



تحلیل ریز ساختار و خواص اپتیکی سامانه چند لایه‌ای Ta₂O₅/Cu/V₂O₅

رضا مردانی^۱، ویشناسب سلیمانان^{۲*}، محسن قاسمی ورنامخواستی^۲

۱. دانشگاه شهرکرد، دانشکده علوم پایه، شهرکرد، ایران

۲. گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه شهرکرد، شهرکرد، ایران

چکیده

واژگان کلیدی:

در این پژوهش سامانه چند لایه‌ای Ta₂O₅/Cu/V₂O₅ به روش تبخیر حرارتی بر روی زیرلایه شیشه رشد و در دماهای بین ۳۵۰ تا ۵۵۰ درجه سانتی‌گراد با بازه ۵۰°C بازپخت شده است. آهنگ لایه نشانی برای لایه‌های Ta₂O₅ و V₂O₅ ۰/۱ nm/s و برای لایه Cu ۰/۰۵ nm/s انتخاب شده است. ریزساختار ماده چند لایه‌ای Ta₂O₅/Cu/V₂O₅ با تحلیل نمایه پراش پرتوهای x مشاهده شده و نرم‌افزار Fullprof تعیین شده اند. با مطالعه طیف مرئی - فرابنفش نمونه‌ها، به بررسی خواص نوری و همچنین تأثیر دمای بازپخت بر خواص نوری آن‌ها پرداخته شده است. از جمله خواص اپتیکی مورد بررسی در این پژوهش می‌توان به طیف عبور، طیف جذب، طیف بازتاب، انرژی گاف، ضریب خاموشی و ضریب شکست اشاره کرد. سپس تأثیر متقابل کمیت‌های ریزساختار بر خواص نوری لایه‌ها مطالعه شده است. بررسی‌ها نشان می‌دهد با افزایش دمای بازپخت، اندازه بلورک نمونه‌ها افزایش و اندازه کرنش کاهش می‌یابد. با افزایش دمای بازپخت درصد عبور و انرژی گاف کاهش و همچنین ضریب خاموشی افزایش می‌یابد.

رسانای شفاف

اندازه بلورک‌ها

دمای بازپخت

خواص نوری

گاف انرژی

تاریخ دریافت: ۱۴۰۳/۱۱/۷

تاریخ پذیرش: ۱۴۰۴/۴/۳

DOI: 10.22034/ISSST.2025.2051618.1638

Microstructure analysis and optical properties of Ta₂O₅/Cu/V₂O₅ multilayer system

Abstract

In this research, the Ta₂O₅/Cu/V₂O₅ multilayer films were grown on the glass substrate using the thermal evaporation method. This multilayer system was annealed at temperatures ranging from 350 to 550 °C with intervals of 50 °C. The deposition rate was selected for the layers Ta₂O₅ and V₂O₅ set to 0.1 nm/s, and for the Cu layer, 0.05 nm/s. The microstructure of our multilayer was determined by analyzing the observed X-ray diffraction profiles and applying the Fullprof software. The optical properties of our samples were evaluated by studying the UV-visible spectrophotometer device. The effect of annealing temperature was also studied on the optical properties of samples. Finally, the correlation between the microstructure and optical properties of layers was studied. It is found that with the increase of annealing temperature, the crystallite size and microstrain increase and decrease, respectively. With the rise of annealing temperature the transmittance percentage and energy gap decrease, while the extinction coefficient increase.

Keywords: transparent conductor, crystallite size, annealing temperature, optical properties, energy gap.

* Corresponding author E-mail: soleimanian@sku.ac.ir

۱- مقدمه

ناهمواری در فصل مشترک چندلایه‌ای‌ها و افزایش اندازه دانه‌ها سبب افزایش رسانندگی الکتریکی و بهبود شفافیت نوری این نانو مواد می‌شود [۴]. اخیراً به دلیل توانایی تولید با استفاده از مواد اولیه ارزان و روش‌های تهیه نسبتاً آسان، سامانه‌های چندلایه‌ای نازک شفاف مورد توجه پژوهشگران قرار گرفته است. معمولاً پوشش‌های چند لایه‌ای نازک شامل لایه‌های مجزا از مواد فلزی، نارسانا و نیمه‌رسانا به صورت سامانه‌های دولایه‌ای یا سه‌لایه‌ای تهیه می‌شوند. سامانه‌های دولایه‌ای شامل ترکیبی از دو لایه به صورت فلز/ فلز، دی‌الکتریک/ فلز و دی‌الکتریک/ دی‌الکتریک و سامانه‌های سه لایه‌ای شامل دی‌الکتریک/ فلز/ دی‌الکتریک هستند [۵]. در این ساختارها به منظور کاهش بازتاب نور، لایه فلزی بین دو لایه دی‌الکتریک قرار می‌گیرد در نتیجه باعث افزایش درصد عبور نور می‌شود. معمولاً لایه‌های دی‌الکتریک مورد استفاده در این چنین ساختارهایی باید دارای ضریب شکست بالا و خاصیت ضد بازتابی باشند [۶]. در این ساختارها لایه فلزی بین دو لایه دی‌الکتریک باید ضخامت کافی رداشته باشد تا رسانایی الکتریکی خوبی داشته باشد. خواص نوری و الکتریکی ساختارهای سه لایه‌ای به طور قابل توجهی به ضخامت و شرایط لایه نشانی لایه فلزی بستگی دارد [۷]. این لایه فلزی برای عبور بالا و مقاومت کم، باید نازک، یکنواخت و پیوسته باشد. اکسیدهای رسانای شفاف سه لایه‌ای دارای شفافیت نوری بالا در ناحیه مرئی و بازتاب بالا در ناحیه فروسرخ هستند [۸]. اخیراً محققان از پوشش‌های لایه نازک بر روی شیشه‌های ساختمانی برای جلوگیری از عبور گرما از پنجره‌ها استفاده می‌کنند [۵]. هرچه بازتاب نور در ناحیه فروسرخ و فرابنفش و عبور نور در ناحیه مرئی بیشتر باشد، پوشش‌ها برای عایق بندی، مطلوب‌تر خواهند بود. فلز Cu تعبیه شده بین لایه نازک اکسید بالا و پایین در ساختار چند لایه‌ای اکسید/ فلز/ اکسید می‌تواند از ویژگی‌های الکتریکی و پایداری در برابر تخریب ناشی از اکسایش فلز در یک محیط شیمیایی محافظت کند [۹]. از جمله ویژگی‌های فلز مس

