

Effects of Annealing on the Crystal Structure of Polycrystalline CdS Thin Films

S. M. A. Salehi, A. Jalilpiran, Gh. Mirjalili

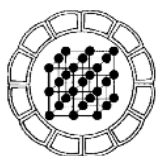
Faculty of Physics, Yazd University, Iran

E-mail: sma.salehi@yazduni.ac.ir

(Received:23/8/2006, received in revised form:14/4/2007)

Abstract: CdS thin films were deposited by thermal evaporation in a vacuum of $\sim 10^{-5}$ torr at room temperature. Samples were subjected to annealing in the range of temperatures 100-300 °C for 1 hour in air. The crystal structure of CdS films was characterized by XRD technique. Only hexagonal phase with the preferred (002) plane was found in CdS films.

Keywords: *CdS, Annealing, Crystal Structure, Vacuum Evaporation*



انجمن بلورشناسی و گالی شناسی ایران

شماره ۱، بهار و تابستان ۸۶، از صفحه ۲۱۱ تا ۲۱۸

مجله
بلورشناسی
و گالی شناسی
ایران

اثر باز پخت بر ساختار بلوری لایه‌های نازک سولفید کادمیوم

سیدمحمدعلی صالحی، علی جلیل پیران، غضنفر میرجلیلی

دانشکده فیزیک دانشگاه یزد

پست الکترونیکی: sma.salehi@yazduni.ac.ir

(دریافت مقاله ۱۳۸۵/۶/۱، دریافت نسخه نهایی ۱۳۸۶/۱/۲۵)

چکیده: لایه‌های نازک سولفید کادمیوم به روش تبخیر در خلأ تهیه شد. اثر باز پخت در مجاورت هوا و در دماهای 100°C ، 200°C و 300°C بررسی و با لایه‌های بدون باز پخت مقایسه گردید. با استفاده از پراش پرتو ایکس (XRD) برای آنالیز ساختار شبکه لایه‌ها، معلوم شد که ساختار لایه‌ها شش گوشه با جهت رشد (۰۰۲) بوده و بیشترین بی‌نظمی آن در دمای باز پخت بالاتر از 200°C رخ داده است.

واژه‌های کلیدی: سولفید کادمیوم، باز پخت، ساختار بلوری، و تبخیر در خلأ.

مقدمه

ترکیبهای II-VI به‌ویژه سولفید کادمیوم در ساخت باتریهای خورشیدی، قطعات اپتوالکترونیک، آشکارسازهای نوری، و ترانزیستورهای اثر میدان، مورد استفاده قرار می‌گیرند. لایه‌های نازک سولفید کادمیوم با روش‌های مختلفی نظیر تبخیر در خلأ (VE)، کندوپاش (Sp)، تبخیر شیمیایی (CVD)، حمام شیمیایی (CBD)، تپ لیزری (LA)، و ... تهیه شده‌اند (۱-۱۴). در این مقاله اثر باز پخت در هوا بر ساختار شبکه سولفید کادمیوم بررسی شده است.

روش تهیه

لایه‌های نازک سولفید کادمیوم از دانه‌های آن با درصد خلوص ۹۹/۹۹ در یک قایقک تنگستن در محفظه‌ای با گستره فشار 2.7×10^{-5} - 9×10^{-6} torr و آهنگ تبخیر ۰/۴ nm/s، با استفاده از دستگاه تبخیر در خلأ (دستگاه VAS BUS 78535-France) روی زیرلایه‌های شیشه‌ای تهیه شدند. ضخامت لایه‌ها برابر ۳۰۰ nm بود که در طول زمان تهیه آنها با استفاده از بلور کوارتز اندازه‌گیری شد.

نمونه‌ها در دماهای ۱۰۰ °C، ۲۰۰ °C و ۳۰۰ °C در مجاورت هوا به مدت یک ساعت بازپخت و پس از بازگشت دمای نمونه‌ها به دمای اتاق پس از ۸۰ دقیقه ساختار بلوری لایه‌ها با استفاده از دستگاه XRD (D8 Advance) $\lambda(\text{CuK}\alpha) = 1.54056 \text{ \AA}$ در گسترده زاویه $2\theta = 10^0 - 70^0$ بررسی شدند.

