

تركيب Fe_2O_3 -CdTe كاسلاك محورية نانوية

امينة محسن عباس

جمال مال الله رزيق

سمير عبيد نواف

تركيب Fe_2O_3 -CdTe كاسلاك محورية نانوية

سمير عبيد نواف - جمال مال الله رزيق / جامعة الانبار - كلية العلوم - قسم الفيزياء
امينة محسن عباس / جامعة النهرين - كلية العلوم - قسم الكيمياء

الملخص

في هذا البحث، دراسة نظرية لتأثير لف قشرة (Shell) من مركب الكاديوم تيلورايد (CdTe)، CT_{Sh} ، على بعض الخواص البصرية لقلب (Core) من مركب أكسيد الحديد (Fe_2O_3)، F_{Co} ، كاسلاك محورية نانوية باستخدام تقريب استطارة ماي-لورنتز (Mie-Lorentz Scattering). أظهرت الدراسة ان الاسلاك النانوية للقلب الحديدي تمتلك نفاذية عالية جدا في منطقة الطيف المرئي، اكثر من 95%. امتصاصية ومعامل امتصاص واطئة في منطقة طيف الاشعة تحت الحمراء مع ظهور حافتي امتصاص عند لف القلب الحديدي بقشرة CT_{Sh} . انتقالات الكترونية من النوع المباشر المسموح اظهرتها الاسلاك المحورية النانوية وتناقص فجوة الطاقة بعد لف القشرة حول F_{Co} مع فجوتين للطاقة بقيمة $2.2 eV$ و $1.7 eV$.

المقدمة

تعرف الأسلاك النانوية على أنها بنية متناهية الصغر بقطر يقترب من النانومتر الواحد [1]. كما أنها يمكن ان تعرف أيضاً بالتركيب الذي يحتوي على سمك عشرات النانومترات وبطول غير مقيد. تطورت دراسة أسلاك أشباه الموصلات بسرعة خلال السنوات القليلة الماضية حيث تم استخدام أنواع مختلفة من الأسلاك النانوية في التطبيقات العلمية الحديثة. في العقود الأخيرة ظهرت تطبيقات متقدمة للأسلاك النانوية نتيجة لخواصها الاستثنائية مثل انخفاض التفاعل والقدرة على التحمل [2]. تُعد الأسلاك النانوية موضوعاً بحثياً رئيسياً في مجال تقنية النانو

تركيب Fe_2O_3 -CdTe كاسلاك محورية نانوية

امينة محسن عباس

جمال مال الله رزيح

سمير عبيد نواف

نظرًا لخصائصها الفيزيائية الفريدة والتطبيقات المحتملة في الأجهزة كأجهزة الاستشعار النانوية الضوئية [3-6]. لدراسة التطبيقات الضوئية للأسلاك النانوية، تم حساب الخواص البصرية لكل من Fe_2O_3 لب CdTe قشرة. في هذا العمل يتم افتراض بنية أساسية هيكلية قائمة على أسلاك متناهية الصغر للجمع بين مزايا مواد Fe_2O_3 و CdTe وبالتالي تحسين أداء النموذج. تلعب الخصائص البصرية دورًا مهمًا في دراسة تركيب مواد أشباه الموصلات [7]. الخصائص البصرية التي تم بحثها في هذه الدراسة هي طيف الامتصاص البصري، طيف النفاذية الضوئية، معامل الامتصاص، فجوة الطاقة البصرية.

الجزء النظري:

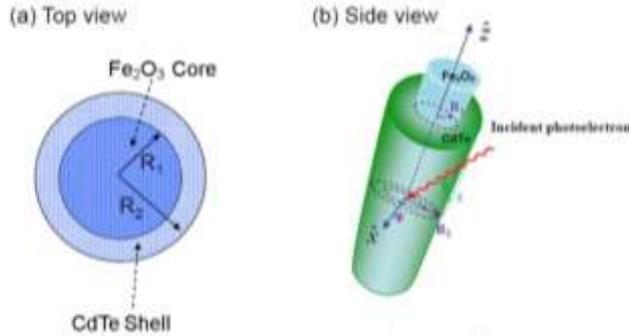
في هذه الدراسة، تمت دراسة الخواص البصرية للأسلاك النانوية المحورية في إطار نظرية تشتت مي Mie Scattering theory التي تطورت لتقييم الأسطوانات الدائرية ذات الأشكال الأساسية حيث يتيح هذا التشكيل حساب كفاءة الامتصاص للطبقات المنفردة. استخدم لحساب امتصاص الضوء الغير المستقطب لألواح الأسلاك النانوية برنامج المحاكاة " Optical Properties of Single Coaxial Nanowires". يتم تقييم الاسلاك النانوية متحدة المحور كأسطوانات طويلة بلا حدود على طول المحور Z مضاءة بواسطة موجة كهرومغناطيسية مستوية مع متجه انتشار الموجة الساقطة (\vec{k}) ، كما هو مبين في الشكل (1) .

