

## اثر دمای زیر لایه روی خواص ساختاری و مورفولوژی سطح لایه های نازک تلورید کادمیم

خرم آبادی، شیوا؛ رضا قلی پور دیزجی، حمید؛ احسانی، محمد حسین؛ قوامی میر محله، سید فیض اله

آزمایشگاه لایه نازک، گروه فیزیک، دانشکده علوم پایه، دانشگاه سمنان، سمنان

### چکیده

لایه های نازک تلورید کادمیم با استفاده از روش تبخیر حرارتی روی زیر لایه شیشه با ضخامت تقریبی  $650\text{ nm}$  تهیه شدند. در این پژوهش، اثر دمای زیر لایه روی خواص ساختاری و مورفولوژی سطح نمونه ها مورد مطالعه قرار گرفت. آنالیزهای ساختاری با استفاده از تحلیل پراش اشعه ایکس (XRD) و بررسی مورفولوژی سطح نیز با میکروسکوپ الکترونی روبشی اثر میدان (FESEM) انجام شد. محاسبه پارامترهای ساختاری آشکار نمود که اندازه بلورکها با افزایش دمای زیر لایه بزرگتر شد. همچنین کیفیت مشاهده گردید که کیفیت بلوری لایه ها با افزایش دمای زیر لایه بهبود یافت.

## Effect of substrate temperature on the structural properties and surface morphology of cadmium telluride thin films

Khorrabadi, Shiva; Rezagholipour Dizaji, Hamid; Ehsani, Mohammad Hosein; ghavami mir mahaleh, seyed feyzolah

Thin Film Lab., Physics Department, Semnan University, Semnan

### Abstract

The cadmium telluride thin films with the thickness of  $650\text{ nm}$  were deposited on glass substrate by vacuum thermal evaporation technique. In the present investigation, the effect of substrate temperature on the structural properties of the prepared samples was studied. The structural analysis was carried out by x-ray diffraction (XRD) and field effect scanning electron microscopy (FESEM) techniques. Calculation of structural parameters revealed the increase of the crystallite size upon increasing the substrate temperature. It was also observed that the layers crystallinity improved due to the increase in substrate temperature.

PACS No. (81.15)

هایی است نظیر کاهش میزان ناخالصی هایی که ممکن است حین رشد وارد لایه شوند و همچنین لایه کمتر در معرض اکسید شدن قرار می گیرد [۸]. در این روش ماده مورد نظر در یک بوتله قرار داده شده و پس از آنکه محفظه به خلأ مورد نظر رسید در اثر عبور جریان الکتریکی از بوتله، ذوب و سپس تبخیر میگردد. این بخارات بر روی زیر لایه ای که در بالای بوتله قرار گرفته است چگالیده شده و تشکیل یک لایه را می دهد. در این مقاله مطالعه وابستگی خصوصیات ساختاری لایه های تلورید کادمیم به دمای زیر لایه و تأثیر آن روی کیفیت بلوری گزارش شده است.

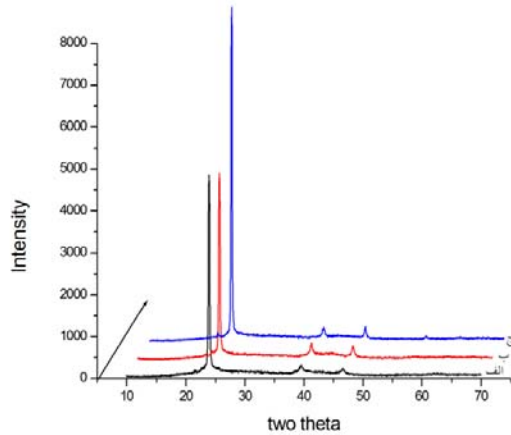
### مقدمه

امروزه لایه های نازک تلورید کادمیم به خاطر استفاده در تولید دیود ها و رساناهای حساس به نور و ترانزیستورها و آشکارسازهای فروسرخ مورد توجه هستند [۱]. در برخی از سلولهای خورشیدی از تلورید کادمیم به عنوان لایه جاذب نور در کنار یک لایه موسوم به لایه پنجره استفاده میشود. روشهای متفاوتی برای تهیه لایه نازک تلورید کادمیم مناسب شناخته شده اند نظیر تصعید در فضای بسته [۲]، الکترو انباشت [۳ و ۴]، برآرستی باریکه مولکولی [۵]، رسوب گذاری از بخار شیمیایی فلزات آلی [۶]، انباشت در خلأ [۷ و ۸] و غیره. در این میان روش تبخیر در خلأ بویژه در مقایسه با روش های شیمیایی دارای برتری

