

SID



سرویس های ویژه



سرویس ترجمه تخصصی



کارگاه های آموزشی



بلاگ مرکز اطلاعات علمی



عضویت در خبرنامه



فیلم های آموزشی

کارگاه های آموزشی مرکز اطلاعات علمی جهاد دانشگاهی



PROPOSAL

پروپوزال

مركز آموزش پروپوزال نویسی و پایان نامه نویسی

کارگاه آنلاین پروپوزال نویسی و پایان نامه نویسی



مركز آموزش روش تحقیق و مقاله نویسی علوم انسانی

کارگاه آنلاین روش تحقیق و مقاله نویسی علوم انسانی



ISI Scopus

مركز آموزش آشنایی با پایگاه های اطلاعات علمی بین المللی و ترکیه های جستجو

کارگاه آنلاین آشنایی با پایگاه های اطلاعات علمی بین المللی و ترکیه های جستجو

تحلیل طیف‌های UV و IR بدست آمده از نمونه‌های آمورف شیشه‌ای با ترکیب

$P_2O_5-MoO_3-CaO-Li_2O$

سهیلی، احسان^۱؛ حکمت شعار، محمدحسین^۲؛ پرچم، فرشاد^۳

^{۱,۲,۳} دانشکده علوم پایه دانشگاه صنعتی سهند، شهر جدید سهند، تبریز

چکیده

فیلم‌های نازک دمشی آمورف با ترکیب $40P_2O_5-(35-x)MoO_3-xCaO-20Li_2O$ ساخته شد و با انجام طیف سنجی UV و IR، خواص اپتیکی آنها بررسی گردید. این طیف‌ها، نوارهای جذبی IR مرتبط با پیوندهای مشخصه‌ی فسفات، به خصوص $P-O^-$ ، $P=O$ ، $P-O-Mo$ ، PO_4^{3-} و $P-O-H$ را نشان دادند. طیف UV، برای هر نمونه، در گستره‌ی طول موج ۲۰۰-۵۰۰ نانومتر ثبت گردید و به موجب آن مشخص شد که با افزایش اکسید کلسیم، گاف اپتیکی افزایش می‌یابد اما انرژی اورباخ با تغییرات نامنظمی همراه می‌شود. چنین رفتاری به افزایش اکسیژن‌های غیر پیوندی نسبت داد. همچنین، تغییرات ضریب جذب با انرژی فوتون فرودی، نشان دهنده‌ی گذارهای اپتیکی غیر مستقیم در نمونه‌های تهیه شده می‌باشد.

Analysis of UV and IR spectroscopy of amorphous glassy samples with combination of $P_2O_5-MoO_3-CaO-Li_2O$

Soheily, Ehsan¹; Hekmat Shoar, Mohammad Hossein²; Parcham, farshad³

^{1,2,3} Department of Physics, Sahand University of Technology, Sahand New Town, Tabriz

Abstract

Amorphous thin blowing films with combination of $P_2O_5-MoO_3-CaO-Li_2O$, were prepared and their optical properties determined by UV and IR spectroscopy. These spectra showed IR absorption bands related to the characteristic phosphate bonds specially $P-O^-$, $P=O$, $P-O-Mo$, PO_4^{3-} , $Mo-O$ and $P-O-Ca$ bonds. UV spectra have been recorded for each sample in the wavelength range 200-500 nm whereby, it found that optical band gap increases with increasing of calcium oxide content but Urbach energy gets the non-order variation. Such behavior is attributed to increasing of non-bridges oxygen. The variation of absorption coefficient with incident photon energy, also displayed the indirect optical transitions in prepared specimens.

PACS No.

مقدمه و تئوری آزمایش

اپتیک و لیزر دارند [۴-۶]. خواص اپتیکی متأثر از خواص شبکه‌ای و خواص الکترونی هستند. خواص الکترونی، به فرآیندهایی مربوط می‌شود که شامل حالت‌های الکترونی یک جسم جامد است، در حالی که خواص شبکه ای شامل ارتعاشات شبکه‌ای می‌باشد [۷].

