



## شبیه‌سازی و ساخت لایه‌های نانو ساختار ZnS/Metal/ZnS و بررسی خواص ساختاری و اپتیکی آن‌ها

سید محمد باقر قرشی<sup>۱\*</sup>، عباس بهجت<sup>۲\*</sup>، مینا نقابی<sup>۲</sup>، غضنفر میرجلیلی<sup>۲</sup>

۱- گروه لیزر و فوتونیک، دانشکده فیزیک، دانشگاه کاشان، کاشان

۲- آزمایشگاه تحقیقاتی لایه‌های نازک، گروه اتمی مولکولی، دانشکده فیزیک، دانشگاه یزد، یزد

(دریافت مقاله: ۸۹/۹/۲۱، نسخه نهایی: ۹۰/۲/۱۵)

**چکیده:** نخست چهار نمونه از نانو ساختارهای رسانای شفاف سه‌لایه‌ای ZnS/M/ZnS, (M = Au, Ag, Cu, Al) با بهینه‌سازی ضخامت لایه‌های فلزات طلا، نقره، مس و آلومینیوم و نیمرسانای سولفیدروی شبیه‌سازی شدند. در این شبیه‌سازی نظریه‌ی ماتریس انتقال لایه‌های نازک و توابع ثابت‌های اپتیکی مواد مورد بررسی، به‌کاربرده شدند. سپس ساختارهای سه‌لایه‌ای بهینه‌ی شبیه‌سازی شده به روش تبخیر گرمایی روی بستری شیشه‌ای لایه‌نشانی شدند. ویژگی‌های بلوری ساختارها از قبیل اندازه‌ی دانه‌ها و ثابت‌های شبکه از الگوی پراش پرتو ایکس محاسبه شدند. همچنین طیف‌های اپتیکی تراگسیلی و جذب نشان دادند که این‌گونه نانو ساختارها امواج فرابنفش و فروسرخ را جذب می‌کنند ولی در برابر ناحیه مرئی طیف خورشید شفاف هستند. اندازه‌گیری‌ها و محاسبات نشان داد، ساختار ZnS/Au/ZnS جهت استفاده در سطوح رسانای شفاف و ساختار ZnS/Ag/ZnS برای صفحات شفاف ضد بازتاب نسبت به ساختارهای دیگر مناسب‌ترند.

**واژه‌های کلیدی:** سولفید روی؛ لایه‌ی نازک؛ سه لایه‌ای نانو ساختار؛ شبیه‌سازی؛ تبخیر گرمایی.

### مقدمه

ایندیم ( $\text{InO}_2$ )، اکسید کادمیم و اکسید روی آلاییده شده با آلومینیوم (AZO)، اکسید ایندیم آلاییده شده به قلع (ITO) و ترکیب لایه‌های نازکی از قبیل سولفید روی با فلزات (ZnS/Metal/ZnS) [۲،۱] و اکسید ایندیم آلاییده شده با قلع با فلزات (ITO/Metal/ITO) [۶] اشاره کرد. مهمترین شرط برای امکان استفاده از این ساختارها، شفاف بودن در طول موج مورد نظر و داشتن رسانندگی الکتریکی مناسب است. استفاده از سیستم سه‌لایه‌ای به دلیل نفوذ لایه‌ی فلز به درون نیم‌رسانا و بالا رفتن خواص بلوری و اپتیکی آن امروزه بیشتر مورد توجه است. با انتخاب سیستم‌های سه‌لایه‌ای دی‌الکتریک/فلز/دی‌الکتریک (D/M/D) روی زیر لایه‌ی شیشه می‌توان علاوه بر کنترل رسانش الکتریکی، میزان عبور یا بازتاب را برای گستره‌ی

در سال‌های اخیر طراحی و ساخت لایه‌های نازک رسانای شفاف چندلایه‌ای و تک‌لایه‌ای مورد توجه بسیاری از پژوهش‌گران قرار گرفته است. لایه‌های نازک رسانای شفاف، به دلیل دارا بودن خواص الکتریکی، اپتیکی و ساختاری منحصر به فرد، کاربردهای فراوانی در صنایع الکترونیکی و الکترونیک نوری دارند. از آن‌ها به‌عنوان، آینه‌های بازتاب دهنده‌ی گرمایی، سطوح شفاف برای بازتاب گرما در پنجره‌های ساختمان [۳-۱]، سلول‌های خورشیدی معدنی و آلی [۴]، دیودهای نورگسیل آلی [۵]، گرم‌کن‌های سطحی برای شیشه‌ی اتومبیل‌ها و حسگرها [۳] استفاده می‌شود. از مهم‌ترین این لایه‌های نازک می‌توان به ساختارهایی نظیر اکسید روی ( $\text{ZnO}$ )، اکسید

\* نویسنده مسئول، تلفن-نمبر: ۰۳۵۱-۸۲۰۰۱۳۲، پست الکترونیکی: abehjat@yazduni.ac.ir

محاسبات از محیط برنامه نویسی 14 Mathcad استفاده شده است.

#### شبیه سازی ساختارها

سیستم سه لایه ای دی الکتریک/فلز/دی الکتریک (D/M/D) با ماده ی دی الکتریک سولفید روی و فلزات طلا، نقره، مس و آلومینیوم در نظر گرفته شد. توابع ضریب شکست (n) و ضریب خاموشی (k) برای این لایه ها به صورت  $air(n_0, k_0) / D_{d1}(n_1, k_1) / M_{d2}(n_2, k_2) / D_{d3}(n_3, k_3) / glass(n_4, k_4)$  در نظر گرفته شده است. در محاسبات باید از توابع ثابت های اپتیکی بر حسب طول موج استفاده شود. بدین منظور از داده های تجربی موجود [۹،۸] و با استفاده از نرم افزار Origin Pro7 توابعی با بیشترین همبستگی برازش شدند. تغییرات ثابت های اپتیکی مواد مورد بررسی بر حسب طول موج در شکل (۱) نشان داده شده است.

