

## اثر دمای بازپخت بر خواص اپتیکی لایه‌های نازک کادمیوم تلوراید

لیدا بابازاده حبشی<sup>۱</sup>، منیر کمالیان<sup>۱</sup>، مریم قلی‌زاده آرشتی<sup>۱</sup> و ابراهیم حسنی<sup>۲</sup>

<sup>۱</sup> گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، واحد یادگار امام خمینی (ره) شهرری، دانشگاه آزاد اسلامی، تهران، ایران

<sup>۲</sup> دانشکده فیزیک کاربردی، کالج پزشکی و علوم کاربردی، دانشگاه چرمو، چمچمال، اقلیم کردستان، عراق

پست الکترونیکی: l.babazadeh@iausr.ac.ir

(دریافت مقاله: ۱۴۰۱/۰۵/۲۷؛ دریافت نسخه نهایی: ۱۴۰۲/۰۱/۲۳)

### چکیده:

نانوذرات کادمیوم تلوراید با روش تبخیر حرارتی در دمای ۳۷۳ K و فشار  $2/7 \text{ mPa}$  بر روی زیرلایه‌های شیشه لایه نشانی شده و لایه‌های نازک با ضخامت حدود  $100 \text{ nm}$  ساخته شدند. لایه‌های تهیه شده درون دستگاه طیف سنجی فرابنفش- مرئی (UV-Vis) قرار گرفتند تا خواص اپتیکی لایه‌های نازک مطالعه شود. به منظور بررسی اثر دمای بازپخت بر خواص اپتیکی لایه‌های نازک کادمیوم تلوراید، این لایه‌ها در دماهای K (۳۷۳-۳۲۳) بازپخت شدند. طیف‌های جذب نور از لایه‌ها قبل و بعد از بازپخت ثبت شده طیف سنجی UV-Vis در محدوده طول موج  $300 \text{ nm}$  -  $600 \text{ nm}$  نشان می‌دهند که میزان جذب نور در لایه‌ها با افزایش دمای بازپخت افزایش یافته است. گاف انرژی اپتیکی لایه رشد یافته روند کاهشی را از  $1/519 \text{ eV}$  پس از بازپخت دارد. نتایج حاصل از نمودار تاک کاهش گاف انرژی با افزایش دمای بازپخت را نشان می‌دهد. ضرایب خاموشی و شکست لایه‌های نازک با افزایش انرژی فوتون و دمای بازپخت افزایش یافتند. تراکم نسبی و قطبش‌پذیری الکترونی لایه‌های رشد یافته پس از بازپخت افزایش می‌یابند. سایر پارامترهای اپتیکی به دست آمده در این کار از جمله قسمت‌های حقیقی و موهومی ثابت دی‌الکتریک با افزایش دمای بازپخت افزایش یافتند در حالی که تابع اتلاف انرژی سطحی و حجمی کاهش یافتند. نتایج این کار نشان می‌دهد لایه‌های رشد یافته کادمیوم تلوراید که در دمای ۳۷۳ K بازپخت شدند خواص اپتیکی مطلوب‌تری برای کاربردهای الکترواپتیکی دارند.

**واژه‌های کلیدی:** کادمیوم تلوراید، لایه‌نشانی تبخیر حرارتی، گاف انرژی اپتیکی، ضریب خاموشی، قطبش‌پذیری الکترونی، ثابت دی‌الکتریک

اهمیت و جایگاه ویژه‌ای در تحقیقات اخیر محققان برخوردار بوده

به طوری که نسل دوم سلول‌های خورشیدی بر پایه این ماده است.