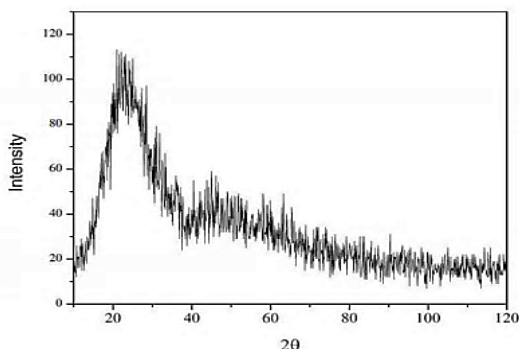
فرآیند آزمایشگاهی

بیشتر انواع شیشه‌ها به وسیله‌ی گداخت اکسیدهای تشکیل دهنده شبکه^۱ با دیگر اکسیدهای اصلاح کننده شبکه^۲ ساخته می‌شوند [۲]. در این آزمایش برای تهیه نمونه‌های آمورف، از

تحلیل طیف اپتیکی (در محدوده‌ی گسترده‌ای از انرژی فوتون فرودی) یکی از مؤثرترین روش‌ها در فهم و توسعه‌ی تئوری ساختار الکترونیکی در جامدات آمورف و کریستال می‌باشد [۱]. در واقع، با مطالعه‌ی طیف اپتیکی حاصل در محدوده‌ی گاف نوری و در نظر گرفتن انتقالات مربوط به ترازهای اکسایتونی می‌توان اندازه‌ی گاف اپتیکی، نوع گذار الکترونی (مستقیم یا غیر مستقیم)، ساختار باند الکترونیکی و انرژی اورباخ یک ماده را به دست آورد [۲،۳]. شیشه‌های فسفات حاوی اکسید فلزات انتقالی، به دلیل دارا بودن خواص فیزیکی ویژه (در مقایسه با شیشه‌های سیلیسیم)، از قبیل ضریب انبساط حرارتی بالا و دمای ذوب پایین، کاربرده‌ای زیادی در صنعت

¹ Glass former

² Glass modifier



شکل ۱: الگوی پراش پرتوی X، برای نمونه‌ی با ترکیب $x=10$ $40P_2O_5-xCaO_{(40-x)MoO_3}_{20Li_2O}$

A. دنباله‌ی انرژی پایین که قویاً به خلوص و همگنی ماده وابسته است.

B. قسمت نمایی، که اولین بار توسط اورباخ مشاهده شد، در طیف به دست آمده از مواد آمورف و کریستال مشاهده شده است [۹]. بر اساس مطالعات تویوزاوا، فتون، ردفیلد، دکستر و تاک، وجود این ناحیه نمایی، به میدان‌های الکتریکی داخلی ناشی از فونون‌ها یا ناخالصی‌های باردار نسبت داده می‌شود [۸]. در این ناحیه، ضریب جذب، α ، را می‌توان از رابطه‌ی زیر به دست آورد.

$$\alpha(\nu) = \alpha_0 \exp\left(-\frac{h\nu}{E_u}\right) \quad (1)$$

که α_0 یک مقدار ثابت، $h\nu$ انرژی فوتون فرودی و E_u انرژی اورباخ بوده و نشان‌دهنده‌ی پهنای دنباله حالات جایگزیده در گاف انرژی است. در واقع، این کمیت متناظر با انتقالات اپتیکی بین حالات جایگزیده مجاور باند ظرفیت و حالات گسترش یافته در باند رسانش است [۱۰]. انرژی اورباخ به دما، نوسانات حرارتی در شبکه، بی‌نظمی القاء شده، بی‌نظمی ایستا، پیوندهای یونی قوی و میانگین انرژی فوتون‌های فرودی بستگی دارد [۲].

C. ناحیه جذب بالا که مربوط به گذارهای الکترونی بین نواری بوده و از تحلیل طیف در این ناحیه، می‌توان اندازه گاف اپتیکی را به دست آورد [۱۱]. رابطه‌ی بین ضریب جذب و انرژی فوتون فرودی در این ناحیه، به صورت زیر است.