برای یافتن ضخامت بهینه ی لایه ی اول و سوم (ZnS) با بیشترین درصد عبور در ناحیه مرئی، نخست ضخامت لایه ی فلز (طلا، نقره، مس، آلومینیوم) ثابت در نظر گرفته شد. به منظور برآورد اولیه ی ضخامت لایه دوم به ازای ضخامت های مختلف لایه ی اول (یا سوم)، ضخامت لایه دوم طوری است که بیشترین عبور را داشته باشد. در شکل (۲) این تغییرات نشان داده شده اند که برای هر فلز حداقل ضخامت مورد نیاز مشخص شده است. در گزارش های مشابه نیز حدود همین ضخامت ها گزارش شده است [۶،۳،۱]. همچنین با تعریف پارامتر  $f$ ،  $(f = \frac{d_3}{d_1})$ ، و به ازای ثابت های اپتیکی برای مواد موجود در ساختار در طول موج  $\lambda = 550 \text{ nm}$  تغییرات ضریب عبور بر حسب ضخامت لایه ی اول به ازای مقادیر مختلف پارامتر  $f$  محاسبه و رسم شده است (شکل ۳). چنانکه مشاهده می شود برای هر فلز پارامتر  $f$  متفاوت است که نتایج آن در جدول (۱) آورده شده اند. بنابراین بیشترین عبور زمانی میسر است که ضخامت لایه سوم برابر با  $d_3 = f \times d_1$  باشد. از طرف دیگر با تعریف فاکتور  $Z$  به صورت رابطه ی (۸) می توان میزان عبور در ناحیه مرئی را افزایش داد و بازتاب را در نواحی دیگر به مقدار بیشینه خود رسانید. به عبارت دیگر، هر چه این فاکتور به یک نزدیکتر شود عبور در ناحیه مرئی بیشتر و بازتاب در نواحی دیگر بیشتر خواهد شد [۱۰].

طول موج مورد نظر تنظیم کرد. همچنین در طراحی صفحه های رسانای شفاف سلول های خورشیدی عبور طول موج متناظر با گاف انرژی ماده ی فعال حائز اهمیت است که در این ساختارها عبور طیف مرئی ( $1.7 - 3.3 \text{ eV}$ ) و بازتاب نواحی دیگر طیف تابشی خورشید مورد نظر است (طیف خورشید شامل ۳-۴٪ طیف فرابنفش، ۴۵٪ طیف مرئی و ۵۲٪ طیف فرو سرخ است) [۳-۱].

#### شبیه سازی

##### مبانی نظری

برای طراحی یک سیستم سه لایه ای (D/M/D)، از نظریه ماتریس انتقال لایه های نازک که در آن زیرلایه از یک طرف محدود است، استفاده شده است [۷]. در این نظریه ماتریس کلی سیستم چند لایه ای به صورت زیر تعریف می شود:

$$\begin{pmatrix} B \\ C \end{pmatrix} = \left\{ \prod_{r=1}^k \begin{pmatrix} \cos \delta_r & \frac{i \sin \delta_r}{\eta_r} \\ i \eta_r \sin \delta_r & \cos \delta_r \end{pmatrix} \right\} \begin{pmatrix} 1 \\ \eta_{k+1} \end{pmatrix} \quad (1)$$

که  $k$  تعداد لایه ها،  $\delta_r$  فاز ضخامت هر لایه،  $\eta_r$ ،  $\eta_p$  هدایت ظاهری نوری مختلط برای موج با قطبش S و P هستند که به ترتیب به صورت زیر معرفی می شوند:

$$\delta_r = \frac{\gamma \pi}{\lambda} N_r d_r \cos \theta_r \quad (2)$$

$$\eta_r = N_r \cos \theta_r = (n_r - i k_r) \cos \theta_r \quad S \quad (3)$$

$$\eta_r = \frac{N_r}{\cos \theta_r} = \frac{(n_r - i k_r)}{\cos \theta_r} \quad P \quad (4)$$

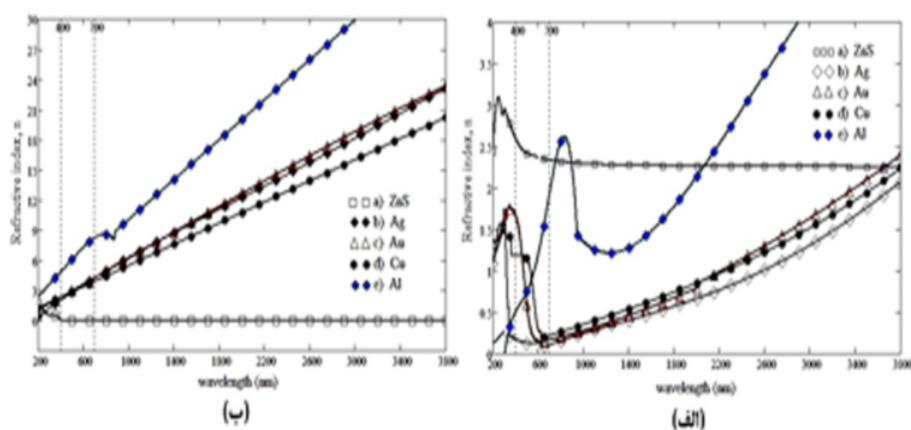
که ضریب عبور، بازتابش و جذب به صورت زیر محاسبه می شود:

$$T = \frac{4 \cdot \eta_0 \cdot \text{Re}(\eta_{k+1})}{(\eta_0 \cdot B + C) \cdot (\eta_0 \cdot B + C)^*} \quad (5)$$

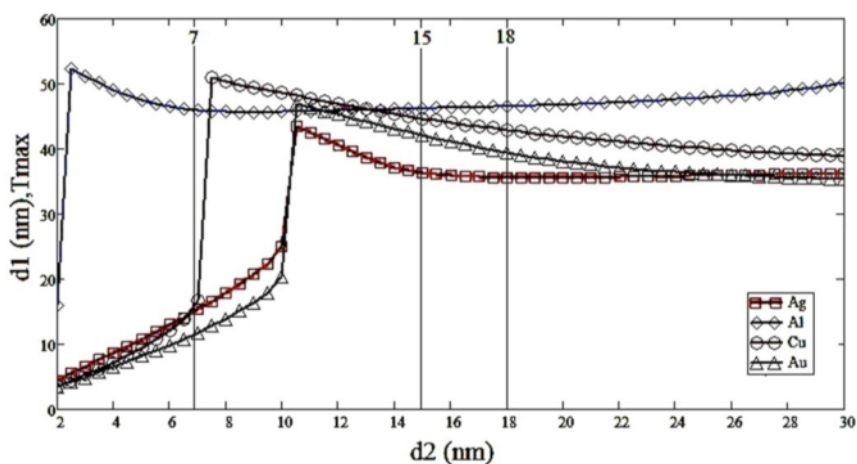
$$R = \left( \frac{\eta_r \cdot B - C}{\eta_r \cdot B + C} \right) \left( \frac{\eta_r \cdot B - C}{\eta_r \cdot B + C} \right)^* \quad (6)$$

$$A = \frac{\epsilon \cdot \eta_r \cdot \text{Re}(B \cdot C^*)}{(\eta_r \cdot B + C) \cdot (\eta_r \cdot B + C)^*} \quad (7)$$