کاربردهای فراوان لایه‌های نازک در فن‌آوری‌های نوین به‌گونه‌ای است که بیشتر دستگاه‌های پیچیده و جدید امروزی مانند دستگاه‌های نوری و الکترونیکی منحصراً با استفاده از لایه‌های نازک ساخته می‌شوند. توانایی مهندسی سطح که عملکردهای مختلفی را در زمان و مکان ارائه می‌دهد، باعث پیشرفت‌های مهم در وسایل الکترونیکی شده‌اند. بدین منظور با طراحی سامانه‌های چندلایه‌ای متشکل از مواد مختلف می‌توان نانو ساختارهایی با کاربردهای گسترده در زمینه ذخیره اطلاعات، حسگرهای متنوع و قطعات نوری تهیه کرد [۱]. در بررسی خواص نوری بیشترین کاربردها مربوط به سامانه‌های چندلایه‌ای متشکل از لایه‌ها با ضخامت‌ها و ضریب شکست‌های متفاوت است. مشابهت یا عدم مشابهت بین کمیت‌های ذاتی لایه‌های مختلف در مواد چندلایه‌ای (مانند شعاع اتمی، ثابت‌های شبکه، فاز بلوری، ضخامت لایه‌ها، چگالی نقص‌ها و گاف انرژی) و برهمکنش‌های تبدلی در فصل مشترک لایه‌ها که باعث تغییراتی در ماهیت ساختار بلوری، ریزساختار مواد و حتی پیدایش فازهای جدید در سیستم می‌شود، از عوامل مهم در بهبود خواص فیلم‌های چندلایه‌ای در مقایسه با تک‌لایه‌ای‌ها است [۲]. تحقیقات اولیه به وضوح نشان می‌دهد، خواص نانو ساختارها با بهینه‌سازی ویژگی‌های ریزساختاری، مانند اندازه دانه و کرنش شبکه کنترل می‌شوند. به نظر می‌رسد که مشابه با تک‌لایه‌ای‌ها، یکی از پارامترهای مؤثر در خصوصیات فیزیکی چندلایه‌ای‌های رسانای شفاف اندازه دانه یا بلورک در هر لایه است [۳]. پژوهش‌های انجام شده در این زمینه نشان می‌دهد که کوچک بودن دانه‌ها و چگالی بالای آنها در فصل مشترک چندلایه‌ای‌ها از عوامل مؤثر در خواص مکانیکی متفاوت این نانو ساختارها نسبت به تک‌لایه‌ای‌ها است. چرا که چگالی بالای دانه‌ها در فصل مشترک باعث محدود شدن حرکت نابجایی‌ها و افزایش میزان سختی می‌شود. کاهش میزان

۲- روش ساخت

ابتدا زیرلایه شیشه به ابعاد $10 \text{ mm} \times 10 \text{ mm} \times 3 \text{ mm}$ با آب و صابون شسته و در یک بشر به ترتیب با استون، اتانول، دی کلرومتان، متانول و آب مقطر هر یک به مدت ۱۰ دقیقه در دستگاه آلتراسونیک تمیز و نهایتاً با گاز نیتروژن خشک شد. برای تهیه چندلایه‌ای مورد نظر به روش تبخیر حرارتی، پودرهای Cu ، Ta_2O_5 و V_2O_5 با درجه خلوص ۹۹/۹٪ را در بوته‌های مربوط به دستگاه تبخیر حرارتی ریخته، سپس هوای داخل محفظه تا فشار 1×10^{-5} میلی بار تخلیه شد. در روش تبخیر حرارتی به صورت مرحله‌ای به بوته‌ها حرارت داده شد تا هر یک از لایه‌ها به صورت پی در پی روی زیرلایه شیشه نشاندند شوند. فشار محفظه در حین لایه نشانی 5×10^{-5} میلی بار و دمای زیرلایه در دمای 250°C تنظیم شد. آهنگ انباشت برای لایه‌های Ta_2O_5 و V_2O_5 1 nm/s و برای Cu 0.5 nm/s انتخاب شدند. برای خشک کردن زیرلایه‌ها و حرارت دادن لایه‌ها از کوره لوله‌ای^۱ مدل TF5/40-1250 استفاده شده است. نمونه‌ها در دماهای بین 350°C تا 550°C با بازه 50°C بازپخت و با نام‌های S_1 تا S_5 شماره گذاری شده‌اند.

برای بررسی خواص اپتیکی از دستگاه اسپکتروفتومتر^۲ مدل (shimadzu uv - vis) در گستره طول موجی ۲۰۰ تا ۹۰۰ نانومتر و برای تهیه نقش پراش از دستگاه پراش سنج با تابش $\text{CuK}\alpha$ به روش روبش پله‌ای با طول موج 1.5406 \AA و زاویه گام 0.2° استفاده شده است.

در سامانه چند لایه‌ای $\text{Ta}_2\text{O}_5/\text{Cu}/\text{V}_2\text{O}_5$ ضخامت لایه‌های Ta_2O_5 ، V_2O_5 و Cu به ترتیب ۵۰، ۵۰ و ۱۰ نانومتر انتخاب شد. در روش تبخیر حرارتی آهنگ انباشت و ضخامت هر لایه با استفاده از کریستال کوآرتز کنترل شد.

۳- نتایج و بحث

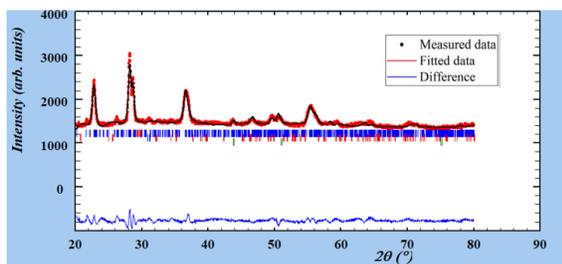
نمایه پراش مشاهده شده نمونه‌های S_1 تا S_5 در شکل ۱ نشان داده شده است. همانگونه که در شکل مشخص است با