همچنین ارزان بودن و تنوع روش‌های سنتز و ساخت کادمیوم

تلوراید در مقابل سایر نیم‌رساناها (مانند سیلیکون)، باعث شده دامنه

تحقیقات در زمینه بهینه کردن خواص ساختاری، اپتیکی و

الکتریکی لایه‌های نازک تهیه شده از این ماده روز به روز افزایش

یابد. بهبود بازدهی سلول‌های خورشیدی به عوامل زیادی از جمله

انتخاب مناسب زیرلایه (شیشه، فلز، پلیمر و غیره) و تنظیم

پارامترهای مؤثر در طول فرایند لایه‌نشانی مانند مدت زمان، دما و

فشار لایه‌نشانی و نرخ رشد لایه وابسته است [۸-۱۱]. علاوه بر

انتخاب بهترین شرایط در حین لایه‌نشانی، با قرار دادن لایه‌های

### ۱. مقدمه

امروزه برای ساخت دستگاه‌های الکترونیکی و الکترواپتیکی

مانند ترانزیستورها، آشکارسازها، فتوکاتالیست‌ها، نانوحسگرها و

دیویدهای نوری و همچنین به منظور استفاده بهینه از انرژی

خورشیدی، لایه‌های نازک نیم‌رسانا با ضخامت‌های نانومتر و

میکرومتر مورد توجه بسیاری از محققان و شرکت‌های تولیدی

قرار گرفته است [۱-۶]. این نیم‌رساناها به دلیل داشتن گاف انرژی

متفاوت، کاربردهای مختلفی دارند. در میان این نیم‌رساناها و از

گروه II-IV، کادمیوم تلوراید (CdTe) به علت ضریب جذب بالا

( $>10^5$ ) [۷] و گاف انرژی اپتیکی آرمانی (حدود  $1/5 \text{ eV}$ ) از

## ۲. روش تحقیق

نانوذرات کادمیوم تلوراید سنتز شده به روش سونوشیمیایی [۲۸] درون منبع تبخیر که به شکل بوتۀ قایق مانند مسطح از جنس مولیبدن است قرار می‌گیرد. با اعمال ولتاژ مناسب، جریان عبوری از ماده باعث گرم شدن و تبخیر ذرات کادمیوم تلوراید شده و نانو ذرات تبخیر شده بر روی زیرلایه‌هایی که توسط یک نگهدارنده در فاصله ۲۵ cm از بوتۀ قرار دارد انباشت می‌شود. قبل از شروع فرایند لایه‌نشانی، تمامی زیرلایه‌ها که از جنس شیشه و به ضخامت ۲ mm هستند به دقت توسط آب مقطر و استون به مدت ۱۰ دقیقه شسته شده و خشک شدند. در طی فرایند لایه‌نشانی با روش تبخیر حرارتی که ۳۰ دقیقه به طول انجامید، فشار و دمای محفظه لایه‌نشانی به ترتیب در ۲/۷ mPa و ۳۷۳ K تنظیم شدند. توان خروجی دستگاه و سرعت لایه‌نشانی نیز به ترتیب در ۱۰۰۰ W و ۱ Å/s تنظیم شدند. پس از تهیه لایه‌های نازک رشد یافته، این لایه‌ها درون کوره به مدت یک ساعت در دماهای ۳۲۳ K و ۳۴۳ K و ۳۷۳ K قرار گرفتند و اثر دمای بازپخت بر روی خواص اپتیکی لایه‌ها مورد مطالعه قرار گرفت. طیف‌های جذب نورتوسط لایه‌های نازک کادمیوم تلوراید با استفاده از طیف‌سنج فرابنفش - مرئی (UV-Vis) (مدل لامبدا ۲۵۷، ساخت شرکت پارکین المر<sup>۸</sup>، محصول آمریکا) در دمای اتاق (حدود ۳۰۰ K) و در محدوده طول موجی ۶۰۰-۱۶۰۰ nm تهیه شدند. الگوی پراش پرتو ایکس لایه‌های کادمیوم تلوراید انباشت شده بر روی شیشه با استفاده از پراش‌سنج پرتو ایکس (XRD) (مدل X'Pert PRO MPD ساخت شرکت PANalytical هلند) در رنج ۱۰° تا ۸۰° با اندازه گام 0.026 min-1 به وسیله تابش مس با طول موج ۱/۵۴۰۶۰ Å تهیه شد. ریخت‌شناسی سطح لایه‌ها با استفاده از تصاویر گرفته شده توسط میکروسکوپ الکترونی روبشی نشر میدانی (FE-SEM) (مدل MIRA3، ساخت شرکت TE-SCAN، چک) بررسی شد.

رشدیافته تحت برخی شرایط مانند بازپخت کردن (در هوا، خلأ و یا برخی گازها) و فشارهای خیلی بالاتر از فشار اتمسفر می‌توان خواص اپتیکی لایه‌ها را بهبود داد [۱۲-۱۴]. محمد آجل و همکارانش با استفاده از تابش هسته‌ای گاما بر روی لایه‌های رشدیافته کادمیوم تلوراید، افزایش ضریب جذب لایه را پس از تابش گاما نشان دادند [۱۵]. بازده سلول‌های خورشیدی که توسط عدل کدوس و همکارانش بر پایه لایه نازک کادمیوم تلوراید و کادمیوم سلنید (CdSe) شبیه‌سازی شد حدود ۴۴٪ گزارش شده است [۱۶]. اخیراً شرکت فرست سولار<sup>۱</sup> با استفاده از اتصال p-n کادمیوم تلوراید با کادمیوم سولفید (CdS) موفق به ساخت سلول‌های خورشیدی با بازدهی ۲۲/۱٪ شد [۱۷]. در این اتصال‌ها، کادمیوم سلنید یا کادمیوم سولفید به عنوان لایه‌های موسوم به پنجره استفاده می‌شوند که ضخامت آنها معمولاً کمتر از ۲۰۰ nm است [۱۸] و با تنظیم لایه کادمیوم تلوراید و افزودن لایه‌هایی به عنوان بافر می‌توان بازده سلول خورشیدی را افزایش داد [۱۹]. روش‌های لایه‌نشانی زیادی برای رشد و تهیه لایه‌های نازک کادمیوم تلوراید وجود دارد که می‌توان به لایه‌نشانی از طریق رسوب فیزیکی بخار<sup>۲</sup> [۲۰]، رسوب شیمیایی بخار<sup>۳</sup> [۲۱]، برآرایی باریکه مولکولی<sup>۴</sup> [۲۲]، لیزر پالسی<sup>۵</sup> [۲۳]، تصعید فضای بسته<sup>۶</sup> [۲۴]، افشانه [۲۵] و رسوب‌دهی الکتروشیمیایی [۲۶] اشاره کرد. تبخیر حرارتی یکی از مؤثرترین روش‌ها برای رشد لایه‌های نازک بر روی زیرلایه‌هاست. در این روش، ذرات تبخیر شده با سرعت بالا و در یک مسیر مستقیم به طرف زیرلایه حرکت می‌کنند و بنابراین اتلاف ذرات و امکان اکسیدشدن ماده بر روی زیرلایه به حداقل می‌رسد و در نتیجه لایه‌های ساخته شده بالاترین کیفیت را دارند [۲۷]. در کار ارائه شده، نانوذرات کادمیوم تلوراید با روش تبخیر حرارتی بر روی زیرلایه شیشه لایه‌نشانی شده و اثر دمای بازپخت بر روی خواص اپتیکی لایه‌ها بررسی شد تا شرایط بهینه جذب لایه نازک کادمیوم تلوراید تعیین شود.