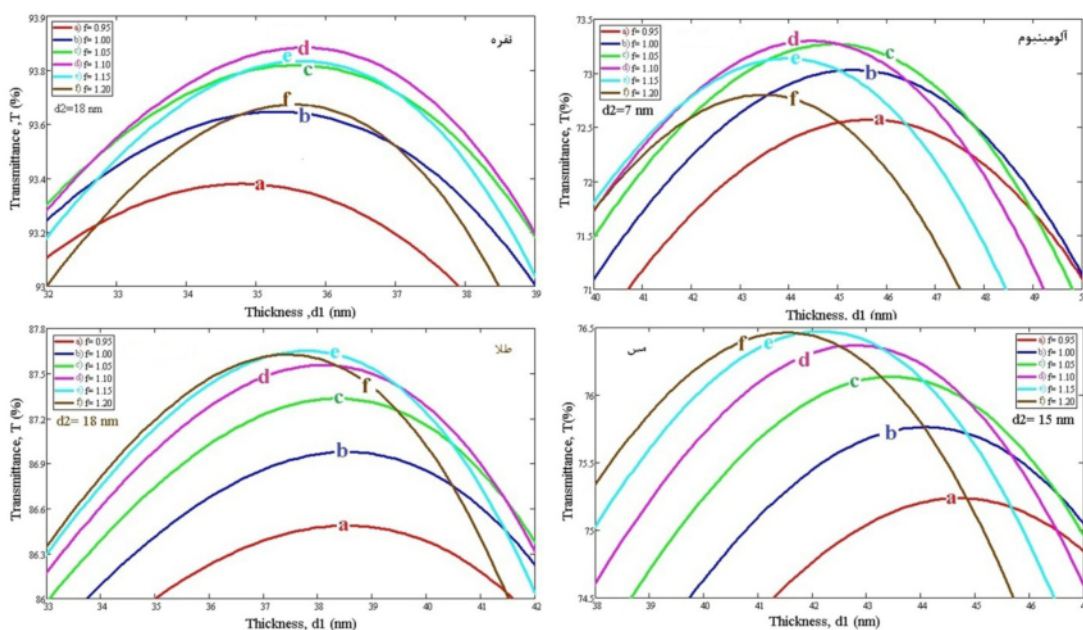
بنابراین با استفاده از رابطه (۱) نخست ماتریس هر لایه را محاسبه و سپس در یکدیگر ضرب ماتریسی کرده و با محاسبه ضریب های B و C در گستره ی طول موج ۲۰۰-۴۰۰۰ nm ضرایب عبور، بازتاب و جذب به دست می آیند. برای انجام این



شکل ۱ الف) نمودار تغییرات ضریب شکست ب) ضریب خاموشی مواد استفاده شده بر حسب طول موج [۸].



شکل ۲ محاسبات تغییرات ضخامت لایه‌ی اول (سوم) بر حسب لایه دوم به ازاء عبور بیشینه برای برآورد ضخامت اولیه‌ی لایه فلز.



شکل ۳ شبیه‌سازی سیستم سه‌لایه‌ای ZnS/Au, Ag, Cu, Al/ZnS به ازای مقادیر مختلف پارامتر  $f$  در طول موج ۵۵۰ nm.

$$f=(a:0.95, b:1.0, c:1.05, d:1.10, e:1.15, f:1.2, g:1.25)$$

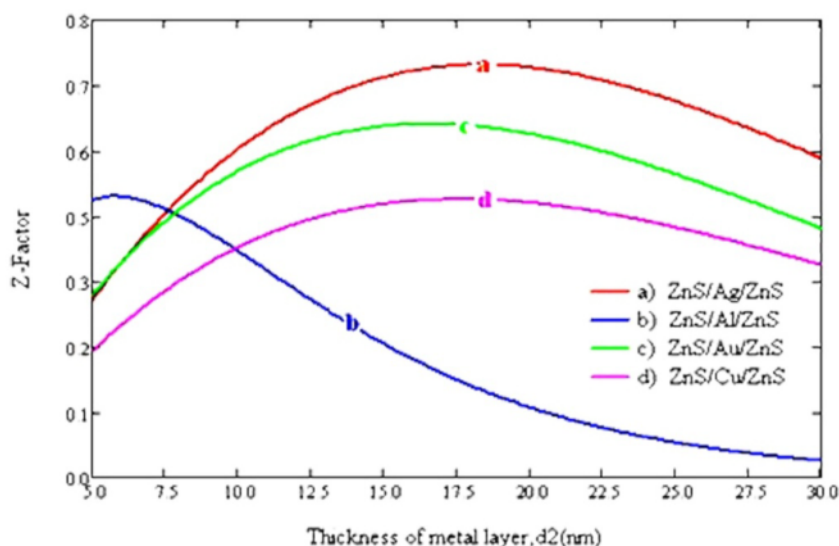
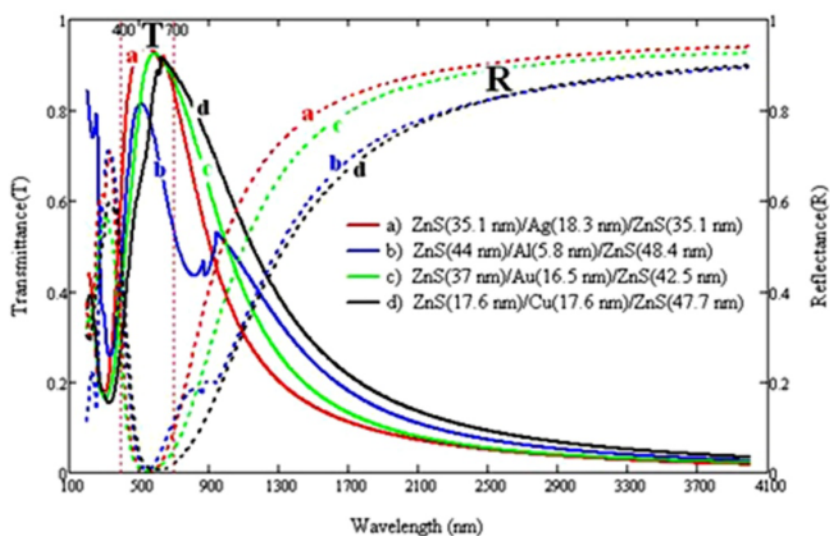
جدول ۱ نتایج محاسبات ضخامت‌های سه‌لایه‌ای‌های شبیه‌سازی شده (glass(1 mm)/ZnS(d3)/Metal(d2)/ZnS(d1))

| فلز       | $d_1(\text{nm})$ | $f = \frac{d_3}{d_1}$ | $d_2(\text{nm})$ | $d_3(\text{nm})$ |
|-----------|------------------|-----------------------|------------------|------------------|
| نقره      | ۳۵٫۱             | ۱٫۱۰                  | ۱۸٫۳             | ۳۸٫۶             |
| آلومینیوم | ۴۴٫۰             | ۱٫۱۰                  | ۵٫۸              | ۴۸٫۴             |
| طلا       | ۳۷٫۰             | ۱٫۱۵                  | ۱۶٫۵             | ۴۲٫۵             |
| مس        | ۴۱٫۵             | ۱٫۱۵                  | ۱۷٫۶             | ۴۷٫۷             |