## روش آزمایش

به منظور مطالعه ی پارامتر های شبکه تلورید کادمیم از روابط زیر استفاده شد که نتایج آن در جدول ۱ ثبت شده است.

$$\sin \theta = \frac{n\lambda}{2d} \quad (1)$$



شکل ۱: مقایسه طیف XRD لایه های نازک تلورید کادمیم ساخته شده در دماهای زیر لایه متفاوت

$$\frac{1}{d^2} = \frac{h^2+k^2+l^2}{a^2} \quad (2)$$

در رابطه (۱)،  $d$  فاصله صفحات بلوری،  $\lambda$  طول موج اشعه ایکس فرودی،  $\theta$  زاویه براگ،  $n = 1$  مرتبه پراش و همچنین در رابطه (۲)،  $h, k, l$  اندیسهای میلر و  $a$  ثابت شبکه می باشد.

جدول ۱: پارامتر های ساختاری

نمونه	$2\theta$ درجه	$D$ (Å)	$a=b=c$ (Å)	$hkl$
الف ۲۰۰ درجه سلسیوس	۲۳/۸۹	۳/۷۳	۶/۴۶	۱۱۱
	۳۹/۵۳	۲/۲۷	۶/۴۴	۲۲۰
	۴۶/۶۰	۱/۹۴	۶/۴۵	۳۱۱
ب ۳۰۰ درجه سلسیوس	۲۳/۸۲	۳/۷۳	۴۶/۶	۱۱۱
	۳۹/۴۴	۲/۲۸	۶/۴۵	۲۲۰
	۴۶/۴۴	۱/۹۵	۶/۴۷	۳۱۱
ج ۴۰۰ درجه سلسیوس	۲۳/۹۱	۳/۷۲	۶/۴۴	۱۱۱
	۳۹/۴۹	۲/۲۸	۶/۴۴	۲۲۰
	۴۶/۵۳	۱/۹۵	۶/۴۶	۳۱۱

به منظور بررسی خواص ساختاری نمونه ها پارامتر های وابسته در جدول ۲ ثبت گردید. از جمله این پارامتر ها، اندازه بلورک ها ( $D$ )، چگالی دررفتگی ها ( $\rho$ )، تنش ( $\epsilon$ ) می باشد. اندازه متوسط بلورکها ( $D$ ) با توجه به محاسبات و برازش داده ها با معادله

لایه های نازک تلورید کادمیم با استفاده از روش تبخیر حرارتی در خلأ بر روی زیر لایه هایی از جنس شیشه تهیه گردید. عملیات لایه نشانی در دستگاه VACUUM COATING HINDHIVAC -UNIT MODEL ساخت شرکت انجام گردید.

از پودر تلورید کادمیم با خلوص بالا برای لایه نشانی استفاده گردید. همچنین بوته درپوش دار از جنس مولیبدن برای تبخیر تلورید کادمیم مورد استفاده قرار گرفت. فشار محفظه  $5 \times 10^{-6}$  میلی بار، فاصله بوته تا زیر لایه ۱۶cm و نرخ لایه نشانی ۱۰ آنگستروم بر ثانیه بود. ضخامت لایه ها توسط بلور کوارتز تعبیه شده در دستگاه لایه نشانی ۶۵۰ نانو متر ثبت شد.