۱. First Solar

۲. Physical vapor deposition

۳. Chemical vapor deposition

۴. Molecular-beam epitaxy

۵. Pluse laser deposition

۶. Close - spaced sublimation

۷. Lambda

۸. Parkin Elmer

## ۳. یافته ها و بحث

## ۳.۱. مطالعه خواص اپتیکی

## تأثیر دمای بازپخت بر گاف انرژی

طیف اپتیکی جذب نور در لایه های نازک رشدیافته کادمیوم تلوراید قبل و بعد از بازپخت لایه ها با استفاده از دستگاه طیفسنج نوری UV-Vis در دمای اتاق و در بازه طول موج ۱۶۰۰-۶۰۰ nm تهیه شده و در شکل ۱ الف نمایش داده شده است. مقدار نور جذب شده (A) در لایه ها از لگاریتم نسبت شدت نور فرودی به سطح لایه (I0) به شدت نور عبوری از سطح آن لایه I به صورت  $A = \log(I0/I)$  محاسبه می شود. مقدار جذب نور توسط لایه های رشدیافته کادمیوم تلوراید با افزایش طول موج روند کاهشی دارند و در طول موج های بزرگ تر ( $\lambda > 800 \text{ nm}$ )، جذب نور به کمترین مقدار خود می رسد که نشان دهنده شفاف بودن لایه های کادمیوم تلوراید در ناحیه فرورسوخ است [۲۹]. شکل ۱ الف نشان می دهد که جذب نور توسط لایه های رشدیافته با افزایش دمای بازپخت افزایش می یابد که ناشی از افزایش تحرک و غلظت بارهای آزاد است و می توان به اندازه و نحوه توزیع نانوذرات کادمیوم تلوراید بر روی سطح زیرلایه مرتبط کرد [۷]. لبه جذب مشخص شده در طیف جذب با افزایش دمای بازپخت به سمت طول موج های کوتاه تر انتقال پیدا کرده که بیانگر افزایش بلورینگی لایه های پلی کریستال کادمیوم تلوراید است. در طول فرایند بازپخت، شکستن پیوند و آرایش مجدد آن می تواند اتفاق بیفتد و منجر به تغییر ساختار موضعی لایه ها مانند پیکربندی مجدد اتمی و مولکولی شده که با تغییر پارامترهای نوری و جابه جایی لبه جذب همراه است [۳۰]. ضریب جذب نور لایه  $\alpha$  با ضخامت d که از رابطه بیر-لامبرت-بوگوه ( $\alpha = 2/303 A/d$ ) به دست می آید [۳۱]، در انرژی های فوتون کمتر از گاف اپتیکی، وابستگی نمایی به انرژی فوتون دارد که به قانون اورباخ<sup>۱</sup> معروف است [۳۲].

$$\alpha = (hv) = B \exp\left(\frac{hv}{E_U}\right), \quad (1)$$

که در آن B مقدار ثابت است و EU بیانگر انرژی اورباخ است و از معکوس شیب نمودار  $\ln(\alpha)$  بر حسب انرژی فوتون تعیین

می شود که در شکل ۱ ب رسم شده است. اختلافات ساختاری، نقص در استکیومتری، انفعالات در سطح لایه و ارتعاشات حرارتی و غیره، انرژی پسماندی را در گاف انرژی ایجاد می کند. که با انرژی اورباخ مشخص می شود [۳۳]. همچنین انرژی اورباخ به عوامل خارجی از جمله دمای بازپخت که در بی نظمی بلورها مؤثرند، بستگی دارد [۳۴]. با افزایش دمای بازپخت انرژی اورباخ لایه ها کاهش می یابد که بیانگر کاهش نقص در لایه و بهبود پیوند بین نانوذرات است و منجر به بهبود بلورینگی لایه می شود. انرژی اورباخ به دست آمده برای لایه ها در جدول ۱ فهرست شده است. نمودار تاک از معادله زیر به دست آمده و در شکل ۱ پ رسم شده است [۳۵].

$$(\alpha hv)^n = C(hv - E_g), \quad (2)$$

C در این رابطه مقدار ثابتی است که بستگی به میزان تحرک بارها دارد و بین  $10^7 - 10^8 \text{ m}^{-1}$  است. مقدار n برای نیم رساناهایی مانند کادمیوم تلوراید که گاف انرژی مستقیم دارند برابر با ۲ است [۳۶].  $E_g$  گاف انرژی اپتیکی است که از شیب خطی نمودار تاک جایی که ضریب جذب  $\alpha$  برابر با صفر شود محاسبه می شود. گاف انرژی به دست آمده برای لایه های رشدیافته قبل از بازپخت حدود  $1.519 \text{ eV}$  است که با مقدار به دست آمده در کار قبلی مطابقت دارد [۳۷]. با افزایش دمای بازپخت، گاف انرژی کاهش یافته و به مقدار  $1.479 \text{ eV}$  می رسد که به دلیل جابه جایی لبه جذب به طرف طول موج های کوتاه تر است و می توان به افزایش تنش ناشی از عدم تطابق نانوذرات کادمیوم تلوراید و زیرلایه پس از بازپخت نسبت داد [۳۷]. مقادیر گاف انرژی لایه ها در جدول ۱ آورده شده است.

## تأثیر دمای بازپخت بر ضرایب خاموشی و شکست

پارامترهای اپتیکی ضریب خاموشی (k) و ضریب شکست (n) لایه های نازک، از روابط زیر به دست آمده [۳۰] و در شکل ۲ بر حسب انرژی فوتون رسم شده اند.

$$k = \frac{\alpha \lambda}{4\pi}, \quad (3)$$

<sup>1</sup> Urbach

شکست لایه‌های رشدیافته را با انرژی فوتون نشان می‌دهد که ممکن است به علت تراکم و فشردگی نانوذرات سنتز شده باشد [۲۸]. همان گونه که مشاهده می‌شود ضریب شکست لایه‌ها پس از بازپخت در مقایسه با لایه‌ای که تحت بازپخت قرار نگرفته است افزایش می‌یابد که می‌تواند به افزایش تطابق بسامد تابش الکترومغناطیسی و الکترون‌ها در ماده در اثر بازپخت نسبت داده شود [۴۰]. مقادیر ضریب خاموشی و شکست لایه‌ها در جدول ۱ ذکر شده است.

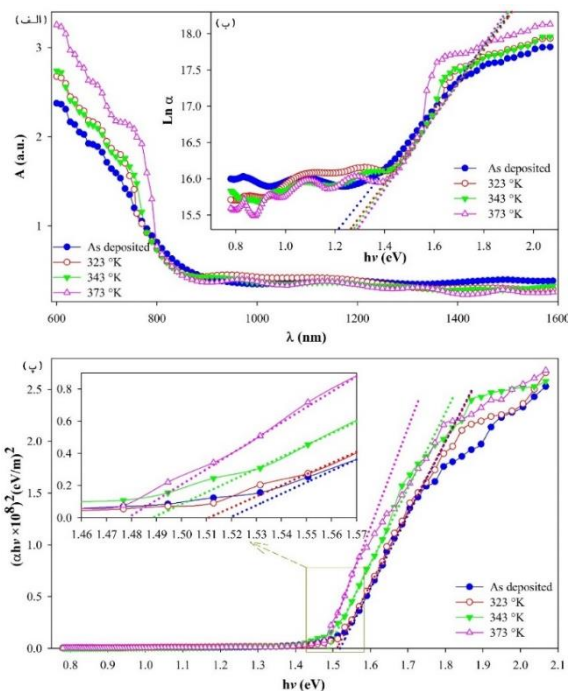
**تأثیر دمای بازپخت بر چگالی نسبی و قطبش پذیری الکترونی**  
یکی از پارامترهای کلیدی برای تعیین کیفیت و پایداری لایه‌های تهیه شده، محاسبه چگالی نسبی ( $\tau$ ) لایه‌هاست. چگالی نسبی لایه‌های رشدیافته کادمیوم تلوراید با استفاده از رابطه لورنتز-لورنتز به دست آمده [۴۱] و تغییرات آن برحسب دمای بازپخت در شکل ۳ نمایش داده شده است.