و رسم شد (شکل ۴) و این نتایج در جدول (۱) آورده شده‌اند. در شکل (۵) طیف تراگسیل و عبوری هر چهار ساختار با ضخامت‌های بهینه‌ی شبیه‌سازی شده رسم شده‌اند.

$$Z = \left[ \frac{\int T_{VIS} d\lambda}{\int d\lambda} \right]_{VIS} \cdot \left[ \frac{\int R_{IR} d\lambda}{\int d\lambda} \right]_{IR} \left[ \frac{\int R_{UV} d\lambda}{\int d\lambda} \right]_{UV} \quad (۸)$$

بنابراین با استفاده از پارامتر  $f$  بدست آمده و ضخامت بهینه‌ی لایه اول و دوم تغییرات فاکتور  $Z$  بر حسب لایه‌ی دوم محاسبه

شکل ۴ تغییرات فاکتور  $Z$  محاسبه شده بر حسب لایه فلز به ازای ضخامت بهینه‌ی لایه اول و سوم.

شکل ۵ شبیه‌سازی رایانه‌ای طیف تراگسیل و بازتابی ساختارهای مورد بررسی.

## مواد و روش پژوهش

با استفاده از دستگاه لایه‌نشانی تیخیری در خلا مدل VAS که مجهز به بلور کوارتز برای اندازه‌گیری ضخامت، با کنترل عددی مدل FTM6 با دقت یک آنگسترم، ساختارهای سه‌لایه‌ای با ضخامت‌های بهینه محاسبه شده، لایه‌نشانی شدند. زیرلایه‌های شیشه‌ای به ابعاد  $25 \times 75$  mm پس از شست و شوی اولیه در حلال‌های پروپانول و استون چربی زدایی شده و سپس با آب یونیده شستشو و در دمای  $80^\circ\text{C}$  خشک شدند. سپس نمونه‌ها در محفظه خلاء دستگاه قرار گرفتند. پودر سولفید روی و یکی از فلزات (طلا، نقره، مس و یا آلومینیوم با درصد خلوص ۹۹/۹۹٪) در بوته‌های تنگستن قرار داده شدند و پس از تخلیه با پمپ مکانیکی و تخلیه تا فشار  $6 \times 10^{-6}$  mbar و نیز با گرم کردن زیر لایه‌ها تا حدود  $100^\circ\text{C}$  با گرمکن نوری و با اعمال جریان به بوته‌ها لایه‌نشانی با آهنگ  $0.1 \text{ nm} \cdot \text{s}^{-1}$  انجام شد. پس از لایه‌نشانی و سرد شدن نمونه‌ها بررسی‌های زیر انجام شد.

## بررسی‌های ساختاری

الگوی پراش پرتو ایکس به‌وسیله یک دستگاه پراش سنچ مدل فلیپس با پرتو تکفام  $\text{CuK}\alpha$  ( $\lambda = 1.540598 \text{ \AA}$ )، ولتاژ ۴۰ kV، جریان 30 mA و در دمای اتاق انجام شد. زاویه اسکن ( $2\theta$ ) بین ۱۰ تا ۹۰ درجه و فاصله بین گام‌ها  $0.0520 \text{ S}^{-1}$  انتخاب شدند و برای تحلیل طرح‌های [گروه‌های] پراش از نرم افزار XPert Highscore2003 استفاده شد. علاوه بر این، از میکروسکوپ الکترونی (SEM) برای بررسی ریخت‌شناسی نمونه‌ها استفاده شد.

## اندازه‌گیری‌های اپتیکی و الکتریکی

طیف اپتیکی تراگیلی و درآشامی نمونه‌ها در گستره بسامدی فرابنفش تا فروسرخ نزدیک (۱۱۰۰-۳۰۰ nm)، با استفاده از طیف‌سنج دو پرتوی (مدل Cintra6 UV-Visible) اندازه‌گیری شدند. همچنین جهت تعیین مقاومت سطحی، مدار چهار گمانه ولتاژ-جریان متشکل از چهار تیغه فلزی با ابعاد  $300 \times 10 \times 0.6 \text{ mm}^2$  و به فاصله یکسان 10 mm از یکدیگر طراحی و ساخته شد. سپس با استفاده از دستگاه

جریان-ولتاژ مدل Keithley 2400 مقاومت سطحی نمونه‌ها اندازه‌گیری گردید.

## اندازه‌گیری گرمایی با دستگاه شبیه‌ساز خورشیدی

برای تعیین میزان انتقال گرما از طریق تابش طیف خورشید، از لامپ متال هالاید ۴۰۰ وات که طیف آن نزدیک به طیف گسیلی خورشید است، استفاده شد. بدین صورت که پشت دو لام، یکی لایه نشانی شده و دیگری بدون لایه، به دو دماسنج عددی مدل Leybold-Heraeus با گمانه‌ی ترموکوبلی از جنس NiCr- Ni و با دقت  $0.1^\circ\text{C}$  وصل و در فاصله‌ی نزدیک لامپ تحت تابش استاندارد AM1.0<sup>۱</sup> با شدت  $10 \text{ mW} \cdot \text{cm}^{-2}$  قرار گرفت. سپس به مدت ۳۰ دقیقه هر دو دما برای تمام نمونه‌ها جدا از هم اندازه‌گیری شدند.

## بحث و بررسی

الگوی پراش پرتو ایکس (XRD) هر چهار ساختار مورد بررسی در شکل (۶) نشان داده شده است. این سه لایه‌ای‌ها نشان می‌دهد که همگی از یک زمینه آمورف تشکیل شده‌اند، که ناشی از بستری از شیشه و ماده‌ی سولفید روی است. همچنین در الگوی پراش، قله با شدت بیشینه‌ی هر فلز مشاهده می‌شود که گواه بر نفوذ لایه‌ی فلز در لایه سولفید روی است. البته این میزان نفوذ کم است و با اعمال بازپخت، بیشتر شده و ساختار فیلم از حالت آمورف به ساختار بلوری تبدیل می‌شود [۱۰-۱۲]. همچنین با مقایسه با کارت استاندارد مشخص شد که زوایای پراش فلزات طلا، نقره، مس و آلومینیوم به‌ترتیب در  $2\theta = 38.269, 37.934, 43.473, 38.43^\circ$  متناظر با ساختار مکعبی با گروه فضایی Fm3m و صفحات ارجح براگ (۱۱۱) رخ می‌دهد. با استفاده از رابطه‌ی (۱۱) می‌توان پارامتر شبکه‌ی فلزات را محاسبه کرد [۱۳].