روش سرد کردن سریع مذاب^۱ استفاده گردید. مقادیر معینی از مواد اولیه (با استفاده از تر ازوپی با دقت 0.1mg) شامل $(NH_4)_2H_2PO_4$ (۹۹٪)، Li_2CO_3 (۹۹٪)، MoO_3 (۹۹٪) و CaO (۹۹٪)، را با هم ترکیب کرده و برای به دست آوردن مخلوطی یکنواخت، خوب به هم زده شد. سپس مواد به داخل بوتله آلومینا که قبلاً با استون شسته شده بود، ریخته شدند. بوتله در داخل کوره‌ی الکتریکی، حدود یک ساعت در دمای ثابت $200^\circ C$ نگه داشته شد تا واکنش‌های اولیه انجام گیرد و ناخالصی‌ها از ترکیب خارج شوند. سپس دمای کوره به آرامی بالا برده شد تا به دمای ذوب ترکیب، در حدود $715^\circ C$ رسید. مذاب حاصل یک ساعت در این دما قرار گرفت و در این مدت چندین بار با لوله‌ی آلومینا به هم زده شد تا مذابی کاملاً همگن حاصل گردد. به منظور تهیه نمونه‌های کپه‌ای و انجام تست XRD، ماده مذاب را طی شرایطی (در کوره دیگر با دمای $290^\circ C$) به سرعت سرد کرده و برای تهیه فیلم‌های نازک دمشی و انجام طیف‌سنجی‌های UV^۲ و IR^۳، لوله‌ای از جنس آلومینا را در مذاب همگن باقیمانده فرو برده و با دمش از طرف دیگر آن، فیلم‌هایی با ضخامت تقریبی ۵ تا ۱۰ میکرومتر تهیه گردید. نمونه‌های ساخته شده دارای رنگ سبز بودند که با افزایش غلظت اکسید کلسیم، شفافیت آن‌ها بیشتر می‌شد. در نمونه‌های حاوی درصد‌های بالاتر اکسید کلسیم، به علت کاهش گرانیوی^۴، تهیه فیلم‌های نازک دمشی امکان‌پذیر نشد.

نتایج و تحلیل داده‌ها

شکل ۱ الگوی پراش پرتو X مربوط به یکی از نمونه‌های تهیه شده را نشان می‌دهد. نبود پیک تیز در این شکل، تأییدی بر آمورف بودن نمونه‌های شیشه‌ای ساخته شده، می‌باشد. همان‌طور که از شکل ۲ پیداست. اغلب در نیم رساناهای آمورف، می‌توان سه ناحیه از لبه‌ی جذب را از هم متمایز ساخت [۸].

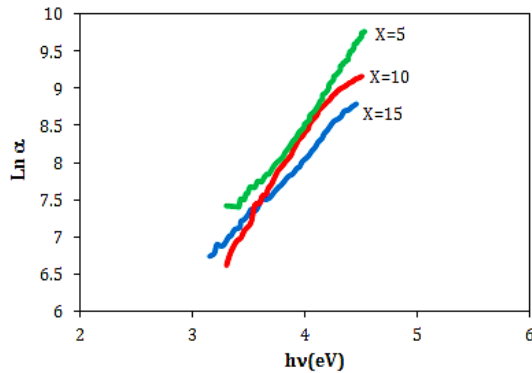
¹ Melt quenching technique

² JENWAY 6705, UV-Vis. Spectrophotometer.

³ Unicam 4600

⁴ Viscosity

طبیعت آمورف نمونه‌های ساخته شده است [۱۰، ۱۳، ۱۴]. و تغییرات انرژی اورباخ بصورت نامنظم روی می دهد. مطالعه انجام شده بر روی شیشه‌های فسفات- مس، نشان داده است که تأثیر نسبت $\frac{Cu^{2+}}{Cu_{tot}}$ موجود در ساختار شیشه، بر انرژی اورباخ، بیشتر از تأثیر ناشی از تغییر غلظت مواد اولیه است [۱۴].

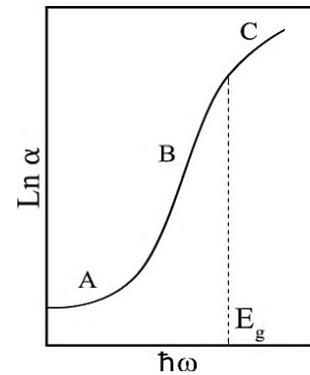


شکل ۴: نمودار $\ln \alpha$ بر حسب انرژی فوتون فرودی ($h\nu$) برای شیشه‌های با ترکیب $40P_2O_5-xCaO_{(35-x)}MoO_3_{20}Li_2O$ (برای واضح‌تر بودن منحنی‌ها، داده‌های مربوط به $x=10$ و $x=5$ به ترتیب با $0/2$ و $0/3$ جمع شده‌اند).