$$\tau = \left( \frac{n^2 - 1}{n^2 + 1} \right) \left( \frac{n_B^2 + 1}{n_B^2 - 1} \right), \quad (6)$$

که در آن  $n$  ضریب شکست لایه‌های رشدیافته و  $n_B$  ضریب شکست توده کادمیوم تلوراید است و برابر با  $2/3$  است [۲۸]. چگالی نسبی لایه‌ها با افزایش دمای بازپخت افزایش می‌یابد که ناشی از افزایش ضریب شکست لایه‌هاست و بهبود بلورینگی لایه‌های رشدیافته را نشان می‌دهد [۴۲]. یکی دیگر از پارامترهای اپتیکی که اطلاعات کمی و کیفی در مورد ساختار مولکولی، نوع پیوند، پاسخ دینامیکی سامانه‌های مقید به میدان‌های خارجی و همچنین اندازه پاسخ الکترون در تابش الکترومغناطیسی در لایه‌ها را ارائه می‌دهد قطبش‌پذیری الکترونی (PE) است [۴۰]. قطبش‌پذیری الکترونی لایه‌ها توسط تئوری کلازیوس-موسوتی به ضریب شکست مرتبط شده است [۴۳].

$$PE = \gamma \left( \frac{n^2 - 1}{n^2 + 1} \right), \quad (7)$$

که در آن  $n$  ضریب شکست لایه‌های رشدیافته و  $\gamma$  مقدار ثابتی است که از رابطه  $\gamma = \frac{3M}{4\pi N_A d}$  به دست می‌آید.  $N_A$  عدد آووگادرو است.  $M$  و  $d$  وزن مولکولی و چگالی کادمیوم تلوراید



شکل ۱. الف) طیف اپتیکی جذب نور لایه‌های نازک کادمیوم تلوراید قبل و بعد از بازپخت، ب) نمودار  $\ln(\alpha)$  برحسب انرژی فوتون و پ) نمودار تاک لایه‌های نازک کادمیوم تلوراید قبل و بعد از بازپخت بر حسب انرژی فوتون فرودی.

$$n = \left[ \frac{(1+R) \left\{ (1+R)^2 - (1-R)^2 (1+k^2) \right\}^{1/2}}{(1-R)} \right], \quad (4)$$

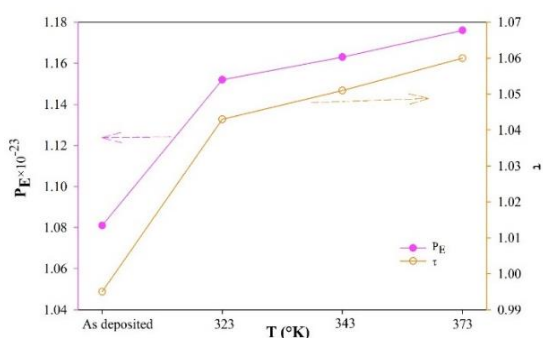
که در آن  $\lambda$  طول موج و  $R$  ضریب بازتاب از سطح لایه است و از رابطه زیر محاسبه می‌شود [۳۸]

$$R = 1 - (T / \exp(-A))^{1/5}, \quad (5)$$

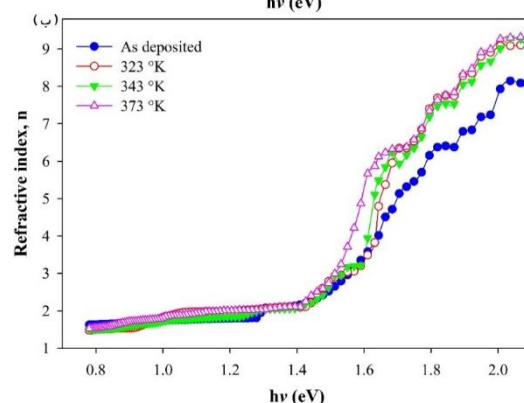
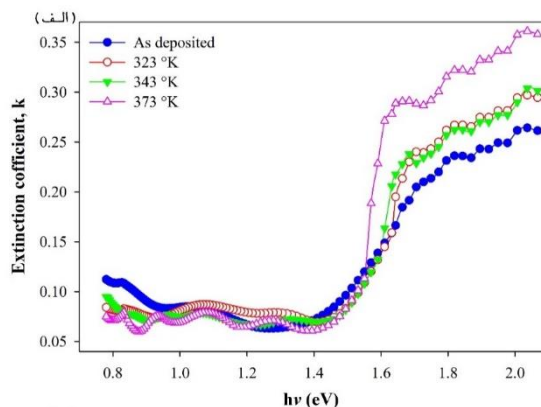
در اینجا  $T$  میزان عبور نور از لایه است. اهمیت تعیین ضریب خاموشی لایه در به دست آوردن اطلاعاتی درباره غلظت نانوذرات انباشت شده بر روی زیرلایه است. معمولاً در روش‌های لایه‌نشانی که در آنها لایه‌های تولید شده بلورینگی کوچکی دارند، ضریب خاموشی به اندازه ذرات وابسته می‌شود [۳۹]. از آنجا که اندازه نانوذرات کادمیوم تلوراید استفاده شده در این کار کوچک‌تر از  $20 \text{ nm}$  است و بین ذرات نیز فضاهای خالی کمتری وجود دارد [۲۸]، ضریب خاموشی لایه‌ها با افزایش انرژی فوتون افزایش می‌یابد. ضریب خاموشی لایه‌های رشد یافته با افزایش دمای بازپخت افزایش می‌یابد که ناشی از افزایش جذب نور در لایه‌ها در انرژی‌های بالاتر است. شکل ۲. ب روند افزایشی ضریب

جدول ۱. پارامترهای اپتیکی لایه های رشد یافته کادمیوم تلوراید در طول موج متناسب با گاف انرژی لایه.