$$a = d_{h,k,l} \sqrt{h^2 + k^2 + l^2} \quad (11)$$

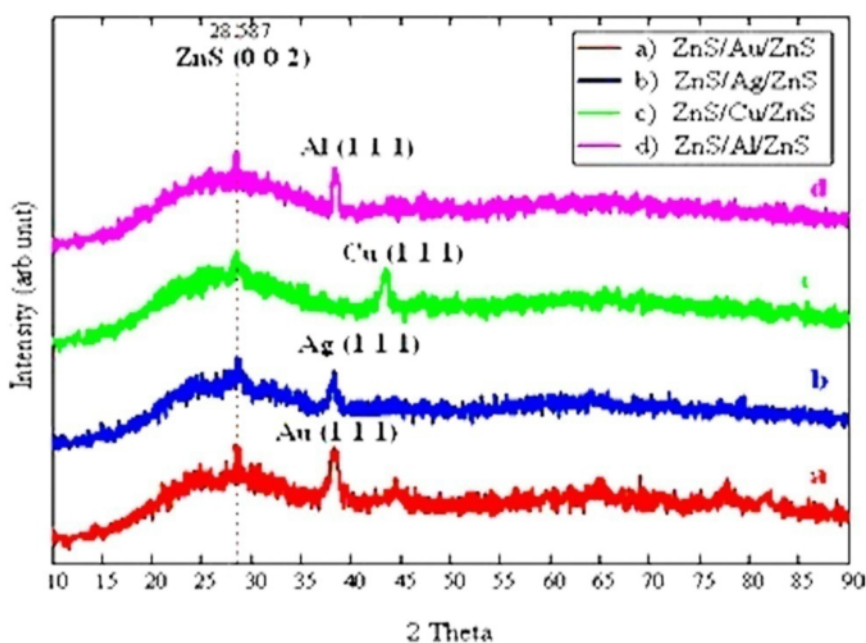
که در این رابطه  $h, k, l$  شاخص‌های میلر و  $d_{h,k,l}$  فاصله‌ی بین صفحات براگ و  $a$  ثابت شبکه‌ی بلوری است. مقادیر پارامتر

۱- یکی از استاندارد های تابش خورشیدی که معادل تابش خورشید در سطح زمین به صورت عمودی است (Air Mass 1.0).

رابطه  $\beta$  مقدار پهن‌شدگی خط پراش در نصف شدت بیشینه (بر حسب رادیان) و  $\theta$  زاویه‌ی پراش است [۱۴]. مشاهده می‌شود که با افزایش اندازه‌ی ذرات فلز، مقاومت سطحی نمونه‌ها کاهش یافته است بنابراین با افزایش اندازه‌ی ذرات (ریزدانه‌ها) فاصله‌ی بین آن‌ها کمتر می‌شود و احتمال پدیده‌ی تونل زنی بین آن‌ها و نیز رسانندگی سطحی لایه افزایش یابد.

دو نمونه از تصاویر میکروسکوپ الکترونی (SEM) در شکل (۷) نشان داده شده‌اند. مقایسه‌ی این دو نشان می‌دهد که نمونه‌ها از دانه‌های خاکستری روشن در زمینه‌ی تیره رنگ تشکیل شده‌اند. همچنین نمونه‌ها به‌روش استرانسکی کراستاف

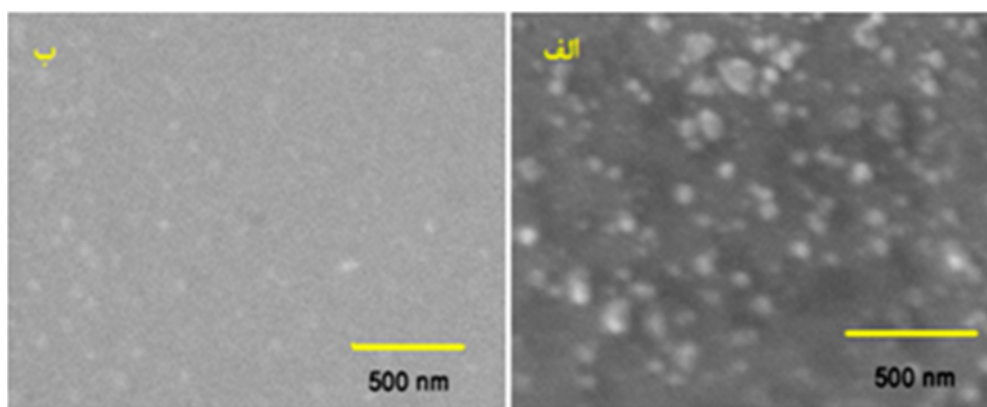
شبکه در جدول (۲) آورده شده‌اند. پارامترهای شبکه‌ی محاسبه شده از پراش خوبی با مقادیر کارت‌های استاندارد دارد که تأییدی بر وجود تک فاز فلز است. البته برای به‌دست آوردن مقدار دقیق ثابت شبکه باید با استفاده از چند قله و از روش کمترین مربعات (کوهن) استفاده کرد که در این جا به دلیل کم بودن ضخامت لایه فقط قله‌ی اصلی این فازها ظاهر شدند. همچنین چون تغییرات این ثابت در حد صدم آنگسترم است که از خطای اندازه‌گیری کمتر است، لذا ثابت شبکه فلزات در چهار نمونه ساختار تغییری نداشته است. علاوه بر این اندازه ذرات از رابطه شرر  $d = \frac{0.89\lambda}{\beta \cos \theta}$  محاسبه شدند، که در این



شکل ۶ طرح پراش پرتو X سه لایه‌های ساخته شده در دمای اتاق روی بستر شیشه‌ای.