بحث و برداشت

شکل ۱ طیف XRD لایه‌های نازک سولفید کادمیوم بدون بازپخت و بازپخت در دماهای ۱۰۰، ۲۰۰ و ۳۰۰ °C را نشان می‌دهد. لایه‌ها دارای ساختاری شش گوشه با جهت رشد (۰۰۲) بودند که در شکل ۲ قله (۰۰۲) لایه‌ها دیده می‌شود. با توجه به شکل شدت قله (۰۰۲) در اثر بازپخت کاهش یافته است و بیشترین کاهش در دمای ۲۰۰ °C مشاهده شده است. جدول ۱ داده‌های XRD لایه‌ها را نشان می‌دهد. فاصله صفحات (d) از قانون براگ به دست آمد که با داده‌های به دست آمده از مراجع [۲، ۵ تا ۸] سازگارند. از این داده‌ها می‌توان اندازه بلورک با ثابتهای شبکه a، c و حجم یاخته یک‌ه را به دست آورد. برای محاسبه اندازه بلورک D از رابطه دبای-شرر به صورت زیر استفاده شد [۲، ۱۱، ۱۳ تا ۱۵].

$$D = K\lambda/\beta\cos\theta \quad (1)$$

که در آن λ طول موج پرتو x، β پهنای قله در نیم بیشینه (۰۰۲) (FWHM)، θ زاویه

براگ، و $K = 0.9$ مقدار ثابت (مقادیر FWHM لایه‌های نازک سولفید کادمیوم بدون بازپخت و بازپخت در دماهای 100°C ، 200°C و 300°C در جدول ۲ ارائه شده است). رابطه مربوط به فاصله صفحات و حجم یاخته با ثابتهای a و c در ساختار شش گوشه به شکل زیر است [۱۵].

$$\frac{1}{d_{hkl}^2} = \frac{4}{3} \left[\frac{h^2 + hk + k^2}{a^2} \right] + \frac{l^2}{c^2} \quad (2)$$

$$V = \frac{\sqrt{3}}{2} a^2 c \quad (3)$$

بنابراین $c = 2d_{002}$ که مقادیر c برای لایه‌های مختلف در جدول ۳ نشان داده شده‌اند. چنانکه مشاهده می‌شود مقدار c در اثر بازپخت تغییر می‌کند، و بیشترین مقدار آن در دمای 200°C است. مقدار a را می‌توان از رابطه زیر

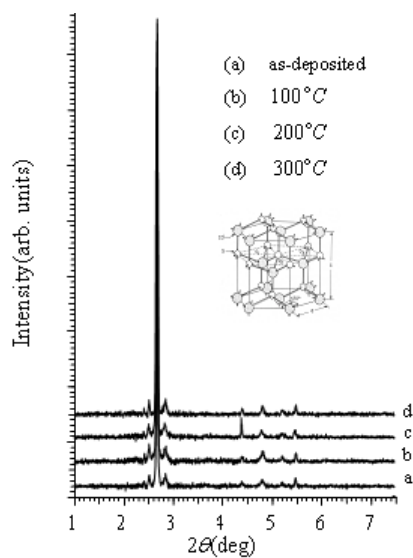
$$a^2 = \frac{4}{3} [h^2 + hk + k^2] d_{hk0}^2 \quad (4)$$

به دست آورد که a بر حسب دمای بازپخت در جدول ۳ آورده شده است و نشان می‌دهد که مقدار آن در اثر بازپخت افزایش می‌یابد، ولی بیشترین مقدار آن در دمای 200°C بوده است. مقادیر a و c به خوبی با کار دیگران در مراجع [۱۰ و ۱۵] سازگاری دارند. نسبت c/a بر حسب دمای بازپخت به صورت نوسانی به مقدار نظری آن نزدیک‌تر است. این پدیده نشان می‌دهد که ساختار شش گوش با افزایش دما کاملتر می‌شود. با دانستن ثابتهای a و c که در جدول ۳ آمده‌اند، می‌توان حجم یاخته را محاسبه کرد. چنانکه دیده می‌شود، حجم یاخته بر حسب دمای بازپخت افزایش می‌یابد که بیشترین افزایش آن در دمای 200°C است.

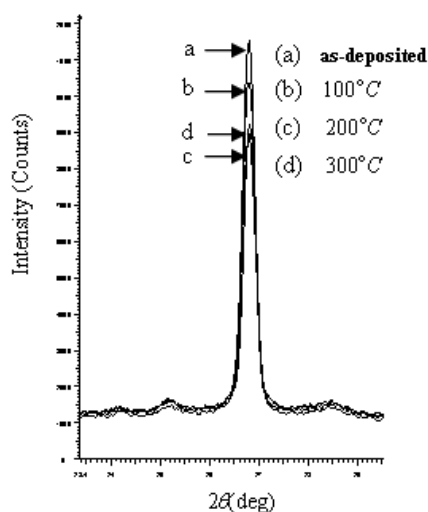
از آنچه در بالا گفته شد می‌توان به این نتیجه رسید که در دمای 200°C بیشترین بی‌نظمی وجود دارد. در این دما a و c بیشترین مقدار را دارند. ولی با افزایش دما بی‌نظمی کاهش می‌یابد به طوری که در دمای 300°C نسبت به 200°C بی‌نظمی کمتر است. لایه بازپخت شده در 300°C در اثر سرد شدن دوباره متبلور می‌شود. درجه تبلور به آهنگ سرد شدن و شیب دمایی لایه بستگی دارد.