رسانندگی بالا و جذب کمتر در ناحیه مرئی است. درست است که نقره رسانندگی بالاتری نسبت به مس دارد ولی برای مصارف عمومی و صنعتی مس مناسب‌تر است زیرا سطح نقره به تدریج اکسید می‌شود و این مسئله در کاربردهایی که سطح تماس مهم است (مانند جریان‌های بسامد بالا یا جریان‌های مداوم انتقال ولتاژ) باعث ایجاد مشکلاتی می‌شود [۱۰]. لایه نازک Ta_2O_5 یک کاندیدای ایده‌آل برای دستگاه‌های نوری است، زیرا ثابت دی‌الکتریک و ضریب شکست بالایی دارد [۱۱]. لایه‌های نازک Ta_2O_5 پایداری شیمیایی بالاتر و در نتیجه در درجه حرارت‌های بالا کمتر خواص فیزیکی خود را از دست می‌دهند [۱۲]. لایه Ta_2O_5 به دلیل ضریب شکست بالا و جذب کم در دستگاه‌هایی مانند موجرها و دستگاه‌های نوری غیر خطی، بلورهای فوتونیک، فیلترهای نوری و غیره کاربرد چشمگیری دارد [۱۳-۱۴]. از سوی دیگر V_2O_5 با توجه به ساختار خود، تطبیق پذیری بالایی دارد. این ماده پایدارترین اکسید سامانه وانادیوم است [۱۵] که به دلایل حالت اکسیداسیون اشباع V^{5+} ، فراوانی، ساختار چند لایه، گاف نواری بالا، پایداری شیمیایی و حرارتی مطلوب، کاربردهای فراوانی در صنعت دارد [۱۶]. از جمله استفاده آن در سنسجش شیمیایی، کاربردهای اپتوالکترونیک، استفاده به عنوان کاتد باتری‌ها، کاربرد در دستگاه‌های الکتروکرومیک و کاتالیزها نام برد [۱۷-۱۸]. در این پژوهش به طور جامع و کامل به تحلیل سه لایه‌ای $\text{Ta}_2\text{O}_5/\text{Cu}/\text{V}_2\text{O}_5$ پرداخته می‌شود. تا به امروزه گزارش و تحقیق دقیق و کاملی بر روی سامانه چند لایه-ای $\text{Ta}_2\text{O}_5/\text{Cu}/\text{V}_2\text{O}_5$ انجام نگرفته است. کارهای انجام شده تنها به صورت مطالعه تک لایه‌های V_2O_5 و Ta_2O_5 بوده است. ویژگی‌های ریز ساختاری و خواص اپتیکی و همبستگی بین ریزساختار و خواص اپتیکی سامانه سه لایه‌ای $\text{Ta}_2\text{O}_5/\text{Cu}/\text{V}_2\text{O}_5$ بررسی می‌شود.

^۱ Tube Furnace

^۲ Spectrophotometer

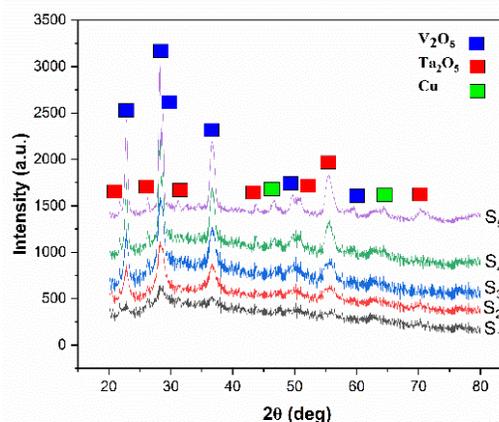
طیف شبیه سازی شده و داده‌های پراش نمونه مورد نظر، مقایسه انجام می‌شود. پارامترهای ساختار و سپس ریزساختار آنقدر پالایش می‌شود که اختلاف بین نمایه پراش مشاهده و شبیه سازی شده حداقل شود [۲۰]. در این پژوهش از بین نرم‌افزارهای رایج مبتنی بر روش ریتولد، نرم‌افزار Fullprof انتخاب شد. سپس با استفاده از تابع شکل ریاضی موسوم به تامسون - کاکس - هستینگ که ترکیبی هوشمندانه از توابع گوسی و لورنتسی است [۲۱]، خطوط پراش شبیه سازی شدند. پس از پالایش پارامترهای ساختار و ریزساختار، اندازه بلورک و کرنش شبکه هر دو فاز V_2O_5 و Ta_2O_5 تعیین شدند. در شکل ۲ به طور نوعی، نقش پراش مشاهده شده، محاسبه شده و اختلاف بین دو نقش برای نمونه S_5 فاز Ta_2O_5 نشان داده شده است.



شکل ۲. نقش پراش مشاهده شده، محاسبه شده و اختلاف بین دو نقش نمونه Ta_2O_5 در دما $550^\circ C$.

در تحلیل فوق از آنجایی که ضخامت لایه Cu نسبت به لایه‌های دیگر سامانه کمتر است، نتایج دقیقی برای ریز ساختار لایه Cu حاصل نشده و قابل گزارش نیست. همچنین با توجه به آمورف بودن نمونه S_1 خیلی نمی‌توان به نتایج ریز ساختار بدست آمده از این نمونه اطمینان داشت. در جدول ۱ و ۲ به ترتیب مقادیر درصد هر سه فاز و ثابت‌های شبکه بر حسب دمای بازپخت آمده است.

افزایش دمای بازپخت شدت قله‌های پراش افزایش یافته که نشان می‌دهد نمونه‌ها از ساختار آمورف به حالت بلورین پیش رفته‌اند. با استفاده از نرم‌افزار Xpert فازهای تشکیل شده تایید شد. مطابق شکل ۱ نقش پراش مشاهده شده شامل هر سه فاز V_2O_5 ، Ta_2O_5 و Cu می‌باشد.



شکل ۱. الگوی XRD سامانه چند لایه‌ای $Ta_2O_5/cu/V_2O_5$ در دماهای بازپخت مختلف و تعیین فاز هر ماده در دما $550^\circ C$ درجه.