جدول ۲ مقادیر اندازه‌گیری شده پارامترهای ساختاری و اپتیکی.

| ساختار     | $2\theta$<br>[ $^\circ$ ] | اندازه ذرات<br>( $\pm 2 \text{ nm}$ ) | ثابت شبکه فلز<br>( $\text{\AA}$ ) | مقاومت سطحی<br>[ $\pm 0.1 \text{ } \Omega \cdot \text{cm}^{-2}$ ] | تراکسیل در $\lambda = 550 \text{ nm}$ (%) | $T_{lum}$<br>(%) | $R_{1700}$<br>(%) | $F_{TC}$<br>[ $\pm 0.4 \text{ m}\Omega^{-1}$ ] |
|------------|---------------------------|---------------------------------------|-----------------------------------|-------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------|------------------|-------------------|------------------------------------------------|
| ZnS/Au/ZnS | ۳۸,۳۱                     | ۱۷                                    | ۴,۰۷                              | ۱۴,۰                                                              | ۷۶                                        | ۶۲,۴             | ۷۹,۶              | ۴,۶۰                                           |
| ZnS/Ag/ZnS | ۳۸,۳۲                     | ۱۳                                    | ۴,۰۸                              | ۱۳,۵                                                              | ۶۱                                        | ۶۶,۰             | ۸۲,۷              | ۰,۵۲                                           |
| ZnS/Cu/ZnS | ۴۳,۴۴                     | ۲۰                                    | ۳,۶۱                              | ۱۴,۷                                                              | ۷۲                                        | ۵۳,۳             | ۶۷,۰              | ۲,۵۰                                           |
| ZnS/Al/ZnS | ۳۸,۳۱                     | ۱۰                                    | ۴,۰۵                              | ۴۵۵۸۲,۰                                                           | ۸۲                                        | ۵۲,۲             | ۶۹,۰              | ۰,۰۰                                           |



شکل ۷ تصاویر SEM ساختارهای الف) ZnS/Au/ZnS و ب) ZnS/Ag/ZnS

(۴۰۰-۷۰۰ nm) و کمترین آن در نواحی فرابنفش و فروسرخ روی می‌دهد. در طیف تراگسیلی نمونه‌ها نوارهای تداخلی مشاهده نمی‌شوند که ناشی از یکنواختی، هموار بودن و نازک بودن لایه‌های تهیه شده است. همچنین در شکل (۸-ب) طیف تراگسیلی تجربی با مقادیر شبیه‌سازی شده برای ساختار ZnS/Au/ZnS آورده شده‌اند که نشان می‌دهد نتایج محاسبات تفاوت اندکی با مقادیر اندازه‌گیری شده دارد. این اختلاف کم ناشی از متفاوت بودن ثابت‌های اپتیکی مواد مورد استفاده در حالت توده با لایه‌ی نازک است [۱۴، ۱۲]. برای بررسی بیشتر میزان رسانایی و شفافیت، فاکتورهای شایستگی و فروزانی تراگسیلنده محاسبه شدند. فاکتور شایستگی<sup>۳</sup> پارامتر مهمی است که رابطه‌ی بین خواص اپتیکی و الکتریکی را در لایه‌ی رسانای شفاف بیان می‌کند و به صورت زیر تعریف می‌شود [۱۵].

$$F_{TC} = \frac{T^{10}}{R_s} \quad (12)$$

در این رابطه،  $T$  تراگسیل فیلم در طول موج ۵۵۰ nm و  $R_s$  مقاومت سطحی نمونه است. در جدول (۲) و شکل (۹) نتایج محاسبات آورده شده‌اند. که نشان می‌دهد سه لایه‌ای با فلز طلا، مس و نقره به ترتیب فاکتور شایستگی آن‌ها زیاده‌تر و کاندیدای خوبی برای ساخت این ساختارها هستند. معیار دیگری که برای بهینه‌سازی ساختار شفاف در طیف مرئی حائز اهمیت است، فروزانی تراگسیلنده<sup>۴</sup> می‌باشد که به صورت زیر تعریف می‌شود [۱۶، ۱۷].

<sup>۲</sup>(SK) رشد می‌یابند که به صورت دانه‌هایی پراکنده در زمینه‌ی سولفید روی هستند و توزیع دانه‌ها و اندازه‌ی آن تقریباً یکنواخت است. در پژوهش‌های قبلی [۱۰] که اثر گرمادهی بر نمونه‌ی ZnS/Au/ZnS مورد بررسی قرار گرفته است مشاهده شد که با افزایش دمای تا دمای ۲۰۰°C اندازه‌ی ذرات طلا افزایش می‌یابد و ریزدانه‌های طلا در لایه‌ی سولفید روی نفوذ می‌کنند و به صورت جزیره جزیره تشکیل می‌شوند ولی با افزایش دما به بیشتر از ۲۰۰°C، لایه‌ی فلز اکسید شده و رسانندگی کاهش می‌یابد. در نتیجه با افزایش اندازه ذرات (ریز-دانه‌ها)، فاصله بین آن‌ها کمتر شده و بهبود ساختار بلوری و رسانندگی سطحی لایه را به همراه دارد.

کارت استاندارد نشان می‌دهد که زاویه پراش سولفید روی در  $2\theta = 28.68^\circ$  متناظر با ساختار مکعبی (۱۱۱) و ساختار شش‌گوشه (۰۰۲) است. از طرف دیگر مشاهده شده است که لایه‌ی نازک ZnS برای ضخامت‌های کمتر از ۱۰۰ nm ساختار شش‌گوشه و برای ضخامت‌های بیشتر از ۳۰۰ nm ساختار بلوری مکعبی از خود نشان می‌دهد [۱۴]. لذا به دلیل ضخامت کم نمونه‌ها فقط اولین قله‌ی اصلی این ساختار مشاهده شد که مربوط به ساختار شش‌گوشه است و با توجه به اینکه در این ساختار دو مجهول ( $a, c$ ) برای ثابت‌های شبکه وجود دارد، با یک قله نمی‌توان پارامتر شبکه را به درستی تعیین کرد.

طیف تراگسیلی نمونه‌ها در شکل (۸-الف) نشان داده شده است. مشاهده می‌شود که بیشینه تراگسیل در ناحیه مرئی

۲- رشد بینابینی رشد لایه‌ای و جزیره‌ای است که پس از تشکیل یک یا گاهی چندین تک لایه کامل، جزیره‌ها تشکیل می‌شوند.

