



## تأثیر آهنگ شارش نیتروژن در کندوپاش مگنترونی واکنشی بر روی مشخصه‌های فیلمهای نازک

نیتريد مس حاوی تیتانیوم

رحمتی ، علی

گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه ولی عصر رفسنجان

### چکیده

فیلمهای نازک نیتريد مس با حاوی  $(Ti:Cu_3N)Ti$  به روش کندوپاش مگنترونی واکنشی DC با استفاده از یک هدف آلیاژی دوتایی  $Ti_{13}Cu_{87}$  در محیط مخلوط نیتروژن و آرگون بر روی زیرلایه‌های تک بلور سیلیکن (111)، کوارتز تهیه شدند. این کار به نقش آهنگ شارش نیتروژن در مشخصه‌های فیلمهای حاصل می‌پردازد. ویژگیهای ساختاری فیلمها با روش پراش سنجی پرتو X ( $XRD$ ) تعیین شد که فاز مشاهده شده ساختار مکعبی شبه  $Cu_3N$  هستند و افزودن  $Ti$  تغییری در ساختار ایجاد نمیکند. شکل دانه‌بندی سطحی فیلمها با استفاده از میکروسکوپ الکترونی روبشی ( $SEM$ ) مطالعه شده است. افزودن  $Ti$  باعث افزایش حضور نیتروژن در فیلمها و توقف رشد دانه‌ها می‌گردد. طیف عبور اپتیکی  $Vis-NIR$  و ضریب جذب فیلمها اندازه‌گیری و مطالعه شده است. افزودن تیتانیوم و به دنبال آن نیتروژن افزوده میان شبکه‌ای نقش مهمی در افزایش گاف‌نواری  $Ti:Cu_3N$  نسبت به  $Cu_3N$  فاقد  $Ti$  دارد.

## Effect of Nitrogen Flow Rate in Reactive Magnetron Sputtering on Characteristics of Ti Containing $Cu_3N$ Thin Films

Ali, Rahmati<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Department of Physics, Vali-e-Asr University of Rafsanjan, Rafsanjan

### Abstract

*Ti containing  $Cu_3N$  ( $Ti:Cu_3N$ ) thin films were deposited on Si(111) and quartz substrates using a binary  $Ti_{13}Cu_{87}$  alloyed target by reactive DC magnetron sputtering at mixture of nitrogen and argon ambient. This study provides insight into the importance of nitrogen flow rate on the characteristic of the as-deposited  $Ti:Cu_3N$  thin films. Structural property of these films is identified by X-ray diffractometry (XRD) that the cubic structure of quasi-  $Cu_3N$  is observed without any change due to Ti addition. Grain shape of film surface was studied by Scanning Electron Microscopy (SEM). Ti addition cause to presence of nitrogen excess and suppress grain growth. The spectrum of optical transmittance and absorption was measured using UV- Vis- near IR spectrophotometere. Semiconducting transition process and bandgap value are extracted from absorption coefficient. Ti addition and subsequent excess of interstitial nitrogen (N-rich) result in optical bandgap widening in comparison with Ti free  $Cu_3N$ .*

PACS No.

$Cu_3N$  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 شبه پایدار در دمای بالاتر از  $250^\circ C$  به  $Cu$  و  $N_2$  تجزیه می‌گردد. در سالهای اخیر،

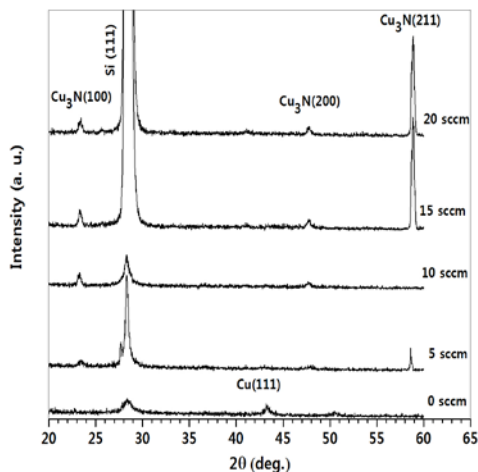
مقدمه

فیلمهای نیتريد مس ( $Cu_3N$ ) بعنوان ماده جالبی در قطعات مختلفی مانند پیوند تونلی اسپینی، حافظه‌های اپتیکی با ظرفیت بالا، نقاط کوانتومی مس و سلولهای خورشیدی ترکیبی آلی- معدنی توجه زیادی را به خود معطوف کرده است [1-2].