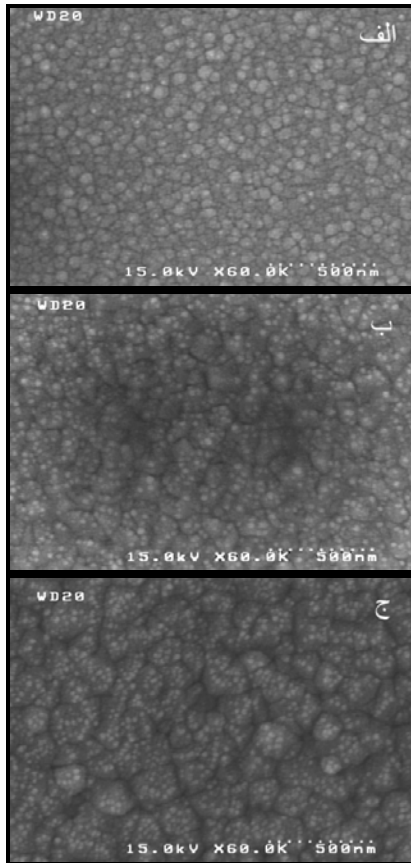
در سیستم خلأ از یک گرمکن تشعشعی برای گرم کردن زیر لایه ها استفاده گردید. لایه هایی با دمای زیر لایه ۲۰۰، ۳۰۰ و ۴۰۰ درجه سانتی گراد، که به ترتیب نمونه های الف، ب و ج نامیده می شوند، تهیه شد.

## نتایج و بحث

جهت بررسی خواص ساختاری نمونه های ساخته شده از دستگاه اشعه X، با هدف مس و پرتو  $K\alpha$  استفاده شد. شکل (۱) طیف XRD لایه های نازک تلورید کادمیم ساخته شده در دماهای مختلف زیر لایه را نشان می دهد.

ساختار لایه های نازک تلورید کادمیم لایه نشانی شده در دماهای مختلف از نوع زینک بلند می باشد. با توجه به شکل، قله های مشخصه تلورید کادمیم در طیف هر سه نمونه در موقعیت های یکسانی مشاهده می شوند که تنها از لحاظ شدت با یکدیگر متفاوتند. در جدول (۱) شدت قله های (۱۱۱)، (۲۲۰) و (۳۱۱) برای دماهای مختلف مشخص شده است. در هر سه این طیف ها قله (۱۱۱) دارای شدت بیشتری نسبت به دو قله دیگر می باشد. این نشان می دهد یک جهت ترجیحی برای رشد ریز بلورک ها<sup>۵</sup> عمود بر سطح زیر لایه که همان جهت [۱۱۱] است [۹]، وجود دارد. در کار مشابهی که توسط پرسک<sup>۶</sup> و همکارانش انجام شده جهت ترجیحی، دسته صفحه {۱۱۱} تشخیص داده شد که موازی با سطح زیر لایه است [۱۰].

توسط دمای زیر لایه ایجاد می شود ناکاملی ها ممکن است موازی با زیرلایه جابه جا شوند. فهمیده شده که فیلم هایی که در دمای اتاق لایه نشانی می شوند اثر تنش داخلی در آنها بیشتر از اثر تنش حرارتی است [۱۱].



شکل ۲: تصویر FESEM (نمونه در دماهای الف) ۲۰۰ درجه سلسیوس (ب) ۳۰۰ درجه سلسیوس (ج) ۴۰۰ درجه سلسیوس

تحلیل مورفولوژی سطح نیز با استفاده از میکروسکوپ الکترونی روبشی اثر میدان (FESEM) انجام شده که نتایج در شکل های (۲) و (۳) نشان داده شده است. همانطور که در شکل (۲ و ۳) نمایان است با افزایش دمای زیر لایه به هم پیوستگی جزیره ها نیز افزایش یافته است و لایه آگلومره تر<sup>۱۱</sup> شده است. در این دما جزیره ها به شدت در هم فرو رفته اند و ساختار بلوری منظم تری تشکیل داده اند و لایه ای یکنواخت را به وجود آورده اند. بنابر این لایه ای که در دمای بالاتر رشد داده شده نسبت به لایه ای که در دمای پایین تر رشد یافته تخلخل کمتری داشته در نتیجه می تواند جذب نور بیشتری داشته باشد و از آنجا که یکی

گوسین روی قله ارجح (۱۱۱) و با استفاده از معادله ی دبی- شرر (رابطه (۳)) بدست می آید [۱۱]:

$$D = \frac{k\lambda}{\beta \cos \theta} \quad (3)$$

که در این رابطه  $\lambda$  طول موج پرتو X برابر با  $1.5406 \text{ \AA}$ ،  $\beta$  پهنای قله در نیم بیشینه (FWHM)،  $\theta$  زاویه براگ و  $k=0.9$  انتخاب شده است.

