

مقاله نامه ششمین کنفرانس ملّی خلأ ایران دانشگاه شهید چمران اهواز ۱۶ و ۱۷ بهمن ماه ۱۳۹۲



بررسی اثر شرایط بازپخت بر گاف انرژی لایه نازک اکسید ایندیم

مرادی، مهرداد ؛ رستمی، کبری پژوهشکده علوم و فناوری نانو، دانشگاه کاشان، کاشان

چکیدہ

در این تحقیق ابتا، لایههای نازک ایندیم، روی زیرلایههای (بسترهای) شیشهای به روش تبخیر حرارتی، در خلاء لایهنشانی شدند. در مرحله بعد به منظور بازپخت لایهها، زیرلایهها بطور جداگانه درون کوره استوانهای قرار گرفتند. دما و زمان بازپخت برای هر دو نمونه به ترتیب ۲۵۰ درجه سانتی گراد و ۳۰ دقیقه در نظر گرفته شد. یکی از نمونهها در هوا و دیگری تحت خلاء (فشار ۲۲۱۰ میلیبار) بازپخت شد. سپس ساختار بلوری لایههای بازپخت شده با آنالیز پراش پرتو ایکس مورد مطالعه قرار گرفته و به منظور تعیین گاف انرژی لایهها، طیف جذب اپتیکی با استفاده از دستگاه اسپکتروفوتومتری دو پرتویی اندازه گیری شد. بررسی نتایج حاصل از آنالیزها نشان داد که لایهها پس از بازپخت اکسید شده اما بازپخت تحت خلاء موجب کاهش گاف انرژی لایهها شد.

Investigation of the Effect of Annealing Conditions on the Band Gap of the Indium Oxide Thin Films

Moradi, Mehrdad; Rostami, Kobra

Institute of Nanoscience and Nanotechnology, University of Kashan, Kashan

Abstract

In this study, Indium thin films were deposited on the glass substrates in the vacuum $(5 \times 10^{-5} \text{ mbar})$ using thermal evaporation method. Next, the substrates were put in the cylindrical furnace for thermal annealing. The annealing time and temperature were 30 min and 250 °C respectively. Then, the x-ray diffraction analysis was used for studying the crystal structure of annealed layers. The optical absorption was used for determining the band gap. It can be understood that the annealed layers in the open air were oxidize and the band gap of layers was reduced where the pressure of furnace chamber in the annealing processing was 2×10^{-2} mbar.

بودن تراکم حاملهایی است که ناشی از رسانایی n این ماده با تبهگنی کامل می باشد. وجود نقصهای اکسیژنی یا اتمهای ایندیم اضافی ناشی از مراکز ناخالصی یونیزه، باعث تولید الکترونهای آزاد می شود که این الکترونها به رسانش لایههای اکسید ایندیم کمک می کند. گاف نواری الکترونیکی اکسید ایندیم (In₂O₃) اغلب کمتر از ۳ الکترون ولت است. این در حالی است که TCO های دیگر با گافهای نواری بزرگتر (In₂O 2007) و های دیگر با گافهای نواری بزرگتر (In₂O 2007) نیستند. در نتیجه، یک اکسید رسانای بهینه، باید هر دو خصوصیت یک گاف

مقدمه

ایندیم عنصری فلزی است که در دمای اتاق در برابر خوردگی مقاوم است اما در دماهای بالاتر به دلیل افزایش میل ترکیبی با اکسیژن به سرعت اکسید می شود. اکسیدهای رسانای شفاف (TCO) مانند اکسید ایندیم در دو دهه گذشته مورد توجه زیادی قرار گرفتهاند. بطوریکه از آنها در نمایشگرهای تخت، سلولهای خورشیدی و پنجرههای گسیل پایین استفادههای زیادی می شود. اکسید ایندیم به عنوان یک نیمرسانای شفاف نسبت به نیمرساناهای دیگر از کارایی بالایی برخوردار است که این برتری به دلیل بالا



مقاله نامه ششمین کنفرانس ملّی خلأ ایران دانشگاه شهید چمران اهواز ۱۶ و ۱۷ بهمن ماه ۱۳۹۲



نواری آلکترونیکی کوچک (نوار رسانش پایین برای نوع n یا نوار ظرفیت بالا برای نوع p) و گاف نواری اپتیکی بزرگ (برای محدود کردن جذب نور قابل مشاهده) را داشته باشد [۱و۲]. از آن جا که خواص لایههای نازک اکسید ایندیم به شدت متأثر از شرایط لایهنشانی نظیر دمای زیرلایه، فشار جزئی اکسیژن، فشار کل محفظه، فاصله بین هدف و زیرلایه و نوع زیرلایه است. بررسی خواص ساختاری و الکترونیکی اکسید ایندیم همواره مورد علاقه محققان بوده است [۵–۳].