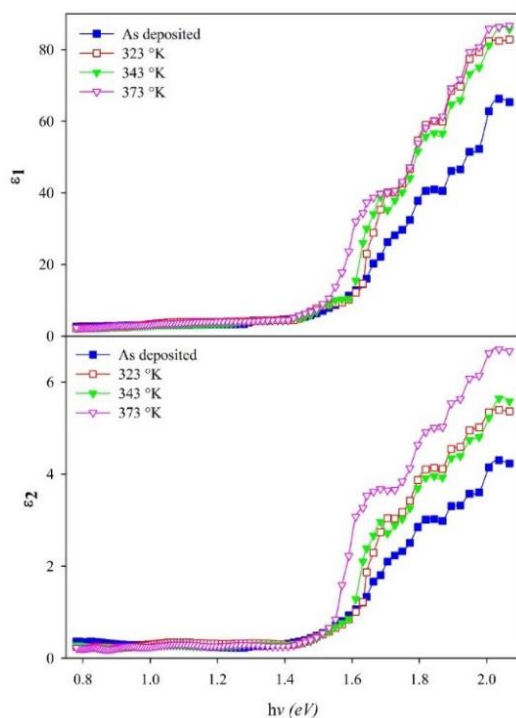
VELF $\times 10^{-23}$	SELF $\times 10^{-23}$	$\epsilon_2$	$\epsilon_1$	PE $\times 10^{-23}$	$\tau$	n	k	EU MeV	Eg eV	دمای بازپخت K
۱۱/۱۴	۸/۵۰	۰/۵۲۸	۷/۰۰۸	۱/۰۸۱	۰/۹۹۵	۲/۶۴۹۴	۰/۰۹۶	۲۳۲	۱/۵۱۹	رشد یافته
۷/۳۷	۵/۸۹	۰/۵۸۲	۸/۳۸۸	۱/۱۵۲	۱/۰۴۳	۲/۸۹۷۶	۰/۰۹۸	۲۱۷	۱/۵۱۱	۳۲۳
۷/۰۱	۵/۶۳	۰/۶۴۲	۸/۶۲۵	۱/۱۶۳	۱/۰۵۱	۲/۹۳۸۱	۰/۰۹۹	۲۰۸	۱/۴۸۸	۳۴۳
۶/۸۰	۵/۵۰	۰/۶۸۱	۸/۹۳۹	۱/۱۷۶	۱/۰۶۰	۲/۹۹۱۳	۰/۱۰۱	۱۹۹	۱/۴۷۹	۳۷۳



شکل ۳. تغییرات چگالی نسبی  $\tau$  و قطبش پذیری الکترونی لایه های رشد یافته کادمیوم تلوراید بر حسب دمای بازپخت.



شکل ۲. تغییرات ضرایب (الف) خاموشی و (ب) شکست لایه های نازک کادمیوم تلوراید قبل و بعد از بازپخت بر حسب انرژی فوتون.



شکل ۴. نمودار قسمت های حقیقی  $\epsilon_1$  و موهومی  $\epsilon_2$  ثابت دی الکتریک لایه های رشد یافته کادمیوم تلوراید قبل و بعد از بازپخت.

هستند که به ترتیب برابر با  $240/01 \text{ g mol}^{-1}$  و  $5/855 \text{ g cm}^{-3}$  هستند. موادی با عدد اتمی بالا مانند کادمیوم تلوراید به دلیل داشتن الکترون های آزاد برای قطبش، قطبش پذیری بهتری دارند [۴۴]. شکل ۳ افزایش قطبش پذیری الکترونی لایه های رشد یافته را در اثر افزایش دمای بازپخت نشان می دهد که ناشی از افزایش ضریب شکست لایه هاست.

در اثر برهمکنش قوی الکترون با فوتون در لبه جذب لایه‌های رشدیافته، هر دو قسمت ثابت دی‌الکتریک با افزایش انرژی فوتون روند افزایشی دارند. همچنین قرار گرفتن لایه‌ها در دمای بازیخت بالاتر باعث افزایش قسمت‌های حقیقی و موهومی ثابت دی‌الکتریک شده است که بیانگر بهبود بلورینگی لایه است و می‌توان آن را به افزایش قطبش‌پذیری الکترونی لایه‌ها مرتبط کرد [۴۷]. مقادیر قسمت‌های حقیقی و موهومی لایه‌های رشدیافته کادمیوم تلوراید در جدول ۱ آورده شده است.

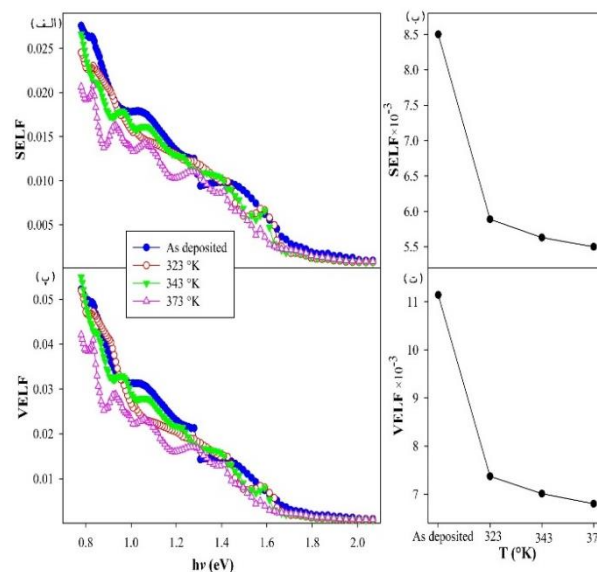
### تأثیر دمای بازیخت بر تابع اتلاف انرژی

تابع اتلاف انرژی<sup>۱</sup> (ELF)، انرژی حامل‌های بار آزاد را توصیف می‌کند که در هنگام عبور از ماده و در اثر برهم‌کنش این الکترون‌ها با ماده تلف می‌شود. تابش چرنکوف [۴۸]، تحریک فونونی و یا یونش سطحی از عوامل ایجاد برهم‌کنش بین الکترون و ماده هستند. تابع اتلاف انرژی بیان می‌کند چه میزان از انرژی به وسیله پراکندگی غیرکشسان در سطح لایه و سطح مشترک لایه - زیرلایه از (به بالاترین لایه اتمی انتقال یافته که به ترتیب به صورت تابع اتلاف انرژی سطحی<sup>۲</sup> (SELF) و تابع اتلاف انرژی حجمی<sup>۳</sup> (VELF) تعریف می‌شوند. این توابع اتلاف انرژی برحسب قسمت‌های حقیقی و موهومی ثابت دی-الکتریک به صورت زیر فرمول‌بندی شده و تغییرات آنها برحسب انرژی فوتون در شکل ۵. الف و پ نمایش داده شده است [۴۹].