همچنین با محاسبه D می توان  $\sigma$ ، تعداد در رفتگی های خطی در واحد سطح بلور را به کمک رابطه زیر به دست آورد [۱۱].

$$\sigma = \frac{1}{D^2} \quad (4)$$

هرچه مقدار  $\sigma$  کمتر باشد ساختار بلوری لایه ها بهتر می باشد.

همچنین  $\varepsilon$  تنش لایه ها را نیز میتوان از روابط زیر بدست آورد.

$$\varepsilon = \frac{\beta \cos \theta}{4} \quad (5)$$

جدول ۲: اندازه بلورکها و نقایص بلوری نمونه ها

نمونه	B (111)	D(nm)	$\varepsilon \times 10^{-3} \text{ n}^{-2}\text{m}^{-2}$	$\sigma \times 10^{15} \text{ Lin.m}^{-2}$
الف	۰/۲۳	۴۲/۳	۰/۹۸	۰/۵۵
ب	۰/۲۲	۴۵/۳	۰/۹۵	۰/۴۸
ج	۰/۲۱	۴۶/۸	۰/۸۹	۰/۴۵

کاهش پهنای قله در نیم بیشینه (FWHM) نشان دهنده کاهش درغلظت ناکاملی های شبکه است. کاهش این ناکاملی ها باعث کاهش تنش داخلی در فیلم و افزایش اندازه دانه ها می شود. این نتیجه توسط ال کادری<sup>۷</sup> و همکارانش نیز گزارش شده است [۱۲]. از آنجا که میزان وجود در رفتگی ها در لایه تهیه شده را می توان با استفاده از مقدار تنش و چگالی در رفتگی ها دریافت، کاهش این دو پارامتر شکل گیری لایه با کیفیت بهتر را در دمای بالاتر زیرلایه نشان می دهد. تحرک اتم های منفرد<sup>۸</sup> با افزایش دمای زیر لایه افزایش می یابد. این امر باعث می شود به هم پیوستگی اتمها در اثر تحرک بیشترشان افزایش یابد که نتیجه آن افزایش اندازه بلورک ها و ساختار بلوری بهتر است [۱]. تنش افزایش یافته به دلیل عدم انطباق<sup>۹</sup> شبکه است. تنش دو مؤلفه دارد: تنش گرمایی که ناشی از اختلاف ظریب انبساط لایه وزیرلایه است و دیگر تنش داخلی که ناشی از اثر انباشتگی ترک های<sup>۱۰</sup> بلوری است که در حین لایه نشانی ایجاد می شوند. با تحرک سطحی اتمها که

## مرجع ها

- [۱] R. Sathyamoorthy and Sa. K Narayandass and D. Mangalarajb; "Effect of substrate temperature on the structure and optical properties of CdTe thin film"; *Solar Energy Materials and Solar Cells* **76**, (2003) 339-346.
- [۲] H.M. Al-Allak, A.W. Brinkman, H. Richter, D. Bonnet, "Dependence of thin film solar cell characteristics on the processing conditions" *J.Cryst. Growth* **59** (1996) 910-915.
- [۳] Bulent.M. Basol, vijay.K. Kapur, Michael.L. Ferris, "Low cost technique for preparing Cd1-xZnxTe films and solar cells", *J. Appl. Phys.* **66** (1989) 1816-1821.
- [۴] X. Mathew, N. Mathews, P. Sebastian, C. Flores,"Deep levels in the band gap of CdTe films electrodeposited from an acidic bath—PICTS analysis" *Solar Energy Mater. Solar Cells* **81** (2004) 397-405
- [۵] S. Ringel, A. Smith, M. MacDougal, A. Rohatgi, "The effects of CdCl<sub>2</sub> on the electronic properties of molecular beam epitaxially grown CdTe/CdS heterojunction solar cells" *J. Appl. Phys.* **70** (1991) 881-889.
- [۶] T. Chu, S. Chu, C. Ferekides, J. Britt, C. Wu, "Thin film junctions of cadmium telluride by metalorganic chemical vapor deposition" *J. Appl. Phys.* **71** (1992) 3870-3876.
- [۷] U. Khairnar, D. Bhavsar, R. Vaidya, G. Bhavsar, "Optical properties of thermally evaporated cadmium telluride thin films" *Mater. Chem.Phys.* **80** (2003) 421-427.
- [۸] S. Lalitha, S. Zh. Karazhanov, P. Ravindran, S. Senthilarasu, R. Sathyamoorthy, J. Janabergenov, "Electronic structure, structural and optical properties of thermally evaporated CdTe thin films" *Physica B* **387** (2007) 227-238.
- [۹] A. Ashour, M. R. Ebied, N. El-Kadry, M.F. Ahmed, A.A Ramadan; "Thermal effects on structural characterization of evaporated CdTe films during and after deposition"; *Appl. Surf. Sci.* **89** (1995) 159-168.
- [۱۰] G.Purcek, E. Bacaksiz, I. Miskioglu, Structure and nanomechanical properties of cdte thin films; *j. of materials processing technology* **98** (2008) 202-206.
- [۱۱] S. Lalitha, R. Sathyamoorthy, S. Senthilarasu, A. Subbarayan, K. Natarajan; "Characterization of CdTe thin film—dependence of structural and optical properties on temperature and thickness"; *Sol. En. Mat & Sol. Cells* **82** (2004) 187-199.
- [۱۲] N. El-Kadry; E.Ashour; S.E. Mahmoud; *Thin Solid Films*, **120** (1984) 23.