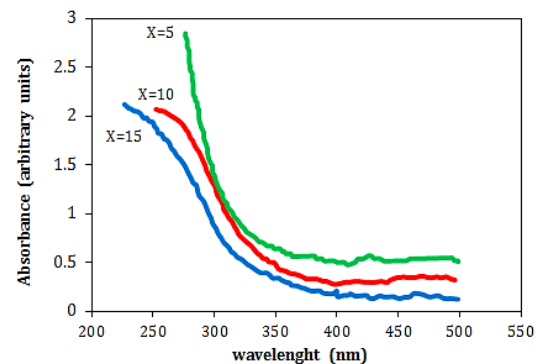
با محاسبه‌ی گاف اپتیکی مشاهده شد که با افزایش درصد اکسید کلسیم، اندازه‌ی گاف اپتیکی افزایش می‌یابد که با نتایج قبلی به دست آمده از تغییرات گاف الکتریکی نمونه‌های مشابه همخوانی کامل دارد. علت این امر را می‌توان در افزایش فاصله‌ی بین یون‌های مولیبدن (در ظرفیت‌های مختلف) دانست. همچنین افزایش درصد اکسید کلسیم، باعث افزایش اکسیژن‌های غیر پیوندی (اتم اکسیژنی که تنها به یک اتم فسفر متصل است) در ساختار آمورف می‌گردد. در واقع، یون‌های کلسیم به وسیله‌ی پیوندهایی که بیشتر از نوع یونی بوده و در نتیجه بسیار ضعیف‌تر از پیوندهای فسفر-اکسیژن هستند، به اکسیژن‌های اطرافشان متصل می‌شوند. این مشخصه باعث افزایش اندازه‌ی گاف اپتیکی، ناشی از افزایش اکسید کلسیم، می‌شود. رفتار مشابهی در شیشه‌های سه‌گانه‌ی $P_2O_5-CuO-CaO$ ، مشاهده شده است [۱۵]. با توجه به رابطه‌ی ۱، مقدار $n=2$ بهترین همخوانی را با منحنی‌های شکل ۵ داراست که نشان از وجود انتقالات غیرمستقیم مجاز در فرآیند گذار اپتیکی است [۱۲-۱۴]. فرآوانی نسبی

$$\alpha(\nu)h\nu = const (h\nu - E_{opt})^n \quad (2)$$

که در آن E_{opt} اندازه‌ی گاف اپتیکی، n مشخصه‌ی نوع فرآیند اپتیکی بوده و مقادیر آن برای انواع مختلف گذارها، بصورت مقابل است [۱۲]. $n=1/2$: گذار مستقیم مجاز، $n=1$: مواد غیر فلزی، $n=3/2$: گذار مستقیم ممنوعه، $n=2$: گذار غیر مستقیم مجاز، $n=3$: گذار غیر مستقیم ممنوعه.



شکل ۲: تغییرات لگاریتم ضریب جذب بر حسب انرژی فوتون فرودی در شیشه‌های فسفات شامل فلزات انتقالی، مقدار n برابر ۲ گزارش شده است [۴، ۱۳، ۱۴]. میزان جذب $\log \frac{I_0}{I_t}$ ، I_t و I_0 به ترتیب شدت پرتو فرودی و عبوری هستند (بر حسب طول موج فوتون فرودی، در شکل ۳ آمده است).



شکل ۳: طیف جذب اپتیکی (طیف UV) برای شیشه‌های با ترکیب $40P_2O_5-xCaO_{(35-x)}MoO_3_{20}Li_2O$ (برای واضح‌تر بودن منحنی‌ها، داده‌های مربوط به $x=10$ و $x=5$ به ترتیب با $0/2$ و $0/3$ جمع شده‌اند).