نتیجه این که ساختار لایه‌های سولفید کادمیوم تهیه شده به روش تبخیر گرمایی، شش گوشند و جهت رشد آنها (002) است. بیشترین مقدار a و c شبکه و بنابراین بیشترین حجم یاخته یک لایه بازپخت شده در 200°C مشاهده شد. بیشترین پهنای قله در نیم‌بیشینه و بنابراین کمترین اندازه بلورک نیز در لایه بازپخت شده در 200°C مشاهده شد. بنابراین آغاز

بی‌نظمی شدید و اثر محیط (جذب اکسیژن) در دمای 200°C به بالا رخ می‌دهد و لایه‌ها در این دما در یک حالت شبه پایدار متبلور می‌شوند.



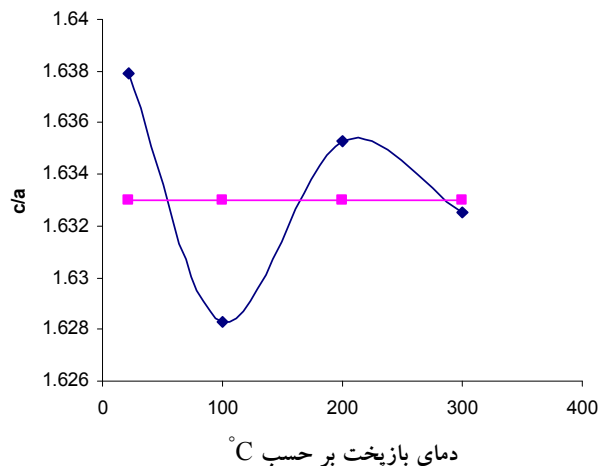
شکل ۱. طیف XRD لایه‌های نازک سولفید کادمیوم بدون بازپخت و بازپخت در دماهای 100°C ، 200°C و 300°C .



شکل ۲. قله (002) لایه‌های نازک سولفید کادمیوم بدون باز پخت و بازپخت در دماهای 100°C ، 200°C و 300°C .

جدول ۱ داده‌های XRD لایه‌های نازک سولفید کادمیوم بدون بازیخت و بازیخت در دماهای ۱۰۰، ۲۰۰ و ۳۰۰ °C.