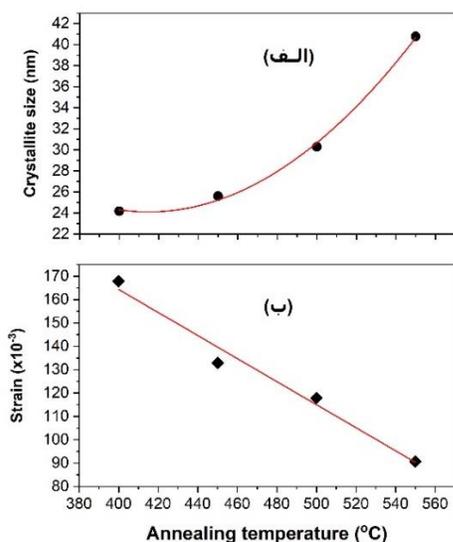
در نظریه‌های مبتنی بر پراش پرتوهای X ، کمیت‌های قابل اندازه‌گیری به دو دسته ساختار و ریزساختار تقسیم می‌شوند. تعیین ساختار عبارت است از محاسبه فاصله صفحات شبکه، ثابت‌های شبکه، نوع شبکه بلوری، درصد فازهای تشکیل دهنده مواد و موقعیت اتم‌ها در شبکه و تعیین ریزساختار شامل محاسبه اندازه و شکل بلورک‌ها، کرنش شبکه و نقص‌های شبکه‌ای می‌شود [۱۹]. در بین روش‌های مختلف تحلیل و استخراج اطلاعات از طیف پراش پرتوهای X ، با توجه به قابلیت تحلیل همزمان ساختار و ریزساختار، روش ریتولد از بقیه روش‌ها رایج‌تر است. بدین منظور، ابتدا اطلاعات اولیه ماده از قبیل تعداد فازهای تشکیل دهنده، گروه فضایی و موقعیت اتم‌های شبکه به عنوان مقادیر اولیه به نرم‌افزار مربوط داده می‌شود. نرم‌افزار با استفاده از یک تابع شکل ریاضی که عمدتاً ترکیبی از توابع گوسی و لورنتسی است، نمایه پراش، شبیه سازی می‌شود. در مرحله بعد بین

جدول ۱. درصد هر فاز در دماهای بازپخت مختلف

نمونه‌ها	Ta ₂ O ₅	V ₂ O ₅	Cu
S ₂	۱۱/۰۸	۸۴/۹۰	۱/۳۳
S ₃	۱۱/۹۷	۸۵/۹۸	۲/۰۵
S ₄	۱۰/۷۱	۸۵/۴۸	۳/۸۰
S ₅	۷/۹۷	۸۹/۶۵	۲/۳۸

جدول ۲. ثابت‌های شبکه بر حسب (Å) هر فاز در دماهای بازپخت مختلف

نمونه‌ها	Ta ₂ O ₅			V ₂ O ₅		
	a	b	c	a	b	c
S ₂	۴/۳۶۵	۳/۸۹۴	۶/۲۱۰	۱۱/۴۲۳	۴/۶۹۴	۳/۶۹۸
S ₃	۴/۳۷۰	۳/۸۹۶	۶/۲۳۳	۱۱/۱۲۷	۴/۳۸۴	۳/۶۵۸
S ₄	۴/۳۸۶	۳/۹۰۵	۶/۲۴۲	۱۱/۱۵۰	۴/۶۲۴	۳/۵۸۲
S ₅	۴/۴۰۶	۴/۰۰۵	۶/۲۷۲	۱۱/۰۲۵	۴/۶۱۸	۳/۵۵۳

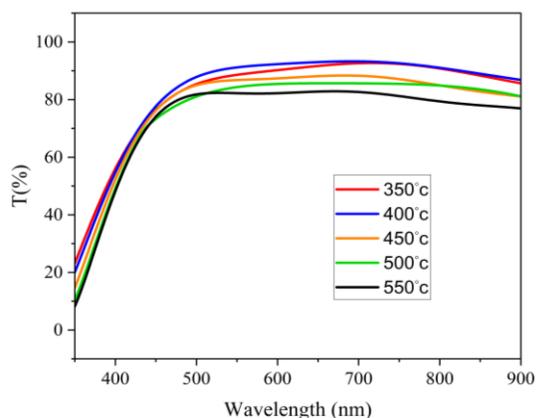


شکل ۳. (الف) تأثیر دمای بازپخت بر اندازه بلورک‌های Ta₂O₅ (ب) تأثیر دمای بازپخت بر اندازه کرنش شبکه Ta₂O₅.

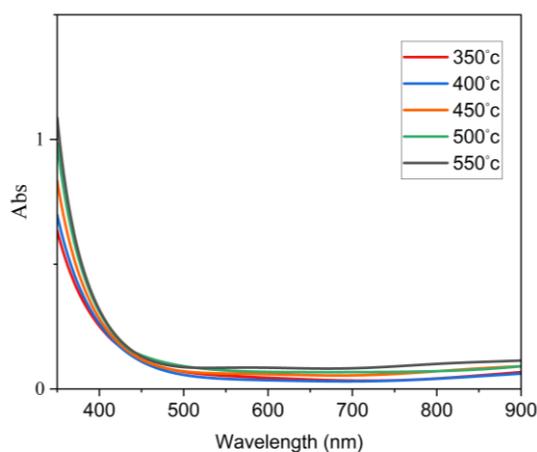
همانطور که از مقادیر درصد فاز (جدول ۱) مشخص است با افزایش دمای بازپخت تا ۵۵۰ °C، درصد فاز Ta₂O₅ در حال کاهش و V₂O₅ روبه افزایش است که می‌توان آن را به تغییرات ثابت شبکه آن‌ها نسبت داد. مطابق جدول ۲ با افزایش دما، ثابت شبکه V₂O₅ در حال کاهش است و این یعنی در یک بلورک V₂O₅، چگالی تعداد اتم‌های اکسیژن و وانادیوم در حال افزایش است که تأثیر مستقیم در افزایش درصد فاز دارد. همین فرآیند در خصوص Ta₂O₅ به صورت معکوس اتفاق می‌افتد. این نتایج با گزارش‌های انجام شده مطابقت دارد [۲۲].

شکل‌های (۳-الف) و (۳-ب) به ترتیب تأثیر دمای بازپخت بر اندازه بلورک‌ها و کرنش شبکه Ta₂O₅ را نشان می‌دهد.

ترتیب ۸۶/۳۵، ۸۷/۶۹، ۸۳/۶۶، ۸۱/۱۴ و ۷۹/۱۶ درصد است. با توجه به منحنی عبور می‌توان گفت با افزایش دما از ۴۰۰°C میزان عبور کاهش پیدا می‌کند که می‌تواند به دلیل نفوذ اتم‌های مس در لایه‌های مجاور و افزایش پراکندگی نور در نمونه‌های با دمای بازپخت بالاتر باشد. همچنین این نتایج با مرجع [۲۴] مطابقت دارد شکل ۶ طیف جذب ترکیب $Ta_2O_5 / Cu / V_2O_5$ در دمای بازپخت مختلف را نشان می‌دهد.