با توجه به روابط (۱) و (۲)، از رسم نمودار $\ln \alpha$ و $(\alpha h\nu)^{1/2}$ بر حسب انرژی فوتون فرودی و تحلیل قسمت خطی آن‌ها، به ترتیب می‌توان انرژی اورباخ و اندازه‌ی گاف اپتیکی را محاسبه کرد (شکل ۴ و شکل ۵). واضح است که در شکل ۴، لبه‌ی جذب تیزی وجود ندارد که مشخصه‌ی

روش اپتیکی می‌باشد. بدین منظور، پس از ساخت نمونه‌های شیشه‌ای (با استفاده از روش سرد کردن سریع ماده‌ی مذاب) با ترکیب $40P_2O_5-xCaO_{(35-x)}MoO_3_{20}Li_2O$ و حصول اطمینان از آمورف بودن آن‌ها (به وسیله‌ی الگوی پراش پرتو X)، از فیلم‌های دمشی تهیه شده طیف سنجی UV و IR به عمل آمد. تحلیل داده‌های به دست آمده، نشان داد که با افزایش غلظت اکسید کلسیم انرژی اوربک دارای تغییرات نامنظم بوده و گاف اپتیکی افزایش می‌یابد. همچنین، گذارهای اپتیکی در شیشه‌های تهیه شده، از نوع غیرمستقیم مجاز به دست آمد. طیف IR نیز، وجود پیوندهای گزارش شده در مقالات را تأیید نمود.

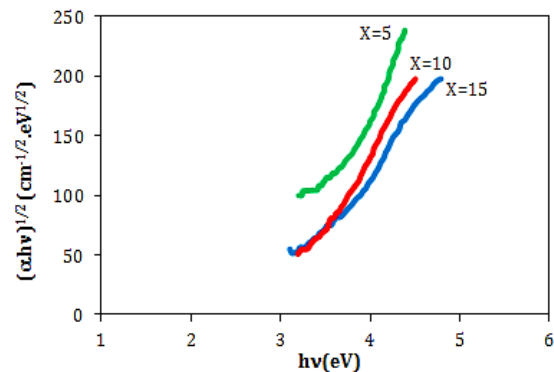
جدول ۱: مشخصات مربوط به طیف UV نمونه‌های ساخته شده $(40P_2O_5-xCaO_{(35-x)}MoO_3_{20}Li_2O)$

x(%mol)	گاف اپتیکی (eV)	انرژی اوربک (eV)
۵	۲/۹۰	۰/۴۳
۱۰	۲/۹۶	۰/۴۱
۱۵	۳/۰۵	۰/۵۹

منابع

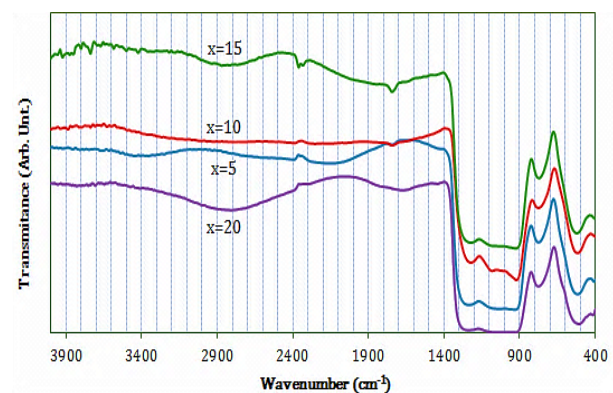
- [1] D. T. Pierce, W. E. Spicer, *Phys. Rev. B*, **5** (1972) 3017.
- [2] M. Abdel-Baki, F. El-Diasty, *Current Opinion in Solid State and Materials Science*, **10** (2006) 217.
- [3] N. F. Mott, E. A. Davis, "Electronic processes in non-crystalline material", Oxford: Clarendon Press; 1979.
- [4] P.Y. Shih, H. M. Shiu, *Materials Chemistry and Physics*, **106** (2007) 222.
- [5] A. A. Kader, A. A. Higazy, M. M. Elkholy, *J. Mater. Sci.: Mater. Electron*, **2** (1991) 157.
- [6] P. Subbalakshmi, N. Veeraiyah, *Mater. Lett.*, **56** (2002) 880.
- [7] عمر، علی، "فیزیک حالت جامد (جلد دوم)" اراک: انتشارات دانشگاه اراک. ترجمه: غلامرضا نبیونی، ۱۳۸۱.
- [8] J. Tauc, *Mater. Res. Bull.*, **5** (1970) 721.
- [9] F. Urbach, *Phys. Rev.*, **92** (1953) 1324.
- [10] S. Sindhu, S. Sanghi, A. Agarwal, V. P. Seth, N. Kishore, *Spectrochimica Acta Part A*, **64** (2006) 196.
- [11] E. A. Davis, N. F. Mott, *Phil. Mag.*, **22** (1970) 903.
- [12] M. Elahi, D. Souri, *Indian Journal of Pure and Applied Physics*, **44** (2006) 468.
- [13] Z. A. Talib, et al., *Journal of Physics and Chemistry of Solids*, **69** (2008) 1969.
- [14] B. S. Bae, M. C. Weinberg, *J. Appl. Phys.*, **73**(11) (1993) 7760.
- [15] G. R. Moridi, C. A. Hogarth, W. E. Spear (Eds.), "Proceedings of the Seventh International Conference on Amorphous and Liquid Semiconductor", CICL, Edingburg, (1977), 688.
- [16] M. K. Hekmat-Shoar, C. A. Hogarth, G. R. Moridi, *Journal of Materials Science*, **26** (1991) 904.
- [17] S.M. Abo-Naf, et al., *Optical Materials*, **30** (2008) 900.
- [18] Karam Abdel-Aati ALI, *Turk J Phys.*, **27** (2003) 225.