نمونه	زاویه ($2\theta^\circ$)	d (Angstrom)	شدت (شمارش)	شدت %	(hkl)
بدون بازیخت	۲۰٫۶۸۰	۴٫۲۹۱۶۳	۳۷٫۸	۰٫۴	
	۲۳٫۰۳۵	۳٫۸۵۷۸۶	۶۸٫۰	۰٫۷	
	۲۴٫۱۴۴	۳٫۶۸۳۰۹	۱۲۸	۱٫۳	
	۲۵٫۲۴۰	۳٫۵۲۵۶۶	۲۷۹	۲٫۷	H(۱۰۰)
	۲۶٫۷۷۸	۳٫۳۲۶۴۹	۱۰۲۰۴	۱۰۰٫۰	H(۰۰۲)
	۲۸٫۴۵۶	۳٫۱۳۴۰۴	۳۲۹	۳٫۲	H(۱۰۱)
	۳۲٫۷۲۰	۲٫۷۳۴۷۴	۴۸٫۰	۰٫۵	
	۳۶٫۵۴۹	۲٫۴۵۶۵۶	۳۸٫۸	۰٫۴	H(۱۰۲)
	۴۴٫۰۷۲	۲٫۰۵۳۰۸	۹۱٫۰	۰٫۹	H(۱۱۰)
	۴۸٫۲۰۰	۱٫۸۸۶۴۸	۱۶۰	۱٫۶	H(۱۰۳)
	۵۲٫۲۰۴	۱٫۷۵۰۸۰	۶۰٫۹	۰٫۶	H(۱۱۲)
	۵۴٫۹۰۶	۱٫۶۷۰۸۵	۱۹۹	۱٫۹	H(۰۰۴)
	۵۶٫۷۷۸	۱٫۶۲۰۱۴	۳۳٫۵	۰٫۳	
بازیخت در ۱۰۰ °C	۲۱٫۱۱۲	۴٫۲۰۴۸۰	۴۵٫۸	۰٫۶	
	۲۲٫۶۲۴	۳٫۹۲۷۰۴	۸۰٫۶	۱٫۰	
	۲۴٫۲۴۰	۳٫۶۶۸۸۰	۱۶۳	۲٫۰	
	۲۵٫۱۹۴	۳٫۵۳۱۹۹	۳۴۳	۴٫۳	H(۱۰۰)
	۲۶٫۸۲۹	۳٫۳۲۰۳۴	۷۹۳۴	۱۰۰٫۰	H(۰۰۲)
	۲۸٫۵۰۳	۳٫۱۲۸۹۸	۲۳۹	۳٫۰	H(۱۰۱)
	۳۲٫۱۶۶	۲٫۷۸۰۶۰	۵۲٫۵	۰٫۷	
	۳۷٫۳۱۱	۲٫۴۰۸۱۰	۳۵٫۰	۰٫۴	
	۴۴٫۰۸۰	۲٫۰۵۲۷۴	۱۰۶	۱٫۳	H(۱۱۰)
	۴۸٫۲۳۵	۱٫۸۸۵۱۹	۲۱۳	۲٫۷	H(۱۰۳)
	۵۲٫۲۷۱	۱٫۷۴۸۷۱	۱۱۰	۱٫۴	H(۱۱۲)
	۵۴٫۹۹۴	۱٫۶۶۸۳۸	۱۷۷	۲٫۲	H(۰۰۴)
	۵۶٫۶۸۰	۱٫۶۲۲۷۰	۳۹٫۱	۰٫۵	
بازیخت در ۲۰۰ °C	۲۲٫۵۸۸	۳٫۹۳۳۲۵	۴۱٫۱	۰٫۵	
	۲۴٫۱۳۳	۳٫۶۸۴۸۵	۱۳۲	۱٫۷	
	۲۵٫۱۸۶	۳٫۵۳۳۰۶	۲۹۴	۳٫۸	H(۱۰۰)
	۲۶٫۷۷۴	۳٫۳۲۷۰۵	۷۸۲۹	۱۰۰٫۰	H(۰۰۲)
	۲۸٫۴۵۳	۳٫۱۳۴۴۱	۳۱۷	۴٫۰	H(۱۰۱)
	۴۴٫۰۰۸	۲٫۰۵۵۹۲	۴۱۸	۵٫۳	H(۱۱۰)
	۴۸٫۱۲۶	۱٫۸۸۹۲۱	۱۵۶	۲٫۰	H(۱۰۳)
	۵۲٫۲۱۶	۱٫۷۵۰۴۲	۸۳٫۷	۱٫۱	H(۱۱۲)
	۵۴٫۸۶۰	۱٫۶۷۲۱۴	۱۶۶	۲٫۱	H(۰۰۴)
بازیخت در ۳۰۰ °C	۲۴٫۱۶۰	۳٫۶۸۰۷۶	۱۵۳	۱٫۷	
	۲۵٫۱۹۵	۳٫۵۳۱۹۰	۳۵۲	۳٫۹	H(۱۰۰)
	۲۶٫۸۲۱	۳٫۳۲۱۳۰	۹۰۷۳	۱۰۰٫۰	H(۰۰۲)
	۲۸٫۵۱۲	۳٫۱۲۸۱۰	۳۸۱	۴٫۲	H(۱۰۱)
	۴۴٫۰۷۸	۲٫۰۵۲۸۲	۱۵۱	۱٫۷	H(۱۱۰)
	۴۸٫۲۳۱	۱٫۸۸۵۳۳	۱۹۳	۲٫۱	H(۱۰۳)
	۵۲٫۲۰۷	۱٫۷۵۰۷۲	۱۱۵	۱٫۳	H(۱۱۲)
	۵۴٫۹۹۶	۱٫۶۶۸۳۵	۲۲۶	۲٫۵	H(۰۰۴)



شکل ۳ تغییرات c/a لایه‌های نازک سولفید کادمیوم بدون بازپخت و بازپخت در دماهای ۱۰۰، ۲۰۰ و ۳۰۰ °C بر حسب دمای بازپخت (خط مستقیم مقدار نظری c/a است).

جدول ۲ مقادیر FWHM لایه‌های نازک سولفید کادمیوم بدون بازپخت و بازپخت در دماهای ۱۰۰، ۲۰۰ و ۳۰۰ °C.