$$SELF = \frac{\epsilon_2}{(\epsilon_1 + 1)^2 + \epsilon_2^2} \quad (10)$$

$$VELF = \frac{\epsilon_2}{\epsilon_1^2 + \epsilon_2^2} \quad (11)$$

که در آن  $\epsilon_1$  و  $\epsilon_2$  به ترتیب قسمت‌های حقیقی و موهومی ثابت دی‌الکتریک هستند. تغییرات تابع اتلاف انرژی سطحی و تابع اتلاف انرژی حجمی بر حسب دمای بازیخت در شکل ۵. ب و ت رسم شده است. همانگونه در شکل ۵ مشاهده می‌شود هر دو تابع اتلاف انرژی با افزایش انرژی فوتون کاهش می‌یابند



شکل ۵. تغییرات SELF و VELF لایه‌های رشدیافته کادمیوم تلوراید قبل و بعد از بازیخت برحسب انرژی فوتون (الف و ب). تغییرات SELF و VELF برحسب دمای بازیخت در طول موج متناسب با گاف انرژی لایه.

### تأثیر دمای بازیخت بر ثابت دی‌الکتریک

ثابت دی‌الکتریک ( $\epsilon$ ) یکی از مهم‌ترین خصوصیات ذاتی موادی است که در تابش‌های الکترومغناطیسی خاصیت قطبیدگی از خود نشان می‌دهند. ثابت دی‌الکتریک از دو قسمت تشکیل شده است: ۱) قسمت حقیقی که کاهش سرعت نور را نشان می‌دهد و ۲) قسمت موهومی که مربوط به تغییر فاز بردار میدان الکتریکی و بردار قطبش است و میزان تضعیف تابش الکترومغناطیس در ماده به علت جذب انرژی آن از میدان الکتریکی را تعیین می‌کند [۴۵]. نانوذراتی مانند کادمیوم تلوراید که با اندازه‌های کوچک سنتز می‌شوند ثابت دی‌الکتریک بالایی دارند زیرا تعداد نانوذرات بیشتری در واحد حجم وجود دارد که باعث گشتاور دوقطبی بیشتر ماده می‌شود. در شکل ۴، قسمت‌های حقیقی و موهومی ثابت دی‌الکتریک که از روابط زیر محاسبه می‌شوند [۴۶] برحسب انرژی فوتون رسم شده اند.

$$\epsilon_1 = n^2 - k^2 \quad (8)$$

$$\epsilon_2 = 2nk \quad (9)$$

۱. Energy loss function

۲. Surface energy loss function

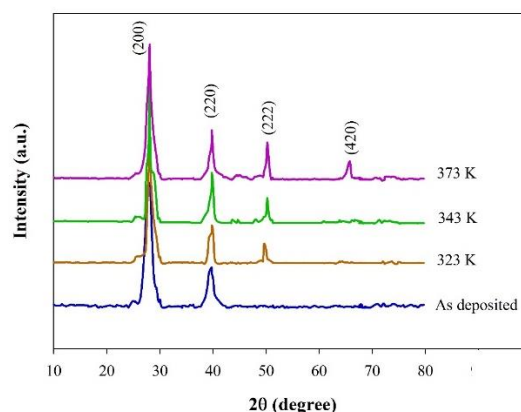
۳. Volumetric energy loss function

جدول ۲. پارامترهای ساختاری لایه های رشدیافت G کادمیوم تلوراید.

<i>hkl</i>	<i>a</i> (Å)	D (nm)	$\beta$	2 $\theta$	دمای بازپخت K
۲۰۰	۶/۴۱۲	۱۱/۹۰	۰/۰۱۲۵	۲۷/۸۶	رشدیافته
۲۲۰	۶/۴۱۰	۱۰/۷۳	۰/۰۱۴۳	۳۹/۷۵	
۲۰۰	۶/۴۰۶	۱۲/۵۳	۰/۰۱۱۹	۲۸/۰۸	۳۲۳
۲۲۰	۶/۴۰۲	۱۰/۹۸	۰/۰۱۴۰	۳۹/۷۹	
۲۲۲	۶/۳۸۴	۸/۸۸	۰/۰۱۸	۴۹/۶۰	
۲۰۰	۶/۴۰۶	۱۳/۱۳	۰/۰۱۱۴	۲۸/۰۸	۳۴۳
۲۲۰	۶/۴۰۲	۱۱/۲۵	۰/۰۱۳۹	۳۹/۷۹	
۲۲۲	۶/۳۵۱	۱۴/۴۴	۰/۰۱۱۱	۵۰/۲۰	
۲۰۰	۶/۴۰۶	۱۳/۵۱	۰/۰۱۱۰	۲۸/۰۸	۳۷۳
۲۲۰	۶/۴۰۲	۱۱/۸۵	۰/۰۱۳۰	۳۹/۷۹	
۲۲۲	۶/۳۵۱	۱۴/۷۹	۰/۰۱۰۸	۵۰/۲۰	
۴۲۰	۶/۲۹۳	۱۰/۱۸	۰/۰۱۶۹	۶۵/۷۴	

ترکیب با تحلیل الگوی پراش توسط نرم افزار ایکس پرت های سکورا<sup>۱</sup> و مقایسه با الگوی پراش مرجع تعیین شدند. نتایج الگوی پراش لایه های تهیه شده ساختار مکعبی را نشان می دهد که با کارت مرجع JCPDS به شماره ۲۰۸۳-۷۵ مطابقت دارد. قله اصلی الگوی پراش لایه انباشت شده بر روی شیشه در  $2\theta = 27/86^\circ$  قرار دارد که مطابق با جهت گیری (۲۰۰) است. قله دیگری در موقعیت زاویه ای  $39/75^\circ$  دیده می شود که متناظر با جهت گیری (۲۲۰) است. با بررسی الگوی پراش لایه های بازپخت شده می توان مشاهده کرد که موقعیت زاویه ای قله اصلی کمی به طرف زاویه های بزرگتر انتقال پیدا کرده است که می تواند ناشی از تنش کششی ایجاد شده در لایه ها پس از بازپخت باشد که منجر به کاهش پارامتر شبکه (a) متناظر می شود [۵۰]. همچنین با افزایش دمای بازپخت، قله های دیگری در موقعیت های زاویه ای  $49/60^\circ$  و  $65/74^\circ$  در الگوی پراش ظاهر می شوند که متعلق به جهت گیری های (۲۲۲) و (۴۲۰) هستند و با کار قبلی ما مطابقت دارد [۲۸].