در این تحقیق پس از لایهنشانی ایندیم روی زیرلایههای شیشهای، زیرلایهها درون کوره استوانهای در شرایط مختلف بازپخت (گرمادهی) شدند، تا اتمها فرصت کافی برای قرار گرفتن در جایگاههای مناسب را پیدا کرده و در نتیجه یکنواختی لایهها افزایش یابد. سپس با استفاده از طیف پراش پرتو ایکس (XRD) و طیف جذبی نمونهها اثر شرایط بازپخت به ویژه اثر خلاء محفظه کوره روی گاف انرژی لایههای نازک اکسید ایندیم مورد بررسی قرار گرفت.

بخش تجربى

شستوشوی زیرلایههای شیشهای (Soda lime glass) با ضخامت تقریبی یک میلیمتر و ابعاد ۲/۲×۲/۱ سانتیمتر، ابتدا با آب دو بار تقطیر و سپس به ترتیب با قرار گرفتن در محلولهای اسید هیدروکلریک ۵۰ درصد، متانول و استون، هر کدام به مدت ۱۵ دقیقه در حمام آلتراسونیک انجام گرفت. سپس زیرلایهها بر روی شابلون طراحی شده، با دقت نصب شدند و در محفظه لایهنشانی قرار داده شدند و لایهنشانی ایندیم به روش تبخیر حرارتی در دمای ٤٠ درجه سانتیگراد، با آهنگ ۲/۱ نانومتر بر ثانیه برای جلوگیری از اکسید شدن لایههای شیشهای انجام شد و زیرلایهها صرفنظر شد. در مرحله بعد به منظور افزایش یکنواختی سطح لایهها، بسترهای لایهنشانی شده برای بازیخت بطور جداگانه درون کوره استوانهای (مدل EX-1200-020-12) ساخت

شرکت اکسایتون) قرار گرفتند. شرایط بازپخت نمونهها به صورت زیر انتخاب شده است : نمونه شماره (۱) : ابتدا دمای لایه در مدت ۱۵ دقیقه به دمای ۲۵۰ درجه سانتی گراد رسید و ۳۰ دقیقه در این دما باقی ماند. در حالیکه محفظه کوره تحت خلاء قرار نداشت و نمونه در معرض جریان هوا قرارگرفته بود.

نمونه شماره (۲) : زمان و دمای بازپخت مانند نمونه (۱) انتخاب شد با این تفاوت که محفظه کوره تحت خلاء ^{۲-} ۲۰×۲ میلی،بار قرار داشت.

ساختار بلوری لایه های بازپخت شده با آنالیز پراش پرتو ایکس (XRD) با طول موج ۱/۵٤ آنگسترم مورد بررسی قرار گرفت. همچنین به وسیله دستگاه اسپکترومتری دو پرتویی -GBC GBC طیف جذب اپتیکی نمونه های بازپخت شده در گستره طول موج ۲۰۰ تا ۸۰۰ نانومتر جهت اندازه گیری گاف انرژی اکسید ایندیم بررسی شد.

بحث و نتايج

طیف پراش پرتو ایکس نمونه ها در شکل (۱) نمایش داده شده است. همان طور که قسمت بالای شکل نشان می دهد و انتظار آن را نیز داشتیم حضور فاز اکسید ایندیم به وضوح در نمونه شماره (۱) دیده می شود. اما نمونه شماره (۲) نیز وجود دو فاز مکعبی و اور تورومبیک اکسید ایندیم را با شدت کمتری نشان می دهد که حدس زده می شود بخاطر میل زیاد ایندیم برای ترکیب با اکسیژن در دماهای بالاتر، ایندیم با اکسیژن ناچیز درون کوره ترکیب شده است.





شکل (۱) : طیف پراش پرتو ایکس (a) نمونه شماره (۱) و (b) نمونه شماره (۲)

برای بررسی بیشتر، گاف انرژی لایه ها اندازه گیری شد. برای بدست آوردن گاف انرژی لایه اکسید ایندیم از دستگاه طیفسنج عبوری UV-Visible استفاده شد و نمونه های مورد نظر تحت تابش امواج با گامهای ٤/٠ نانومتر قرار گرفتند تا توسط رابطه ضریب جذب گاف انرژی را به دست آوریم. ضریب جذب (۵) را می توان با استفاده از جذب A و ضخامت لایه نازک d به صورت زیر بدست آورد :

$$\alpha = 2.303 \ \left(\frac{A}{d}\right) \tag{1}$$

همچنین می توان با استفاده از انرژی فوتون (hv) رابطه زیر را نوشت :

$$\alpha h \upsilon = C \left(h \upsilon - E_{opt} \right)^n \tag{(Y)}$$

که E_{opt} گاف انرژی اپتیکی، h ثابت پلانک و v فرکانس موج تابانده شده به نمونه میباشد. n شاخصی است که ماهیت گذارهای الکترونی را برای جذب تعیین میکند و مقادیر آن برای انواع گذارها متغیر است و میتواند مقادیر 3 و $\frac{2}{2}$ و 2 و $\frac{1}{2}$ را

داشته باشد. C مقدار ثابتی است که مقدار عددی آن بین ^۱۰۰ بر سانتیمتر تا ۱۰^٦ بر سانتیمتر تغییر میکند. در محاسبات فوق به خاطر گاف انرژی مستقیم اکسید ایندیم، مقدار n، عدد $\frac{1}{2}$ در نظر گرفته شده است.