نمونه	بدون بازپخت	بازپخت در ۱۰۰ °C	بازپخت در ۲۰۰ °C	بازپخت در ۳۰۰ °C
FWHM ...2θ(0)	۰/۲۸۰	۰/۲۸۹	۰/۳۱۸	۰/۲۸۸

جدول ۳ مقادیر c ، a ، v و D لایه‌های نازک سولفید کادمیوم بدون بازپخت و بازپخت در دماهای ۱۰۰، ۲۰۰ و ۳۰۰ °C.

نمونه	بدون بازپخت	بازپخت در ۱۰۰ °C	بازپخت در ۲۰۰ °C	بازپخت در ۳۰۰ °C
c (Å)	۶۶۶۸۱	۶۶۴۰۶	۶۶۷۱۳	۶۶۵۸
a (Å)	۴۰۷۱۰	۴۰۷۸۳	۴۰۷۹۶	۴۰۷۸۲
V (Å ²)	۹۵۷۱۰۱	۹۵۶۵۷۹	۹۶۱۵۷۶	۹۵۹۰۲۵
D (nm)	۳۱/۴۳۲	۳۰/۱۴۳	۲۷/۳۹۳	۳۰/۲۴۶

مراجع

- [1] Senthil K., Mangalaraj D., Narayandass Sa. K., "Structural and properties of CdS thin films", Applied Surface Science 169-170 (2001) 476-479.
- [2] He Z., Zhao G., Weng W., Du P., Han G., "The difference between the transverse and in-plane resistivity of vacuum evaporated cadmium sulfide (CdS) thin films", Vacuum 79 (2005) 14-18

- [3] Lozada-Morales R., Zelaya-Angel O., Torres-Delgado G., "On the yellow-band emission in CdS films", Appl. Phys. A 73 (2001) 61-65
- [4] Lee J., Yi J., Yang K., Magalaraj D., "Argon implantation effects on the structural and the optical properties of vacuum evaporated CdS thin films", Journal of the Korean physical society, Vol. 40 N. 5 (2002) 877-882
- [5] Kashiwaba Y., Komatsu T., Nishikawa M., Ishikawa Y., Segawa K., Haysi Y., "X-Ray diffraction studies of p-CdS: Cu thin films", Thin Solid Films 408 (2002) 43-50
- [6] Bacaksiz E., Novruzov V., Karal H., Yanmaz E., Altunbas M., I. Kopya A., "Light-assisted deposition of CdS thin films", J. Phys. D: Appl. Phys. 34 (2001) 3109-3112
- [7] Senthil K., Mangalaraj D., Narayandass Sa. K., Kesavanmoorthy R., Reddy G. L. N., Sundaravel B., "Investigation on nitrogen ion implantation effects in vacuum evaporated CdS thin films using raman scattering and X ray diffraction studies", physica B 304 (2002) 175-180
- [8] Dzhaferov T. D., Altunbas M., Kopya A. I., Novruzov V. and Bacaksiz E., "Formation of p-type CdS thin films by laser-stimulated copper diffusion", J. Phys. D: Appl. Phys. 32 (1999) L125-L125
- [9] Cha D., Kim S., Huang N. K., "Study on electrical properties of CdS films prepared by chemical pyrolysis deposition", Materials Science and Engineering B 106 (2004) 63-68
- [10] Castillo S. J., Mendoza-Galvan A., Ramirez-Bon R., Espinoza-Beltran F. J., "Structural, optical and electrical characterization of In/CdS/glass thermally annealed system", Thin Solid Films 373 (2000) 10-14
- [11] Oladeji I. O., Chow L., Liu J. R., Chu w. K., Bustamante A. N. P., Fredricksen C., Schulte A. F., "Comparative study of CdS thin films deposited by single, continuous, and multiple dip chemical processes", Thin Solid Films 356 (2000) 154-159
- [12] George P. J., Sanchez-Juarez A. and Nair P. K., "Modification of electrical, optical and crystalline properties of chemically deposited CdS films by thermal diffusion of indium and tin", Semicond. Sci. Technol. 11 (1996) 1090-1095
- [13] Mahmoud S. A., Ibrahim A. A., Riad A. S., "Physical properties of thermal coating CdS thin films using a modified evaporation source", Thin Solid Films 372 (2000) 144-148
- [14] Vigil O., Zelaya-Angel O., Rodriguez Y., "Changes of the structural and optical properties of cubic CdS films on annealing in H₂ and air atmospheres", Semicond. Sci. Technol. 15 (2000) 259-262
- [۱۵] آشوری. حسین، "بلورشناسی - مطالعه بلورها و کاربرد اشعه ایکس در بلور شناسی"، انتشارات جهاد دانشگاهی واحد دانشگاه صنعتی اصفهان، ۱۳۷۹.