ابعاد نانو بلورکها D، با قرار دادن پهنای پرتو در نصف شدت بیشینه  $\beta$  و زاویه براگ  $\theta$ ، مربوط به هر قله در رابطه دمای شرر 
$$D = \left( \frac{0.94\lambda}{\beta \cos \theta} \right) [51]$$
 به دست آمده است. ابعاد



شکل ۶. الگوی پراش پرتو ایکس لایه های کادمیوم تلوراید لایه نشانی شده بر روی زیرلایه شیشه در دماهای مختلف بازپخت.

(الف و پ)، و همچنین پس از بازپخت و با افزایش دمای بازپخت (ب و ت) کاهش می یابند. این رفتار را می توان به حامل های بار که آزادانه از میان سطح و حجم ماده حرکت می کنند مرتبط کرد [۴۱]. مقادیر اتلاف انرژی سطحی و حجمی لایه های رشدیافته کادمیوم تلوراید در جدول ۱ آورده شده است.

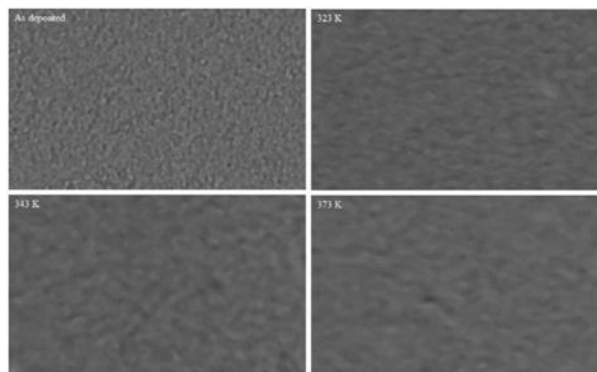
### ۳.۲. مطالعه خواص ساختاری

شکل ۶ طیف های پراش پرتو ایکس لایه های رسوب یافته کادمیوم تلوراید را قبل و بعد از بازپخت نشان می دهد. فازهای

فاصله بین نانوذرات کم بوده و جذب نور توسط لایه افزایش می‌یابد [۵۲].

#### ۴. نتیجه‌گیری

لایه‌های نازک کادمیوم تلوراید که با روش تبخیر حرارتی بر روی شیشه لایه‌نشانی شد خواص اپتیکی مطلوبی مانند جذب نور بیشتر در ناحیه مرئی را از خود نشان دادند. لایه‌های رشدیافته در دماهای پائین بازپخت شدند. طیف اپتیکی جذب نشان داد که افزایش دمای بازپخت باعث بهتر شدن جذب نور توسط لایه‌های کادمیوم تلوراید می‌شود. گاف انرژی و انرژی اورباخ با افزایش دمای بازپخت کاهش می‌یابند که بیانگر بهبود بلورینگی لایه است. پارامترهای اپتیکی مهمی که در این کار محاسبه شد نشان می‌دهد که تغییر شرایط لایه‌ها پس از لایه‌نشانی مانند بازپخت لایه‌ها می‌تواند خواص اپتیکی این لایه‌ها را بهبود بخشد. از آنجا که در این کار پارامترهای اپتیکی مانند ضرایب خاموشی و شکست، چگالی نسبی و قطبش‌پذیری الکترونی، قسمت‌های حقیقی و موهومی ثابت دی‌الکتریک و همچنین توابع اتلاف انرژی برای لایه‌های رشدیافته‌ای که در دمای ۳۷۳ K بازپخت شدند بهینه هستند. بنابراین لایه‌های نازک رشدیافته کادمیوم تلوراید بازپخت شده در دمای ۳۷۳ K می‌تواند به عنوان لایه جاذب مناسب در ساخت بسیاری از دستگاه‌های الکترواپتیکی و مخصوصاً ساخت سلول‌های خورشیدی مورد استفاده قرار گیرد.



شکل ۷. تصاویر میکروسکوپ الکترونی روبشی نشر میدانی برای لایه‌های کادمیوم تلوراید در دماهای مختلف بازپخت.

انانوبلورک‌های کادمیوم تلوراید انباشت شده روی شیشه قبل از بازپخت برابر با  $11/90$  nm به دست آمد. ابعاد نانوبلورک‌های لایه‌های بازپخت شده با افزایش دما افزایش یافته است که ناشی از تیز شدن قله‌ها و کاهش  $\beta$  است. مقادیر به دست آمده برخی از پارامترهای ساختاری در جدول ۲ فهرست شده است.

#### ۳. مطالعه ریخت‌شناسی سطح

شکل ۷ تصاویر ریخت‌شناسی سطح لایه‌های رشد یافته کادمیوم تلوراید روی زیرلایه شیشه به دست آمده از میکروسکوپ الکترونی روبشی نشر میدانی را نشان می‌دهد. قبل از تصویربرداری، سطوح لایه‌ها کاملاً تمیز شده و با نانوذرات طلا داده شد. همانگونه که در شکل ۷ مشاهده می‌شود توزیع ذرات کادمیوم تلوراید انباشت شده بر روی زیرلایه شیشه یکنواخت بوده و اندازه این نانوذرات کمتر از ۱۵ نانومتر است در نتیجه

#### مراجع

1. D L Dreifus, R M Kolbas, K A Harris, R N Bicknell, R L Harper, and J F Schetzina, *Applied Physics Letters* **51** (1987) 931.
2. S Abbaspour, B Mahmoudian, and J P Islamian, *World journal of nuclear medicine* **16** (2017) 101.
3. Y Hanifepour, N Hamnabard, B Khomami, S W Joo, B -K Min, and J H Jung, *Journal of Rare Earths* **34** (2016) 45.
4. R M Amin, S A Elfeky, T Verwanger, and B Krammer, *Biosensors and Bioelectronics* **98** (2017) 415.
5. Q Lin, B Song, H Wang, F Zhang, F Chen, L Wang, L S Li, F Guo, and H Shen, *Journal of Materials Chemistry C* **4** (2016) 7223.
6. K Shen, Z Bai, Y Deng, R Yang, D Wang, Q Li, and D Wang, *RSC Advances* **6** (2016) 52326.
7. S Chander and M S Dhaka, *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures* **80** (2016) 62.
8. E Hasani and D Raoufi, *Surface Engineering* **34** (2018) 914.
9. M S Hossain, K S Rahman, M R Karim, M O Aijaz, M A Dar, M A Shar, H Misran, and N Amin, *Solar Energy* **180** (2019) 559.
10. M Maghoul and H Eshghi, *Optik* **218** (2020) 165132.