نیترژن افزوده در فیلم‌ها می‌گردد که در توافق با این است که تمامی فیلم‌ها دارای فوق تناسب‌عنصری N هستند، [۸]. جابجایی

پیکه

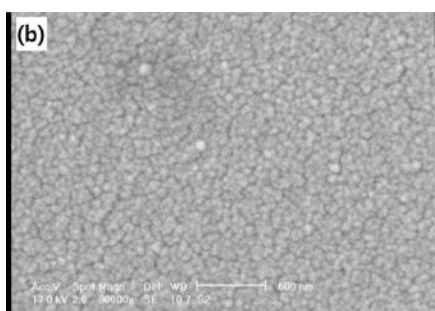
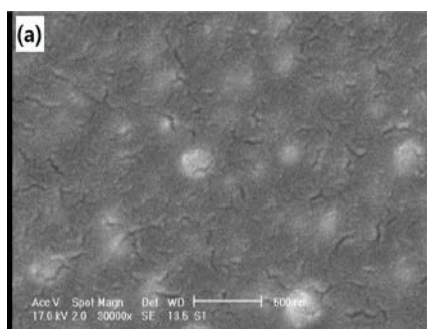
زواید



شکل ۱ دیاگرام XRD لایه‌های Ti-Cu-N نهشتی بر روی زیرلایه Si (۱۱۱) در آهنگهای مختلف شارش نیترژنی

### ریخت‌شناسی (مرفولوژی)

تصاویر SEM فیلمهای Ti:Cu<sub>3</sub>N در شکل ۳ آمده است. فیلمها دارای ساختار دانه‌ای با مرزهای مشخص هستند. فیلمها متراکم و دارای سطح زبری هستند. می‌توان گفت با افزایش فشار نیترژن دانه‌بندی فیلم ریزتر می‌گردد زیرا رسوب آن در اطراف دانه‌ها رشد آنها را متوقف می‌کند.



رشد فیلم‌های ترکیبی سه‌تایی بر پایه Cu<sub>3</sub>N مانند (Pd, Cu)N، (Ti, Cu)N، (Ag, Cu)N گزارش شده‌اند. [3- 6].

### آزمایش و روشها

فیلمهای نازک نیترید مس با استفاده از کندوپاش مگنترونی واکنشی DC از یک هدف آلیاژی دوتایی Ti<sub>13</sub>Cu<sub>87</sub> بر روی زیرلایه‌های تک‌بلور سیلیکن (۱۱۱) و کوارتز در اتمسفر محیط مخلوط نیترژن و آرگون و در آهنگ شارش نیترژنی ۲۰-۰ sccm نهشته می‌شوند. اتاقک سیستم کندوپاش از طریق پمپهای چرخنده و ترابومولکولی تا فشار ۷ × ۱۰<sup>-۴</sup> Pa تخلیه می‌گردد. توان کندوپاشی، دمای زیرفیلم و فاصله هدف- زیرلایه به ترتیب در 80 W، ۱۵۰ °C و 19.5 cm ثابت می‌شوند.

مشخصه‌یابی ساختاری فیلمها بوسیله پراش سنخ پرتو X (Siemens D5000) با تابش CuK α در مد روبشی 2θ انجام می‌شود. مطالعه اپتیکی با اندازه‌گیری عبور در بازه طول‌موجی ۱۱۰۰-۳۰۰ nm با استفاده از طیف‌سنج نوری (Shimadzu, UV 1700 Pharma Spec) در دمای اتاق انجام می‌شود. ضریب جذب فیلمها با استفاده از فرمول لمبرت محاسبه شده است و با استفاده از رابطه تائوک تغییر گاف‌نواری بر حسب آهنگ شارش نیترژن دنبال شده است.