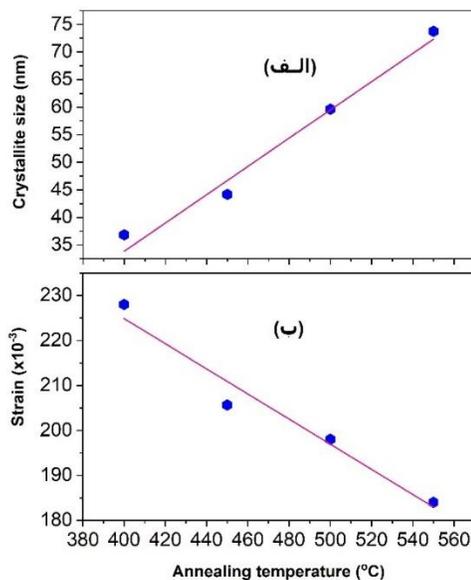
شکل ۵. طیف عبور سامانه چند لایه‌ای $Ta_2O_5 / Cu / V_2O_5$ در دماهای بازپخت مختلف.



شکل ۶: طیف جذب سامانه چند لایه‌ای $Ta_2O_5 / Cu / V_2O_5$ در دماهای بازپخت مختلف.

با توجه به شکل بالا سامانه مورد بررسی در ناحیه مرئی جذب ناچیزی از خود نشان می‌دهد و برای $\lambda < 400\text{nm}$ (ناحیه

با توجه شکل ۳ با افزایش دمای بازپخت اندازه بلورک‌های Ta_2O_5 به صورت تابع درجه دوم افزایش و کرنش شبکه به صورت خطی رو به کاهش است که نشان دهنده افزایش نظم بلوری و کاهش عیوب شبکه در اثر فرآیند بازپخت است. شکل (۴-الف) و (۴-ب) به ترتیب تاثیر دما بر اندازه بلورک‌ها و کرنش شبکه V_2O_5 را نشان می‌دهد [۲۳].



شکل ۴. (الف) تأثیر دمای بازپخت بر اندازه بلورک‌های V_2O_5 (ب) تاثیر دمای بازپخت بر اندازه کرنش شبکه V_2O_5 .

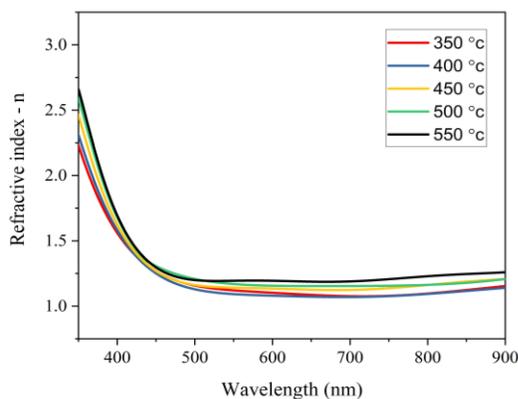
همچنین با توجه به شکل ۴ فاز V_2O_5 ، با افزایش دمای بازپخت هر دو پارامتر اندازه بلورک‌ها و کرنش به صورت خطی تغییر می‌کنند که اولی افزایشی و دومی کاهش‌ی است. این تغییرات همگی نشان از افزایش بلورینگی، نظم ساختار و همچنین کاهش عیوب شبکه در اثر افزایش دمای بازپخت است [۲۳].

خواص اپتیکی سامانه چند لایه‌ای $Ta_2O_5 / Cu / V_2O_5$

شکل ۵ طیف عبور سامانه چندلایه‌ای $Ta_2O_5 / Cu / V_2O_5$ در دمای بازپخت مختلف نشان می‌دهد.

در منحنی طیف عبور در محدوده طول موج ۴۰۰ تا ۷۸۰ نانومتر برای نمونه‌های S_1 تا S_5 میانگین عبور نمونه‌ها به

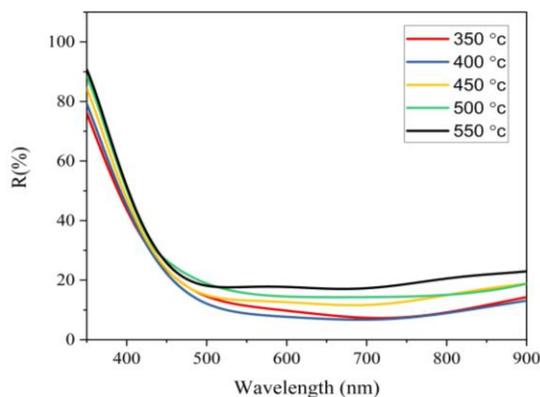
با توجه به شکل ۸ در طول موج‌های $\lambda < 400\text{nm}$ مقدار ضریب خاموشی به نسبت طول موج در ناحیه مرئی بزرگ است. بنابراین، نمونه‌ها در ناحیه مرئی شفافیت بالایی از خود نشان می‌دهند. از طول موج‌های $\lambda > 500\text{nm}$ تغییرات ضریب خاموشی برای همه نمونه‌ها به حداقل ممکن می‌رسد. همچنین با افزایش دمای بازپخت ضریب خاموشی نیز افزایش می‌یابد که علت آن افزایش اندازه بلورک‌ها ناشی از افزایش دمای بازپخت است. نتایج مشابهی در پژوهش کومار سینگ و همکاران آمده است [۲۷]. شکل ۹ ضریب شکست ترکیب $\text{Ta}_2\text{O}_5 / \text{Cu} / \text{V}_2\text{O}_5$ نشان می‌دهد.



شکل ۹. منحنی ضریب شکست بر حسب طول موج برای سامانه چند لایه‌ای $\text{Ta}_2\text{O}_5 / \text{Cu} / \text{V}_2\text{O}_5$ در دماهای بازپخت مختلف.