تركيب Fe_2O_3 -CdTe كاسلاك محورية نانوية

امينة محسن عباس

جمال مال الله رزيق

سمير عبيد نواف



شكل (1) مخطط توضيحي لتركيب الاسلاك النانوية [8].

كفاءة الامتصاص Q_{abs} هي نسبة المقطع العرضي للامتصاص الى المقطع العرضي الهندسي لسلك واحد ، وتعطى بالعلاقة الاتية:

$$Q_{abs} = C_{abs}/C_{geom} \quad (1)$$

حيث C_{geom} و C_{abs} هما المقاطع العرضية للامتصاص والمقاطع العرضية الهندسية على التوالي.

$$C_{abs} = C_{ext} - C_{scat} \quad (2)$$

حيث C_{ext} هو المقطع العرضي للخمود و C_{scat} هو المقطع العرضي للاستطارة. في حالة وجود ضوء غير مستقطب مثل ضوء الشمس ، يمكننا تمثيل المقطع العرضي للامتصاص C_{abs} بالعلاقة الاتية:

$$C_{abs} = (C_{ext}^{TE} + C_{ext}^{TM})/2 - (C_{scat}^{TE} + C_{scat}^{TM})/2 \quad (3)$$

من أجل حساب معاملات Mie للنظام نقوم بالخطوات الاتية:

تركيب Fe_2O_3 -CdTe كاسلاك محورية نانوية

امينة محسن عباس

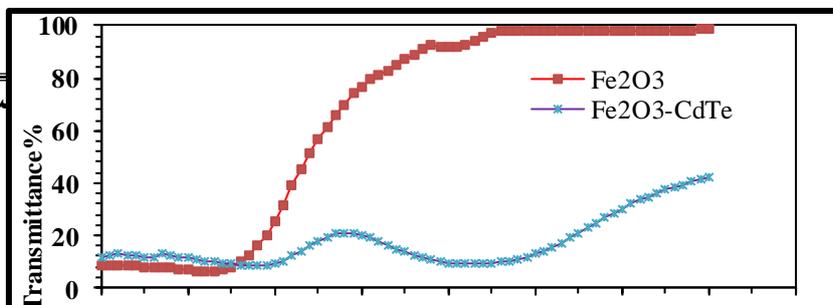
جمال مال الله رزيق

سمير عبيد نواف

- تحديد حلول معادلة الموجه ثنائية الاتجاه في المناطق المكانية المختلفة للتعبير عن المجالات الكهرومغناطيسية.
- استبدال المجال المغناطيسي بالمجال الكهربائي في معادلات ماكسويل.
- يمكن كتابة هذه الحلول على شكل دالة Bessel ، التي تم حساب معاملاتها من خلال حل الشروط الحدودية.
- تطبيق الشروط الحدود للاستمرارية في حالة التداخل.
- عرض النتائج على شكل مصفوفة.
- حساب معاملات Mie مجهولة الهوية.

النفاذية البصرية

طيف النفاذية البصرية يرتبط بصورة مباشرة مع سمك المادة وتركيبها البلوري إضافة الى قابليتها على الاشعاع الساقط عليها والتوزيع السطحي لذراتها وبالتالي الخواص العامة لهذه المادة. الشكل (2) يوضح طيف النفاذية كدالة للطول الموجي لقلب (Core) من أكسيد الحديد (Fe_2O_3) (F_{Co}) قطره 20 nm قبل وبعد لفه بقشرة (Shell) سمكها 50 nm من تيلوريد الكاديوم (CdTe) (CT_{Sh}) كاسلاك محورية نانوية (Coaxial NWs). أظهر النموذج المدروس طيفا منخفضا للنفاذية ضمن منطقة الطول الموجي الواسع (300-450 nm) اتبعها زيادة سريعة ومفاجئة للطيف ضمن منطقة الطيف المرئي، وهي ناجمة عن الانتقالات الالكترونية في حزم الطاقة ضمن منطقة الامتصاص البصري [9] [10]، ثم استقرار نسبي لتصل اعلی قيمة لها (98.4 %) بعد الطول الموجي (760 nm)، وهي نتيجة مقارنة لما توصل اليها الباحث Elttayef Abdulhussein K. وجماعته [11] والتي قد تعزى الى نقصان ملحوظ لتأثير الاستطارة [12].