### نتایج و بحث

#### ویژگیهای ساختاری

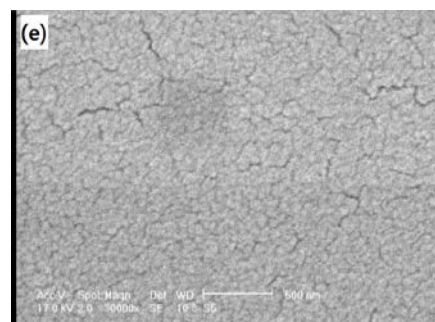
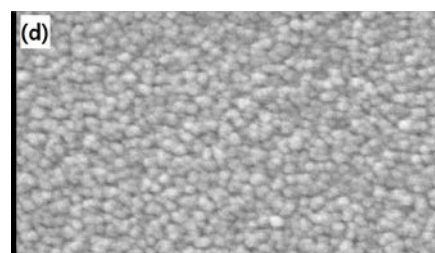
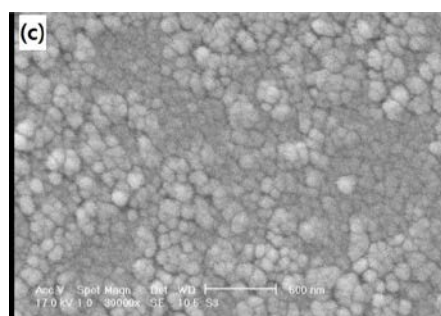
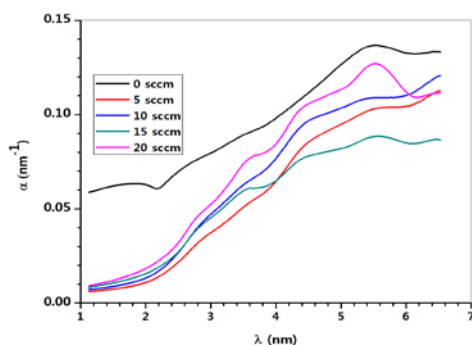
شکل ۱ دیاگرامهای پراش پرتو X فیلمهای Cu<sub>3</sub>N با افزودنی Ti (Ti:Cu<sub>3</sub>N) نهشته شده بر روی زیرفیلم سیلیکن (۱۱۱) در آهنگ شارش مختلف نیترژن را نشان می‌دهد. فازهای شبه-Cu<sub>3</sub>N ظاهر می‌شود و هیچگونه بازتابهایی از فازهای تیتانیوم فلزی یا نیترید تیتانیوم در دیاگرام XRD دیده نمی‌شود. افزودن تیتانیوم به Cu<sub>3</sub>N ساختار بلوری فیلم آنرا تغییر نمی‌دهد. ساختار Cu<sub>3</sub>N در مرکز سلول واحد دارای جایگاه خالی است [۱]، اتمهای Ti می‌توانند در مرکز سلول Cu<sub>3</sub>N یا جایگزینی با جایگاههای تهی از Cu در شبکه [۷] Cu<sub>3</sub>N قرار گیرند. افزودن Ti در شبکه Cu<sub>3</sub>N بعنوان یک بافر عمل می‌کند که منجر به افزایش

شکل ۳- طیف عبور در فیلمهای  $Ti:Cu_3N$  تهیه شده در آهنگهای شارش نیتروژن مختلف (a) ۰ (b) ۵ (c) ۱۰ (d) ۱۵ (e) ۲۰ sccm

ضریب جذب بصورت رابطه لمبرت از طیف عبور بدست می آید:

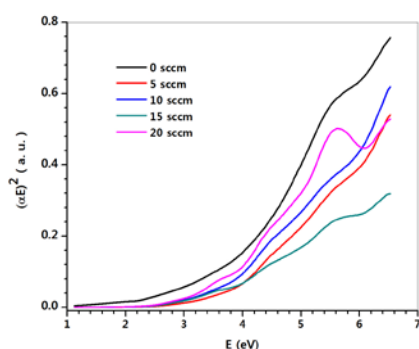
$$\alpha = \frac{1}{d} \ln\left(\frac{1}{T}\right) \quad (1)$$

d ضخامت فیلمها است که ۲۰ nm می باشد.



شکل ۴- ضریب جذب در فیلمهای  $Ti:Cu_3N$  تهیه شده در در آهنگهای شارش نیتروژن مختلف (a) ۰ (b) ۵ (c) ۱۰ (d) ۱۵ (e) ۲۰ sccm

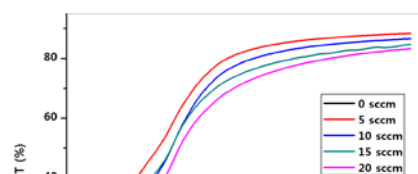
مقادیر انرژی گاف نواری بدست آمده برای  $Ti:Cu_3N$  در حدود 3eV تخمین زده می شود (شکل ۵) که بطور قابل توجهی بزرگتر از مقادیر گزارش شده برای  $Cu_3N$  فاقد Ti، 1.2- 1.9 eV هستند [۸].