شکل (۲) : طیف جذب نمونه شماره (۱) در بازه طول موج ۳۵۰ تا ۸۰۰ نانومتر



شکل (۳) : طیف جذب نمونه شماره (۲) در بازه طول موج ۳۵۰ تا ۸۰۰ نانومتر

شکل (۲) و (۳) به ترتیب طیف جذب نمونه های شماره (۱) و (۲) را در بازه بین ۳۵۰ تا ۸۰۰ نانومتر نشان می دهد. در شکل های (۲) و (۳) حد پائین طول موج (۳۵۰ نانومتر) به این دلیل انتخاب شد که جذب شیشه که در اینجا به عنوان زیرلایه در نظر گرفته شده است در این محدوده بسیار زیاد میباشد. مقادیر Eopt با برونیابی بخش خطی منحنی های شکل های (٤) و (۵) در محل قطع محرور hv در نقطهای که 0 = ²(αhv) شود بدست می آید.

www.SID.ir

مقاله نامه ششمین کنفرانس ملّی خلاً ایران





شماره (۱) در مجاورت هوا (فشار حدود ۱۰۲۰ میلی بار) در حین فرايند بازيخت، اكسيژن موجود در هوا با اينديم واكنش داده و لايه نازک ایندیم به طور کامل اکسید شده است. لذا گاف انرژی به دست آمده برای این نمونه (۲/۸۱ الکترون ولت) با مقدار واقعی گاف انرژی اکسید ایندیم (تقریبا کمتر از ۳ الکترون ولت) به خوبی مطابقت دارد. در مورد نمونه شماره (۲)، با وجود این که در حین فرایند بازیخت فضای درون محفظه کوره به فشار حدود ^۲-۱۰×۲ میلی بار رسیده بود، و کوره تحت خلاء قرار داشت، اما آنالیز پراش پرتو ایکس XRD، وجود اکسید ایندیم را در این نمونه نیز نشان داد. این امر حاکی از وجود مقدار کمی اکسیژن، درون محفظه كوره است كه به دليل ميل شديدتر اينديم براى تركيب شدن با اکسیژن در دماهای بالاتر، باعث اکسید شدن لایه نازک ایندیم می شود. گاف انرژی به دست آمده برای این نمونه (۲/۲۳ الکترون ولت) از مقدار واقعی گاف انرژی اکسید ایندیم، کمتر است. از مقایسه گاف انرژی به دست آمده برای این دو نمونه با یکدیگر می توان نتیجه گرفت که با کاهش فشار درون محفظه کوره و در نتیجه ایجاد خلاء بهتر در حین فرایند بازپخت، سهم اکسید شدن کمتر شده و در نتیجه گاف انرژی لایههای اکسید ایندیم کاهش یافته است. در کارهای آتی به دنبال آن هستیم که به منظور دستیابی به

در فریسی ای ای به دین ای هستیم که به سطور دست یبی به لایه های یکنواخت تر و جلوگیری از اکسید شدن لایه ها، پس از اتمام لایه نشانی، زیرلایه ها در همان محفظه لایه نشانی بازپخت شوند.

مرجعها

- A. Walsh, J.L.F. Da Silva, S.-H. Wei, C. Korber, A. Klein, L.F.J. Piper, A. DeMasi, K.E. Smith, G. Panaccione, P. Torelli, D.J.Payane, A. Bourlange, and R. G. Egdell, Phys. Rev. Lett. 100, 167402-167405, (2008).
- [2] M. Grundmann, "The Physics of Semiconductors (An Introduction including Nanophysics and Applications)", Springer, (2010).
- [3] A. Walsh, J.L.F. Da Silva, and S.-H. Wei, SPIE Newsroom, (2008).
- [4] P.Erhart, A.Klein, R.G. Egdell, and K. Albel, "Band structure of indium oxide: Indirect versus direct band gap", Phys. Rev. B 75, pp. 153205(1-4), 2007.
- [5] A. Kompany, H. A. Rahnamaye Aliabad, and S. M. Hosseini "Effect of substituted IIIB transition metals on electronic properties of Indium Oxide by first-principle calculations", Phys. stat. sol.(b) 244, pp. 619-628 ,2007.



شکل (٤) : بروزیابی بخش خطی در محل قطع محور hv برای نمونه شماره (۱)

مقدار گاف انرژی محاسبه شده برای نمونه شماره (۱) حدود ۲/۸۱ الکترون ولت اندازه گیری شد.



شکل (۵) : برون یابی بخش خطی در محل قطع نمودار hv برای نمونه شماره (۲)

و مقدار گاف انرژی محاسبه شده برای نمونه شماره (۲) با توجه به شکل (۵) حدود ۲/۲۳ الکترون ولت اندازهگیری شد.

نتيجه گيرى

در این تحقیق با استفاده از طیف جذب اپتیکی لایههای بازپخت شده، مقدار گاف انرژی لایههای اکسید ایندیم اندازهگیری شد. همانطور که نتایج نشان میدهد به علت قرار گرفتن نمونه