ضریب شکست یک ویژگی مهم برای هر ماده نوری است. ضریب شکست نقش اساسی در انتخاب مواد مورد استفاده برای ساخت دستگاه‌های نوری دارد و بسیاری از پدیده‌های نوری به اندازه این ضریب بستگی دارند. میانگین ضریب شکست نمونه‌های $\text{Ta}_2\text{O}_5 / \text{Cu} / \text{V}_2\text{O}_5$ در لبه جذبشان برابر $2/78$ است. به دلیل ضریب شکست بالا، سامانه $\text{Ta}_2\text{O}_5 / \text{Cu} / \text{V}_2\text{O}_5$ گزینه مناسبی برای کاربردهای اپتوالکترونیک است. با توجه به شکل ۹ در طول موج‌های $\lambda > 400\text{nm}$ ضریب شکست برای همه نمونه‌ها تقریباً به طور یکسان کاهش پیدا می‌کند. از طول موج‌های $\lambda > 500\text{nm}$ افت و خیز تغییرات ضریب شکست با طول

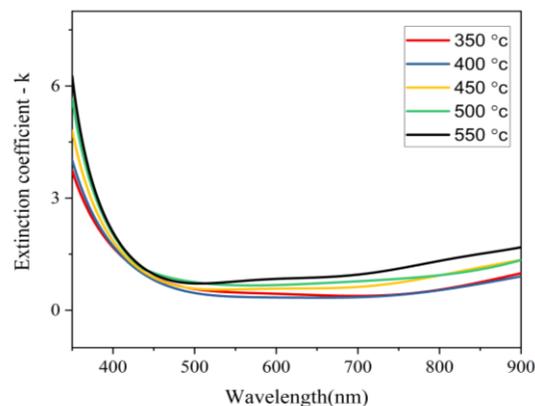
فرابنفش) انرژی فوتون تابشی از گاف انرژی موثر سامانه بزرگتر بوده و لذا جذب بالاتری رخ می‌دهد [۲۵]. شکل ۷ نشان دهنده طیف بازتاب سامانه چندلایه‌ای $\text{Ta}_2\text{O}_5 / \text{Cu} / \text{V}_2\text{O}_5$ در دمای بازپخت مختلف است.



شکل ۷. طیف بازتاب سامانه چند لایه‌ای $\text{Ta}_2\text{O}_5 / \text{Cu} / \text{V}_2\text{O}_5$ در دماهای بازپخت مختلف.

به دلیل شفافیت بالای نمونه‌ها در محدوده مرئی، میانگین بازتاب آن‌ها کمتر از ۱۶ درصد است. بنابراین، اثر دمای بازپخت بر بازتاب قابل توجه به نظر نمی‌رسد. همین نتایج در پژوهش‌های لایه‌های اکسید/فلز/اکسید توسط دیگران نیز گزارش شده است [۲۶].

شکل ۸ منحنی ضریب خاموشی سامانه چند لایه‌ای $\text{Ta}_2\text{O}_5 / \text{Cu} / \text{V}_2\text{O}_5$ را مشخص می‌کند.



شکل ۸. منحنی ضریب خاموشی بر حسب طول موج برای سامانه چند لایه‌ای $\text{Ta}_2\text{O}_5 / \text{Cu} / \text{V}_2\text{O}_5$ در دماهای بازپخت مختلف.

با توجه به جدول ۳، با افزایش دمای بازپخت، گاف انرژی از ۳/۸۰ تا ۳/۵۶ الکترون ولت کاهش پیدا کرده است. همچنین باید توجه داشت که جای خالی اکسیژن در سامانه $Ta_2O_5/cu/V_2O_5$ پس از بازپخت در هوا کمتر می‌شود. این تغییرات در گاف انرژی را می‌توان به کاهش عیوب در لایه‌های نازک با افزایش دمای بازپخت نسبت داد. [۳۰]. نتایج مشابهی در پژوهش لی و همکاران [۳۱] در بررسی ساختار اکسید/فلز/اکسید آمده است.

به منظور بررسی دقیق‌تر دلایل رفتار تغییرات گاف انرژی موثر نمونه‌ها، می‌بایست رابطه بین گاف انرژی و پارامترهای ریزساختار شبکه بررسی شود.

بین گاف انرژی حالت نانو ($E_{g,nanoscale}$) و توده‌ای ($E_{g,bulk}$) رابطه زیر برقرار است.

$$E_{g,nanoscale} = E_{g,bulk} + \Delta E \quad (1)$$

ΔE ، اختلاف گاف انرژی حالت‌های نانو و توده‌ای را نشان می‌دهد. این اختلاف می‌تواند ناشی از تغییرات اندازه بلورک و کرنش همگن شبکه باشد. وابستگی گاف انرژی به اندازه نقاط کوانتومی کروی R را می‌توان با رابطه زیر بیان کرد [۳۲].

$$\Delta E_{size} = E_B \left(\frac{\pi a_B}{R} \right)^2 \quad (2)$$

E_B و a_B به ترتیب انرژی اکسیتون و شعاع بوهر است. پارامتر R به صورت $R = \frac{\langle D_v \rangle}{2}$ بیان می‌شود. در پژوهش‌های تجربی بین میانگین کرنش همگن (ϵ_{zz}) در امتداد محور c و تغییر گاف انرژی رابطه زیر برقرار است [۲۶].

$$\Delta E_{strain} = A \epsilon_{zz} \quad (3)$$

که در آن ϵ_{zz} با رابطه زیر به ثابت شبکه (c) مربوط می‌شود.

$$\epsilon_{zz} = \frac{c - c_0}{c_0} \quad (4)$$

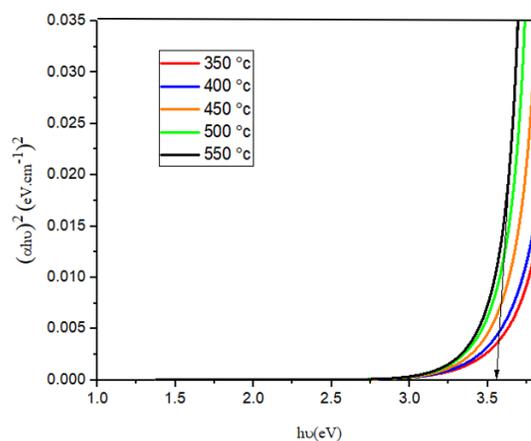
موارد فوق را می‌توان در رابطه زیر خلاصه کرد.

$$E_{g,nanoscale} = E_{g,bulk} + A \epsilon_{zz} + \frac{B}{\langle D_v \rangle^2} \quad (5)$$

موج برای همه نمونه‌ها به حداقل ممکن می‌رسد. رفتار مشابه با این نتایج توسط امین و همکاران برای لایه‌های نازک TiO_2-SiO_2 گزارش شده است. [۲۸].