شکل ۲- تصاویر SEM فیلمهای  $Ti:Cu_3N$  تهیه شده در آهنگهای شارش نیتروژن مختلف (a) ۰ (b) ۵ (c) ۱۰ (d) ۱۵ (e) ۲۰ sccm

ویژگیهای اپتیکی

شکلهای ۲ طیف عبور اپتیکی فیلمهای  $Ti:Cu_3N$  بر حسب طول موج در بازه ۱۱۰۰- ۲۰۰ nm را نشان می دهد.





دانشگاه مازندران

## مقاله نامه هفتمین کنفرانس ملی خلأ ایران

دانشگاه مازندران

۲۰ و ۲۱ آبان ۱۳۹۴

[۱] D. O. Borsa, S. Grachev, D. O. Boerma, "Development of epitaxial nitride-based bilayers for magnetic tunnel junctions"; *IEEE Trans. Magn.* 38 (2002) 2709.

[۲] C. Navio, M. J. Capitan, J. Alvarez, F. Yndurain, R. Miranda, "Intrinsic surface band bending in Cu<sub>3</sub>N(100) ultrathin films"; *Phys. Rev. B* 76 (2007) 085105.

[۳] A. Rahmati, H. Bidadi, K. Ahmadi, F. Hadian, *J. Coat. Tech. Res* 8 (2) (2011) 289

[۴] U. Hahn, W. Weber, *Phys. Rev. B* 53 (1996) 12684

[۵] X. Fan, Z. Wu, G. Zhang, C. Li, B. Geng, H. Li, P. Yan, *J. Alloys Compds.* 440 (2006) 254

[۶] J. F. Pierson, D. Horwat, *Scr. Mater.*, 58 (2008) 568

[۷] رحمتی، علی؛ " رشد فیلمهای نازک نیتريد مس با آلايش تیتانیوم با

کندوپاش مگنترونی واکنشی: مشخصه‌یابی ساختاری و پیوندهای شیمیایی"

نوزدهمین همایش بلورشناسی و کانی‌شناسی ایران، دانشگاه گلستان

(گرگان)، ۱۶ و ۱۷ شهریور ۱۳۹۰

[۸] A. Rahmati, *Vacuum* 85 (2011) 853.

[۹] A. Peled " Photo-Excited Processes, Diagnostics and Applications Fundamentals and Advanced Topics" 2003, Kluwer Academic Publisher

[۱۰] J. Singh, "Optical Properties of Condensed Matter and Applications" 2006, John Wiley & Sons Ltd.

شکل ۵- تخمین انرژی گاف‌باندی در فیلمهای Ti:Cu<sub>3</sub>N تهیه‌شده در

فشارهای نیتروژنی مختلف

انرژی گاف‌نواری در فیلمهای Ti:Cu<sub>3</sub>N دارای مقادیر

بزرگتری نسبت به مقادیر گاف‌نواری Cu<sub>3</sub>N متناظر خود در فاقد

Ti هستند. این رفتارها بطور همزمان بیانگر اثر غنی‌شدگی N در

فرایند جذب را نشان می‌دهد که منجر به شکل‌گیری مراکز پذیرنده

الکترونی مربوط به نیتروژن افزوده میان‌شبه‌کاه‌ای می‌گردد. انرژی

گاف‌نواری در فیلم غنی از N بدلیل اثر پرشدگی حفره‌ای در نوار

ظرفیت افزایش می‌یابد. این پدیده منجر به تبهگنی در لبه نوار

ظرفیت سهموی و پهن‌شدگی گاف‌نواری ( جابجایی بورشتاین-

موس ) می‌گردد [۹، ۱۰].

### نتیجه‌گیری

فیلمهای نازک Ti:Cu<sub>3</sub>N به روش کندوپاش مگنترونی

واکنشی DC با استفاده از یک هدف آلیاژی دوتایی Ti<sub>13</sub>Cu<sub>87</sub> در

محیط مخلوط نیتروژن و آرگون بر روی زیرلایه‌های تک‌بلور

سیلیکن (۱۱۱) و کوارتز تهیه شدند. با حل‌شدن Ti در ساختار

Cu<sub>3</sub>N، فیلمها بلورینگی خوبی به نمایش می‌گذارند. افزودن

تیتانیوم منجر به نیتروژن افزوده میان‌شبه‌کاه‌ای می‌گردد که نقش

مهمی در، توقف رشد دانه‌ها و پهن‌شدگی گاف‌باندی اپتیکی

نسبت به Cu<sub>3</sub>N فاقد Ti دارد.

مرجع‌ها