11. N El-Kadry, M F Ahmed, and K A Hady, *Thin Solid Films* **274** (1996) 120.
12. J P quez, et al., *Solar Energy Materials and Solar Cells* **81** (2004) 363.
13. M F Al-Kuhaili, M B Mekki, and S A Abdalla, *Thin Solid Films* **686** (2019) 137412.
14. L Feng, J Zhang, B Li, W Cai, Y Cai, L Wu, W Li, J Zheng, Q Yan, G Xia, and D Cai, *Thin Solid Films* **491** (2005) 104.
15. H Mohammad Ajeel, Z T Hussein, K M Thajeel, R Hussein Mekkilf, *Engineering and Technology Journal* **32** (2014) 811-818.
16. A Kuddus, A B M. Ismail, J Hossain, *Solar Energy* **221** (2021) 488-501.
17. M A Green, Y Hishikawa, E D Dunlop, D H Levi, J Hohl-Ebinger, and A W Y Ho-Baillie, *Progress in Photovoltaics: Research and Applications* **26** (2018) 3.
18. B A Ahmed, I H Shallal, and F I mustafa Al-Attar, *Journal of Physics: Conference Series* **1032** (2018) 012022.
19. M Danaie, S Khani, E Noorozzadeh, and M Vahdani, *Iranian Journal of Physics Research* **19** (2019) 139 (persion).
20. H R Moutinho, F S Hasoon, F Abulfotuh, and L L Kazmerski, *Journal of Vacuum Science & Technology A* **13** (1995) 2877.
21. T L Chu, *Solar Cells* **23** (1988) 31.
22. A Vogt, S Schütt, K Frei, and M Fiederle, *Journal of Crystal Growth* **477** (2017) 114.
23. S He, H Lu, B Li, J Zhang, G Zeng, L Wu, W Li, W Wang, and L Feng, *Materials Science in Semiconductor Processing* **67** (2017) 41.
24. C Doroody, K S Rahman, S F Abdullah, M N Harif, H N Rosly, S K Tiong, and N Amin, *Results in Physics* **18** (2020) 103213.
25. S S Shaikh, M Shkir, and E U Masumdar, *Physica B: Condensed Matter* **580** (2020) 411831.
26. J Ling, X Zhang, T Mao, L Li, S Wang, M Cao, J Zhang, H Shi, J Huang, Y Shen, and L Wang, *Materials* **13** (2020) 1536.
27. Z M Nassar, M H Yükselici, and A A Bozkurt, *physica status solidi (b)* **253** (2016) 1104.
28. E Hasani, M G Arashti, L B Habashi, and M Kamalian, *Materials Research Express* **6** (2019) 046422.
29. C M Randall and R D Rawcliffe, *Applied Optics* **7** (1968) 213.
30. A A Al-Ghamdi, S A Khan, S Al-Heniti, F A Al-Agel, and M Zulfeqar, *Current Applied Physics* **11** (2011) 315.
31. H Abitan, H Bohr, and P Buchhave, *Applied Optics* **47** (2008) 5354.
32. Y Natsume, H Sakata, and T Hirayama, *physica status solidi (a)* **148** (1995) 485.
33. V Bilgin, S Kose, F Atay, and I. Akyuz, *Materials Chemistry and Physics* **94** (2005) 103.
34. S J Ikhmayies and R N Ahmad-Bitar, *Journal of Materials Research and Technology* **2** (2013) 221.
35. J Tauc, *Materials Research Bulletin* **3** (1968) 37.
36. M M Kamalian, L Babazadeh Habashi, M Gholizadeh Arashti, and E Hasani, *Journal of Interfaces, Thin Films, and Low dimensional systems* **5** (2022) 445.
37. J Novák, S Hasenöhrl, M I Alonso, and M Garriga, *Applied Physics Letters* **79** (2001) 2758.
38. S Sandeep and K Dhananjaya, *IOP Conference Series: Materials Science and Engineering* **73** (2015) 012149.
39. W W Yu, L Qu, W Guo, and X Peng, *Chemistry of Materials* **15** (2003) 2854.
40. K Punitha, R Sivakumar, C Sanjeeviraja, V Sathe, and V Ganesan, *Journal of Applied Physics* **116** (2014) 213502.
41. S Chander and M S Dhaka, *Journal of Materials Science: Materials in Electronics* **27** (2016) 11961.
42. S Chander, A Purohit, C Lal, and M S Dhaka, *Materials Chemistry and Physics* **185** (2017) 202.
43. M I Ryazanov and A A Tishchenko, *Journal of Experimental and Theoretical Physics* **103** (2006) 539.
44. R R Reddy, Y N Ahammed, K R Gopal, P A Azeem, and T V R. Rao, *Indian Journal of Pure & Applied Physics* **40** (2002) 471.
45. A Wolski, *arXiv preprint arXiv:1111.4354* (2011).
46. C Kittel, "Introduction to Solid State Physics", Wiley, London ( 2004).
47. S J Ikhmayies, "The Influence of Heat Treatment on The Optical Parameters of Spray-Deposited CdS: in Thin Films, Characterization of Minerals, Metals, and Materials" WILEY Online Library (2016).
48. P Čerenkov, *Sci URSS*. **II** (1934) 451.
49. M M El-Nahass, H.S. Soliman, A. El-Denglawey, *Applied Physics A* **122** (2016) 775.
50. E Hasani and D Raoufi, *Semiconductor Science and Technology* **36** (2021) 055004.
51. M Ghorbani and A Davarpanah, *Iranian Journal of Physics Research* **17** (2019) 145 (persion).
52. M Gholizadeh Arashti, L Babazadeh Habashi, M Kamalian, and E Hasani, *Iranian Journal of Physics Research* **22** (2022) 71 (persion).