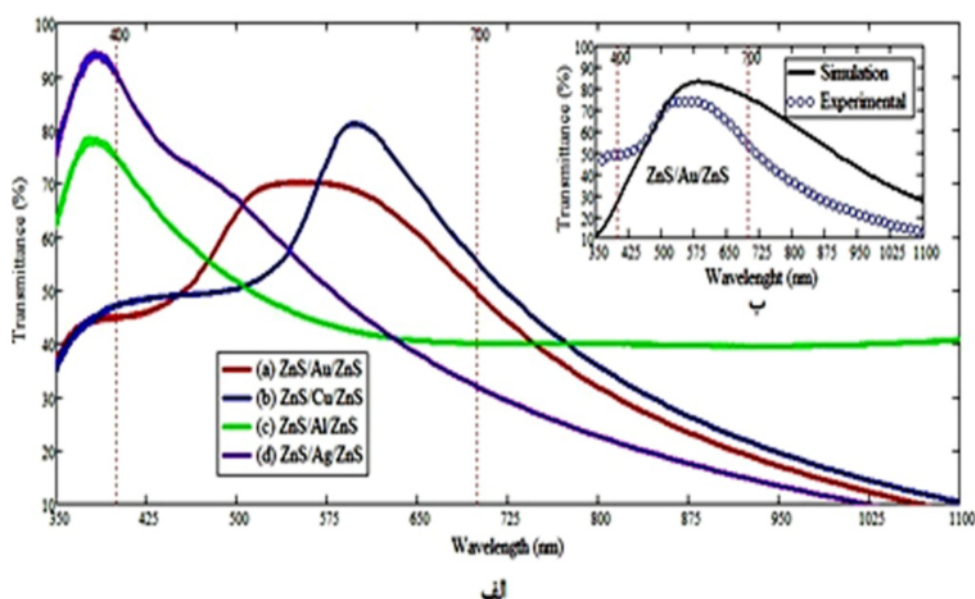
3- Figure of merit

4- Luminous transmittance

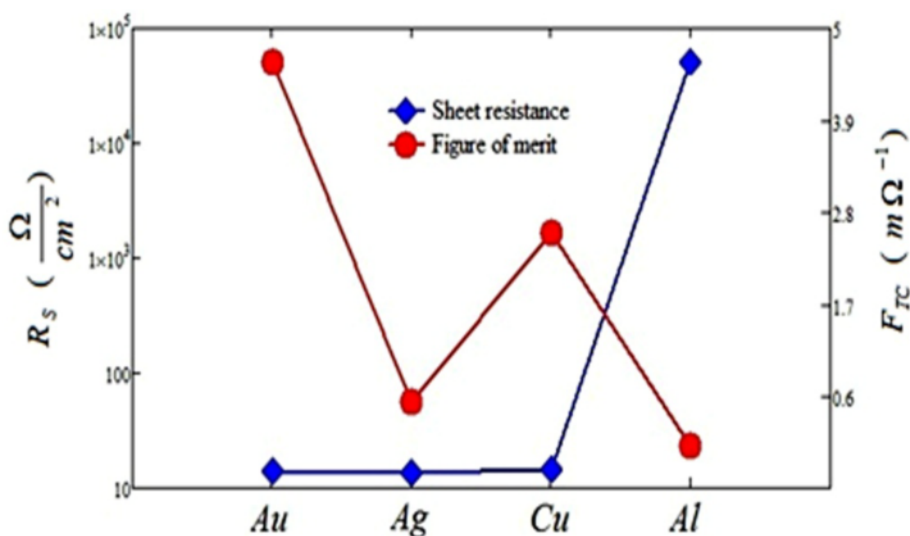
در ناحیه فروسرخ نزدیک است [۱۷]. نتایج این محاسبات در جدول (۲) آورده شده‌اند که مشاهده می‌شود فاکتور فروزانی تراگسیلنده و  $R_{1700}$  برای ساختار با فلز نقره بیشتر از بقیه ساختارهاست، اما فاکتور شایستگی آن از ساختار با فلز طلا کمتر است. لذا در صورتی که شفافیت مطرح باشد ساختار با فلز نقره مناسب است ولی اگر علاوه بر آن رسانایی مورد نظر باشد، ساختار با فلز طلا پیشنهاد می‌شود.

$$T_{lum} = \frac{\int_{\lambda_1}^{\lambda_2} T(\lambda) f(\lambda) d\lambda}{\int_{\lambda_1}^{\lambda_2} f(\lambda) d\lambda} \quad (13)$$

که  $T(\lambda)$  طیف تراگسیلی ساختار و  $f(\lambda)$  بازدهی درخشش چشم انسان است که در بازه‌ی طول موج ۳۸۰ nm تا ۷۸۰ nm که به‌صورت تابعی گاوسی که بیشترین مقدار آن در طول موج ۵۵۵ nm برابر با ۰/۹۹۵ و برای بقیه نواحی طول موجی صفر است تعریف می‌شود. علاوه بر این درصد بازتاب در طول موج ۱۷۰۰ nm ( $R_{1700}$ ) نشان دهنده قابلیت زیاد بازتاب



شکل ۸ الف) منحنی تراگسیل سه لایه‌های سولفید روی /فلز/سولفید روی (طلا، مس، آلومینیوم و نقره) ب) مقایسه‌ی نتایج شبیه‌سازی با مقادیر تجربی برای ساختار سولفید روی /طلا/ سولفید روی.



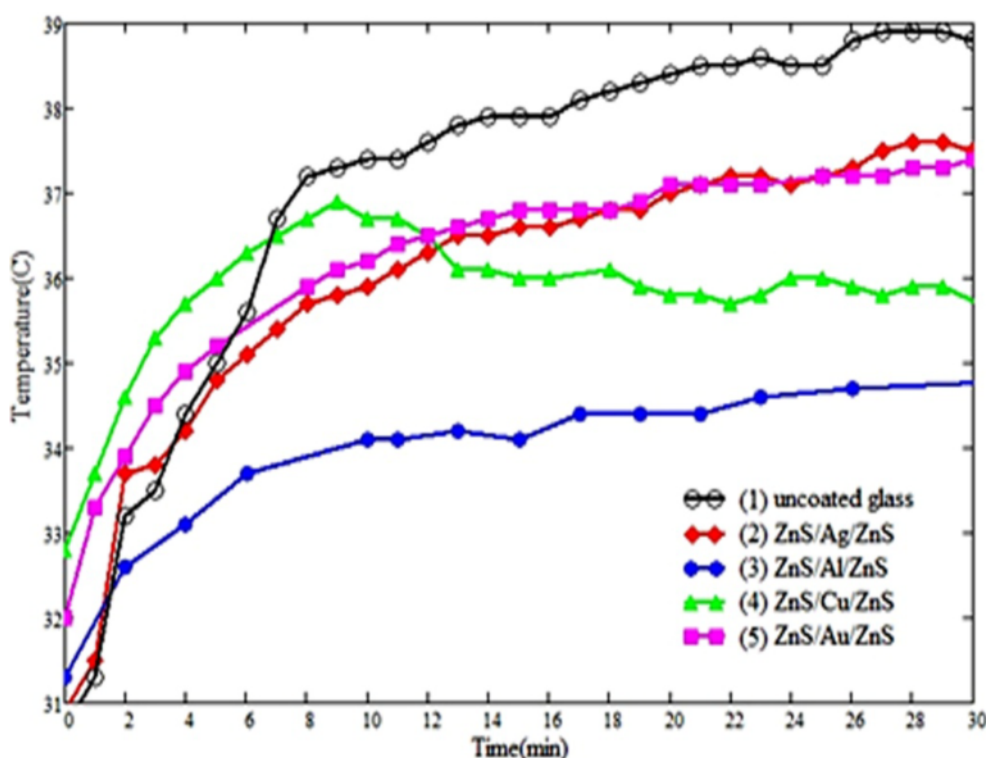
شکل ۹ مقادیر مقاومت سطحی و فاکتور شایستگی برای سه لایه‌های سولفید روی /فلز/سولفید روی.

