکی دارد.

- مرجعها
- D. O. Borsa, S. Grachev, D. O. Boerma, *IEEE Trans. Magn.*, 38 (2002) 2709.
- [Y] C. Navio, M. J. Capitan, J. Alvarez, F. Yndurain, R. Miranda, *Phys. Rev. B*, **76** (2007) 085105.
- [٣] A. Rahmati, H. Bidadi, K. Ahmadi, F. Hadian, J. Coat. Tech. Res, 8 (2) (2011) 289.
- [٤] U. Hahn, W. Weber, Phys. Rev. B, 53 (1996) 12684
- [0] X. Fan, Z. Wu, G. Zhang, C. Li, B. Geng, H. Li, P. Yan, J. Alloys Compds., 440 (2006) 254
- [7] J. F. Pierson, D. Horwat, Scr. Mater., 58 (2008) 568

[۷] رحمتی، علی؛ " رشد فیلمهای نازک نیترید مس با آلایش تیتانیوم با کندوپاش مگنترونی واکنشی: مشخصهیابی ساختاری و پیوندهای شیمیایی»

نوزدهمین همایش بلورشناسی و کانیشناسی ایران، دانشگاه گلستان

(گرگان)، ۱٦ و ١٧ شهريور ١٣٩٠

- [^] A. Rahmati, Vaccum, 85 (2011) 853.
- [4] A. M. Korsunsky, M. R. McGurk, S. J. Bull, T. F. Page, Surface and Coating Technology, 99 (1998) 171
- [1.] J. F. Pierson, Vacuum 66: (2002) 59
- [11] E. G. Birgin, I. Chambouleyron, J. M. Martinez, J. Comput. Phys., 151 (1999) 862.
- [11] J. Patterson, B. Bailey, "Solid-State Physics, Introduction to the theory", 2nd Edition, Springer, 2010.
- [17] A. Peled " Photo-Excited Processes, Diagnostics and Applications Fundamentals and Advanced Topics" Kluwer Academic Publisher,2003.
- [16] J. Singh, "Optical Properties of Condensed Matter and Applications", John Willey & Sons Ltd. 2006

 $^{1/p}$ (E α) می توان از محل تلاقی آن با محور E ، انرژی گاف-باندی (E α) می توان از محل تلاقی آن با محور E ، انرژی گاف نموداری که بازه وسیعی از دادهها را پوشش می دهد، نمودار نموداری که بازه وسیعی از دادهها را پوشش می دهد. مقادهای - E (α E) - Cu-N) است (شکل ۳). نتایج نشان می دهد که گذارهای مجاز مستقیم در فیلمهای نازک Ti-Cu-N غالب هستند. مقادیر انرژی گاف نواری بدست آمده برای Ti-Cu-N بطور قابل توجهی بزرگتر از مقادیر گزارش شده برای Cu₃N فاقد Ti-Cu-N 9 eV.



سحل ۱- محاسبه الرری داف بالدی والرزی قونون در قیدمهای ۱۱،۰۰۵٬۱۶ بهیه-شده در فشارهای نیتروژنی مختلف

ثابت شبکه بلورکهای Ti:Cu₃N (جدول ۱) و انرژی گاف-نواری آنها دارای مقادیر بزرگتری از مقادیر متناظر خود در فاقد Ti هستند. این رفتارها بطور همزمان بیانگر اثر غنی شدگی N در فرایند جذب را نشان میدهد که منجر به شکل گیری مراکز پذیرنده الکترونی مربوط به نیتروژن افزوده میان شبکهای می گردد. انرژی گاف نواری در فیلم غنی از N بدلیل اثر پر شدگی حفرهای در نوار ظرفیت افزایش می یابد. این پدیده منجر به تبهگنی در لبه نوار ظرفیت سهموی و پهن شدگی گاف نواری (جابجایی بور شتاین – موس) می گردد [۱۳, ۱٤].

نتىجەگىرى