گاف انرژی لایه نازک $Ta_2O_5/cu/V_2O_5$

برای تعیین گاف انرژی باید منحنی تغییرات $(\alpha h\nu)^2$ را برحسب $h\nu$ رسم کرد سپس با برازش خط راست بر محدوده خطی منحنی‌ها از محل قطع خط راست با محور $h\nu$ مقدار گاف انرژی تعیین می‌شود. در شکل ۱۰ منحنی-های $(\alpha h\nu)^2$ ($eV \cdot cm^{-1}$) بر حسب $h\nu$ (eV) و همچنین برازش خط راست برای ۵ نمونه مورد نظر رسم شده است و در جدول ۳ مقدار گاف انرژی برای هر نمونه مشخص شده است [۲۹].



شکل ۱۰. نمودار $(\alpha h\nu)^2$ برحسب $h\nu$ برای سامانه چند لایه‌ای $Ta_2O_5/Cu/V_2O_5$ در دماهای بازپخت مختلف.

جدول ۳. گاف انرژی سامانه چند لایه‌ای $Ta_2O_5/Cu/V_2O_5$ در دماهای بازپخت مختلف

نمونه ها	گاف انرژی (eV)
۳۵۰°C	۳/۸۰
۴۰۰°C	۳/۷۳
۴۵۰°C	۳/۶۵
۵۰۰°C	۳/۶۰
۵۵۰°C	۳/۵۶

۴- نتیجه گیری

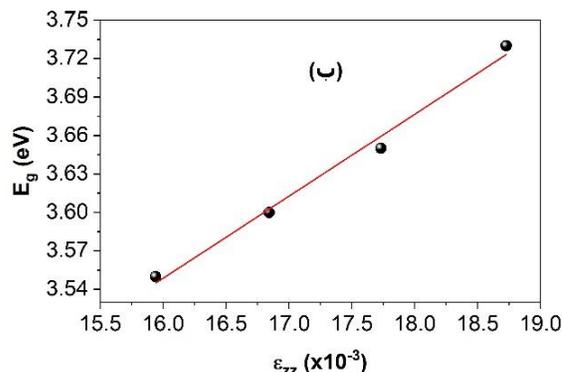
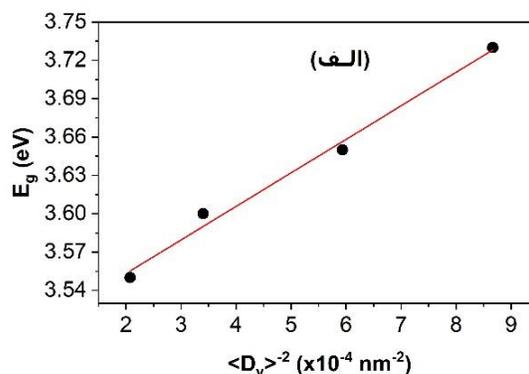
در این پژوهش سامانه سه لایه‌ای $Ta_2O_5/Cu/V_2O_5$ به روش لایه نشانی تبخیر حرارتی بر روی زیرلایه‌های شیشه تهیه و سپس نمونه‌ها در دماهای ۳۵۰، ۴۰۰، ۴۵۰، ۵۰۰ و ۵۵۰ درجه سانتیگراد بازپخت شدند. با بررسی طیف پراش پرتو X مشاهده شده نمونه‌ها و به کمک نرم‌افزار Fullprof. ریزساختار نمونه‌ها به دست آمد. همچنین خواص نوری این سه لایه‌ای به وسیله دستگاه اسپکتروفتومتر بررسی شد که نتایج حاصل به این صورت است که با افزایش دمای بازپخت، اندازه بلورک نمونه‌ها افزایش و اندازه کرنش کاهش می‌یابد و با افزایش دمای بازپخت درصد عبور و انرژی گاف کاهش و همچنین ضریب خاموشی افزایش می‌یابد.

۵- مراجع

- [1] J. Kahn . “Nanotechnology”. National Geographic. (2006) 98-119.
- [2] N. Mustapha and A. Alyamani. “Effects of high dose gamma irradiation on ITO thin film properties”. Thin Solid Films. 611 (2016) 27-32.
- [3] H. Hartnagel. “Semiconducting Transparent Thin Films”. Taylor & Francis. (1995).
- [4] Y.S. Choi, J.U. Yun and S.E. Park. “Flat panel display glass: Current status and future”. NonCrystalline Solids. 431 (2016) 2-7.
- [5] S.V.N. Pammi, N.J. Seong and S.G. Yoon. “Indium Tin Oxide Thin films Crystallized at a low temperature using a Nanocluster deposition Technique”. Scripta Materialia. 61 (2009) 867-870.
- [6] M. Johnson and Q. Zhang. “Titanium carbide MXene: synthesis, electrical and optical properties and their applications in sensors and energy storage devices”. Nanomaterials and Nanotechnology. 9 (2019) 1-9.
- [7] K. Wang, H. Wu, Y. Meng, Y. Zhang and Z. Wei. “Integrated energy storage and electrochromic function in one flexible device: an energy storage smart window”. Energy & Environmental Science Journal. 8 (2012) 8384-8389.

که در آن A و B مقادیر ثابت هستند.

بدین منظور با توجه به مقادیر درصد فاز جدول ۱، میانگین وزنی دو کمیت اندازه بلورک و کرنش همگن شبکه تعیین و رفتار گاف انرژی بر حسب معکوس مربع اندازه بلورک‌ها و کرنش همگن به ترتیب در شکل های (۱۱-الف) و (۱۱-ب) نمایش داده شد.



شکل ۱۱. (الف) منحنی معکوس مربع اندازه بلورک‌ها با گاف انرژی $Ta_2O_5/Cu/V_2O_5$. (ب) منحنی کرنش همگن با گاف انرژی $Ta_2O_5/Cu/V_2O_5$.

همانطور که در شکل ۱۱ نشان داده شده است، با افزایش مربع معکوس اندازه بلورک‌ها (شکل ۱۱-الف) و کرنش همگن (شکل ۱۱-ب) گاف انرژی به صورت خطی افزایش می‌یابد که با رابطه (۵) تطبیق دارد. مشابه همین رفتار در مرجع [۳۳] نیز دیده می‌شود.