شده بس‌بلور با ساختار دانه‌ای هستند و با توجه به الگوهای پراش پرتو ایکس تهیه شده در تمام نمونه‌ها دو فاز سولفید روی و فلز مشاهده شدند. نتایج اندازه‌گیری‌های اپتیکی نشان می‌دهد که طیف تراگسیل نمونه‌ها با نتایج شبیه‌سازی از همخوانی نسبتاً خوبی برخوردار است. همچنین با اندازه‌گیری و محاسبه‌ی طیف تراگسیل، فاکتور شایستگی، فروزانی تراگسیلنده و میزان انتقال گرما مشخص شد که ساختار ZnS/Au/ZnS به دلیل بالاترین فاکتور شایستگی ( $4.6 \text{ m}\Omega^{-1}$ )، کمترین مقاومت سطحی ( $14 \Omega.\text{cm}^{-2}$ ) و بالاترین درصد تراگسیل در ناحیه مرئی (۷۶٪) برای استفاده در سطوح رسانای شفاف، و ساختار ZnS/Ag/ZnS با فاکتور شایستگی کمتر ( $0.52 \text{ m}\Omega^{-1}$ )، مقاومت سطحی ( $13.5 \Omega.\text{cm}^{-2}$ ) و در صد تراگسیل در ناحیه مرئی (۶۱٪) برای ساختارهای شفاف ضد بازتاب در ناحیه مرئی، نسبت به دو ساختار دیگر ZnS/Al,Cu/ZnS مناسب‌ترند. همچنین میزان تلفات گرمایی این دو ساختار تقریباً یکسان است.

از طرف دیگر برای بررسی بیشتر، تغییرات دمایی شیشه‌های لایه‌نشانی شده نسبت به شیشه‌ی بدون لایه در دستگاه شبیه‌ساز خورشیدی در شرایط استاندارد ( $10 \text{ mW.cm}^{-2}$ ) AM1.0 اندازه‌گیری شد (شکل ۱۰). این تغییرات نشان می‌دهد که کمترین میزان عبور فروسرخ طیف خورشید به ترتیب به ساختارهای با فلزات آلومینیوم، مس، طلا و نقره وابسته است که باعث می‌شود طیف گرمایی از شیشه عبور نکند و برعکس امواج فروسرخ ناشی از وسایل گرمایشی که در محیط داخلی طرف دیگر شیشه (پنجره) هستند بازتاب یابند. از این پدیده می‌توان در پنجره‌های ضد اتلاف انرژی استفاده کرد.

#### برداشت

چهار نمونه از نانوساختارهای رسانای شفاف سه‌لایه-ای ZnS/Au,Ag,Cu,Al/ZnS با بهینه‌کردن ضخامت لایه-های فلزات طلا، نقره، مس و آلومینیوم و نیمرسانای سولفید روی شبیه‌سازی شدند. سپس ساختارهای بهینه به روش تبخیر گرمایی روی بستر شیشه‌ای لایه نشانی شدند. نمونه‌های ساخته



شکل ۱۰ اندازه‌گیری تغییرات دمایی (۱) شیشه (۲) ZnS/Ag/ZnS (۳) ZnS/Al/ZnS (۴) ZnS/Cu/ZnS (۵) ZnS/Au/ZnS تحت تابش استاندارد AM1.0 ( $10 \text{ mW.cm}^{-2}$ ).

## مراجع

- [10] S.M.B. Ghorashi, A. Behjat, M. Neghabi, G. Mirjalili, "Effects of air annealing on the optical, electrical, and structural properties of nanostructured ZnS/Au/ZnS films", *Applied Surface Science* 257 (2010) 1602-1606.
- [11] Y.P. Venkata Subbaiah, P. Prathap, K.T. Ramakrishna Reddy, "Structural, electrical and optical properties of ZnS films deposited by close-spaced evaporation", *Applied Surface Science* 253 (2006) 2409-2415.
- [12] Pei Zhao, WeitaoSu, RengWang, XiaofengXu, FengshanZhang, "Properties of thin silver films with different thickness", *Physica E* 41 (2009) 387-390.
- [13] B.D. Cullity, "Elements of X-ray diffraction", second edition, Addison-Wesley, MA (1978).
- [14] P. Prathap, N Revathi, Y P Venkata Subbaiah and K T Ramakrishna Reddy, "Thickness effect on the microstructure, morphology and optoelectronic properties of ZnS films", *J. Phys. Condens. Matter*, 20 (2008).
- [15] G. Haacke, "New figure of merit for transparent conductors", *J. Appl. Phys.* 47 (1976) 4086.
- [16] G. Leftheriotis, S. Papaefthimiou, P. Yianoulis, "Development of multilayer transparent conductive coatings", *Solid State Ionics* 136-137 (2000) 655-661.
- [17] X. Liu, X. Cai, J. Qiao, J. Mao, N. Jiang, "The design of ZnS/Ag/ZnS transparent conductive multilayer films", *Thin Solid Films* 441 (2003) 200-206.
- [1] A.M. Al-Shukri, "Thin film coated energy-efficient glass windows for warm climates", *Desalination*. 209 (2007) 290.
- [2] S.M. A. Durrani, E.E. Khawaja, A.M. Al-Shukri, M.F. Al-Kuhaili, "Dielectric/Ag/dielectric coated energy-efficient glass windows for warm climates", *Energy and building* 36 (2004) 891-898.
- [3] C.G. Granqvist, "Transparent conductors as solar energy materials: A panoramic review", *Solar Energy Materials & Solar Cells* 91 (2007) 1529-1598.
- [4] C.G. Granqvist, "Transparent conductors as solar energy materials: A panoramic review", *Solar Energy Materials & Solar Cells* 91 (2007) 1529-1598.
- [5] H. Pang, Y. Yuan, Y. Zhou, J. Lian, L. Cao, J. Zhang, X. Zhou, "ZnS/Ag/ZnS coating as transparent anode for organic light emitting diodes", *Journal of Luminescence* 122-123 (2007) 587-589.
- [6] C. Guillen, J. Herrero, "ITO/metal/ITO multilayer structures based on Ag and Cu metal films for high-performance transparent electrodes", *Solar Energy Materials & Solar Cells* 92 (2008) 938-941.
- [7] H.A. Macleod, "Thin film optical filters", Third edition, Institute of physics publishing, (2001).
- [8] E.D. Palik, "Handbook of optical constants of solids", Academic press, USA, (1998).
- [9] P.B. Johnson, R.W. Christy, "Optical constants of the noble metals", *Physical review B* 6 (1972) 4370-4379.