<sup>1</sup>Close-Spaced Sublimatin

<sup>2</sup> Electro Deposition

<sup>3</sup> Metal Organic Chemical Vapor Deposition

<sup>4</sup> Zinc-blend

<sup>5</sup> Micro-crystallites

<sup>6</sup>Purcek

<sup>7</sup> El-Kadry

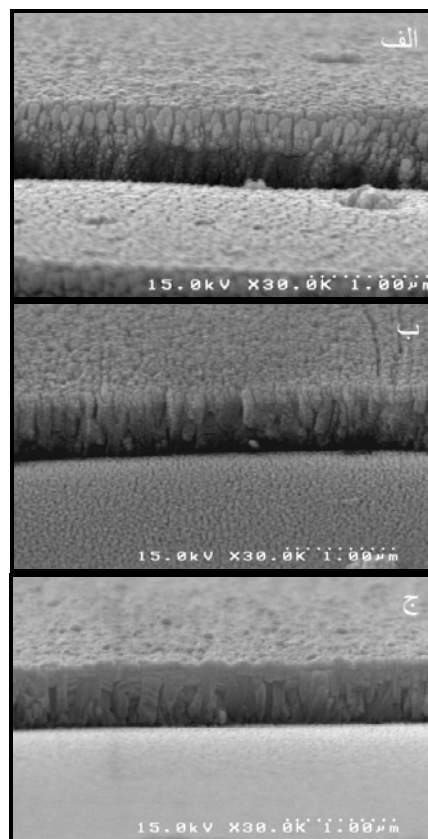
<sup>8</sup> adatom

<sup>9</sup> misfit

<sup>10</sup> flaws

<sup>11</sup> agglomerate

از مهمترین کاربردهای لایه تلورید کادمیم استفاده از آن به عنوان یک لایه جاذب نور در سلولهای خورشیدی است، می توان از این امر برای بهبود بازده در سلولهای خورشیدی بهره گرفت.



شکل ۳: تصویر FESEM (از بغل) نمونه در دماهای الف) ۲۰۰ درجه سلسیوس (ب) ۳۰۰ درجه سلسیوس ج) ۴۰۰ درجه سلسیوس

## نتیجه گیری

لایه های نازک تلورید کادمیم با روش تبخیر حرارتی و با دماهای زیر لایه متفاوت تهیه گردیدند. طیف اشعه ایکس نمونه ها بدست آمد و تأثیر دمای زیر لایه روی آنها بررسی شد. ملاحظه گردید که افزایش دمای زیر لایه باعث افزایش اندازه بلورکها، کاهش تنش در لایه ها و همچنین کاهش تعداد در رفتگی های خطی در واحد سطح بلور گردید. همچنین کیفیت بلوری به طور چشمگیری با افزایش دمای زیر لایه بهبود یافت. بنابر این می توان نتیجه گیری کرد که با بالا بردن دمای زیر لایه می توان به لایه ای با پیوستگی بیشتر و خواص بلوری بهتر دست یافت.