- [17] M.O. Diniz, A.F. Golin, M.C. Santos, R.F. Bianchi and E.M. Guerra. "Improving performance of polymer-based ammonia gas sensor using POMA/ V2O5 hybrid films". *Organic Electronics*. 67 (2019) 215-221.
- [18] M.C. Santos, O.H.C. Hamdan, S.A. Valverde, E.M. Guerra and R.F. Bianchi. "Synthesis and characterization of V2O5/PANI thin films for application in amperometric ammonia gas sensors". *Organic Electronics*. 65 (2019) 116-120.
- [19] C.O. Mosiori. "Inorganic Ternary Thin films -Analysis of Optical Properties". Anchor Academic Publishing. (2015) 210.
- [20] S.Y. Wang, W. Wang and Z.H. Lu. "Asynchronous pulse ultrasonic spray pyrolysis deposition of CuxS (x=1-2) thin films", *Materials Science and Engineering*. 103(2) (2003) 184-188.
- [21] N. Popa. "The (hkl) dependence of diffraction-line broadening caused by strain and size for all Laue groups in Rietveld refinement". *Journal of Applied Crystallography*. 31(2) (1998) 176-80.
- [22] K. M. Shafeeq, V. P. Athira, R. Kishor and P. M. Aneesh. "Structural and optical properties of V2O5 nanostructures grown by thermal decomposition". *Applied physics A*. 126 (2020) 586.
- [23] M. Shukur, K. Kumar and G. Narsinga. "Influence of annealing temperature on crystallite size and optical band gap of LaMnO3 nanocrystallites". *Mechanical Engineering*. 7 (2022).
- [24] M. Ghasemi Varnamkhasti, E. Shahriari. "Influence of heat treatment on characteristics of In2O3/Ag/MoO3 multilayer films as transparent anode for optoelectronic applications". *Appl. Phys. B*, 120 (2015) 517-525.
- [25] H. Zhang, Y. Wang, L. Gao and K. Wang. "Electrochemical and enhanced photoelectrochemical properties of a hybrid film composed of anionic sandwich-type heteropolyoxotungstate and cationic
- [8] R.E. Halsted, M.R. Lorenz, B. Segall, J. "Band edge emission properties of CdTe" *Phys. Chem. Solids* 22 (1961) 109
- [9] S.S. Hegedus, B.E. McCandless, Sol. "CdTe contacts for CdTe/CdS solar cells: Effect of Cu thickness, surface preparation and recontacting on device performance and stability" *Energy. Mater. & Sol. Cells* 88 (2005) 75
- [10] D. Grecu, A.D. Compaan. "Photoluminescence study of Cu diffusion and electromigration in CdTe" *Appl. Phys. Lett.* 75 (1999) 361
- [11] D.T. Nguyen, S. Vedraïne, L. Cattin, P. Torchio, M. Morsli, F. Flory and J.C. Bernède. "Effect of the thickness of the MoO3 layers on optical properties of MoO3/Ag/MoO3 multilayer structures". *Journal Of Applied Physics*. 112 (2012).
- [12] V. Sittinger, M. Hofer, T. Harig, M. Justianto, H. Thiem, M. Vergohl and L. Schafer. "Optical grade SiO2 films prepared by HWCVD". *Surface and Coating Technology*. 336 (2018) 61– 66.
- [13] M. Johnson, Q. Zhang and D. Wang. "Titanium carbide MXene: synthesis, electrical and optical properties and their applications in sensors and energy storage devices". *Nanomaterials and Nanotechnology*. 9 (2019) 1-9.
- [14] M. Rafiee, S. Chandra, H. Ahmed and S.J. McCormack. "An overview of various configurations of Luminescent Solar Concentrators for photovoltaic applications". *Optical Materials*. 91 (2019) 212– 227.
- [15] M.O. Diniz, D.T. Cestarolli, R.F. Bianchi and E.M. Guerra. "Electrical Characterization of V2O5/POMA Deposited by the Casting Technique". *Composites Biodegradable Polymers*. 8 (2020) 1-6.
- [16] M. M. Alam, A.M. Asiri and M. Mrahman. "Fabrication of phenylhydrazine sensor with V2O5 doped ZnO nanocomposites". *Materials Chemistry and Physics*. 243 (2020) 122658.

hemicyanine”. Applied Electrochemistry. 46 (2016) 505-514.

[26] A. Soltanian, M. Ghasemi Varnamkhashti, L. Eftekhari and V. Soleimanian. “Correlation between the optical and microstructural characteristics and surface wettability transition of In₂O₃:Sn/ZnO nanostructured bilayer system for self-cleaning”. Physica Scripta. 98 (2023) 7.

[27] P. k. Singh, S. K. Tripathi, D. K. Dwivedi. “Effect of thermal annealing on structural and optical properties of In doped Ge-Se-Te chalcogenide thin films”. 37 (2019) 554-562.

[28] O. Amin, J. Kadhim, A. Ameen and T. Abdulwahid. “Structural and optical properties of thermally annealed TiO₂-SiO₂ binary thin films synthesized by sol-gel method”. Materials Science: Materials in Electronics. 29 (2018) 16010-16020.

[29] H. Frey and H.R. Khan. “Handbook of Thin-Film Technology”. Heidelberg: Springer. (2015).

[30] Y. Liu, Q.Xuan Li, L.Yu Wan, B. Kucukgok , E. Ghafari , T. Ferguson, X. Zhang, S. Wang , Z. Chuan Feng and N. Lu. “Composition and temperature dependent optical properties of Al_xGa_{1-x}N alloy by spectroscopic ellipsometry”. Applied Surface Science. 421 (2017) 389-396.

[31] L. Liu, Sh. Ma, H. Wu, Bo. Zhu. “Effect of the annealing process on electrical and optical properties of SnO₂ /Ag / SnO₂ nanometric multilayer film”. Materials Letters. 149. 2015. 43-46.

[32] Y. Kayanuma. “Quantum-size effects of interacting electrons and holes in semiconductor microcrystals with spherical shape” Physical Review B. 38 (1988) 9797-9805.

[33] V. Soleimanian , M. Saeedi, A. Mokhtar. “The influence of heat treatment on the crystallite size, dislocation density, stacking faults probability and optical band gap of nanostructured cadmium sulfide films”. Materials Science in Semiconductor Processing. 30 (2015) 118-127.