اکسیژن‌های غیر پیوندی (به عنوان اتم‌های اکسیژن با بار منفی) در تعیین خواص اپتیکی، ترمودینامیکی و دینامیکی شیشه‌ها نقش بسزایی دارد [۲]. قدرت و تعداد این پیوندها (بین اکسیژن‌ها و کاتیون‌ها) تحت تأثیر شعاع و عدد هم‌آرایی کاتیون‌ها می‌باشد [۴]. هرچه شعاع و عدد هم‌آرایی بیشتر باشند، پیوندهای قوی‌تر و بیشتری تشکیل می‌شوند. جدول ۱، اطلاعات مربوط به داده‌های به دست آمده را نشان می‌دهد.



شکل ۵: نمودار $(\alpha hu)^{1/2}$ بر حسب انرژی فوتون فرودی (hu) برای شیشه‌های با ترکیب $40P_2O_5-xCaO_{(35-x)}MoO_3_{20}Li_2O$ (برای واضح‌تر بودن منحنی‌ها، داده‌های مربوط به $x=10$ و $x=5$ به ترتیب با ۴۰ و ۱۰ جمع شده‌اند).

همچنین، با انجام طیف سنجی IR و مقایسه‌ی آن با اطلاعات داده شده در مقالات، وجود پیوندهای $P=O$ ، $Mo-O$ ، $P-O$ ، $P-O-H$ و $P-O-Ca$ ، $P-O-Mo$ ، [۴، ۱۶-۱۸] تأیید گردید.



شکل ۶: طیف IR (عبوری) مربوط به شیشه‌های نیم‌رسانا با ترکیب $40P_2O_5-xCaO_{(35-x)}MoO_3_{20}Li_2O$ (برای واضح‌تر بودن منحنی‌ها، داده‌های مربوط به $x=15$ ، $x=10$ ، $x=5$ به ترتیب با ۴۰، ۲۰، ۱۰ جمع شده‌اند).

جمع بندی

یکی از روش‌های مؤثر در تعیین ساختار باندهای الکترونی مواد،

SID



سرویس های ویژه



سرویس ترجمه تخصصی



کارگاه های آموزشی



بلاگ مرکز اطلاعات علمی



عضویت در خبرنامه



فیلم های آموزشی

کارگاه های آموزشی مرکز اطلاعات علمی جهاد دانشگاهی



PROPOSAL
پروپوزال

پروپوزال نویسی و پایان نامه نویسی

دوره آموزشی

کارگاه آنلاین
پروپوزال نویسی و پایان نامه نویسی



روش تحقیق و مقاله نویسی علوم انسانی

دوره آموزشی

کارگاه آنلاین
روش تحقیق و مقاله نویسی علوم انسانی



ISI
Scopus

آشنایی با پایگاه های اطلاعات علمی بین المللی و ترند های جستجو

دوره آموزشی

کارگاه آنلاین آشنایی با پایگاه های اطلاعات علمی بین المللی و ترند های جستجو