تركيب Fe_2O_3 -CdTe كاسلاك محورية نانوية

امينة محسن عباس

جمال مال الله رزيح

سمير عبيد نواف

الشكل (2) : طيف النفاذية البصرية كدالة للطول الموجي

بصورة عامة، يوجد انخفاضا ملموسا في قيم النفاذية عند وجود CT_{Sh} كقشرة مع القلب F_{Co} ، الذي قد يعود الى زيادة خشونة سطح السلك النانوي وبالتالي زيادة الاستطارة بسبب زيادة سمك الاسلاك النانوية عند وجود القشرة مع القلب . كما وجد سلوكا طيفيا" متشابها ضمن المنطقة المحصورة بين 300 الى 450 nm والتي اظهرها النموذج المدروس عند لف القلب بقشرة CT_{Sh} يعقب ذلك زيادة قيم النفاذية تدريجيا لتصنع قمة عند الطول الموجي 565 nm ثم هبوط تدريجي لتصل الى اقل قيمة (9%) عند 730 nm ثم ارتفاع اسي حتى اعلى قيمة (42%) عند نهاية المدى الطيفي قيد الدراسة. هذا التباين في قيم النفاذية يعزى الى اختلاف امتصاصية الاسلاك النانوية للطيف الكهرومغناطيسي ضمن الاطوال الموجية المحددة. أخيرا زحف في حافة الامتصاص البصري باتجاه الاطوال الموجية الطولية (Red Shift) الذي يشير الى ان قيم فجوة الطاقة البصرية سوف تتناقص بوجود قشرة CT_{Sh} .

معامل الامتصاص

تعتبر دراسة خواص معامل الامتصاص البصري من المعلمات المهمة التي توضح بعض خواص المواد شبه الموصلة إضافة الى دراسة سلوك الانتقالات الإلكترونية بين حزم الطاقة، إذ انه يمثل نسبة الفوتونات التي ستقوم بامتصاصها المادة بالنسبة الى وحدة المسافة ويعتمد بشكل كبير على طاقة تلك الفوتونات الساقطة.

تغير معامل الامتصاص (α) كدالة للطول الموجي لأسلاك نانوية من أكسيد الحديد يظهرها الشكل (3) وذلك من رسم العلاقة بين قيم معامل الامتصاص والطول الموجي قيد الدراسة باستخدام العلاقة التالية [13]:

$$\alpha = 2.303 \frac{A}{t} \dots \dots \dots (4)$$

حيث ان A الامتصاصية و t سمك السلك النانوي.

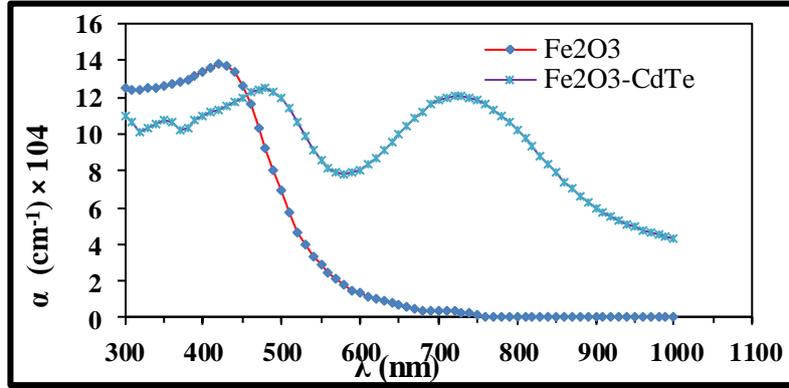
يوضح الشكل (3) تناقص تدريجي في قيم معامل الامتصاص باتجاه الاطوال الموجية العالية وانها ذات قيم اكبر من 10^4 cm^{-1} الذي يشير الى ان فجوة الطاقة البصرية هي من النوع المباشر، أي ان قيمة (n) في المعادلة رقم (4) ستكون مساوية الى (1/2). أظهرت النتائج ان اعلى قيمة لمعامل الامتصاص كانت ضمن منطقة الطيف المرئي ثم بعدها تناقصت قيم (α) تدريجياً لتصل الى ادنى قيم لها ضمن منطقة الاشعة تحت الحمراء. ان الاستقرار النسبي لقيم (α) ضمن منطقة الطيف المحصورة بين (700-1000 nm) يعزى الى الاستقرار النسبي في قيم النفاذية ضمن تلك المنطقة الذي يعود أيضاً الى ان الانتقالات الإلكترونية ضمن تلك المنطقة كانت قليلة جداً ثم تبدأ بالازدياد عند الوصول الى حافة الامتصاص البصري.

تركيب Fe_2O_3 -CdTe كاسلاك محورية نانوية

امينة محسن عباس

جمال مال الله رزيق

سمير عبید نواف



الشكل (3) : تغير معامل الامتصاص مع الطول الموجي للأشعة الساقطة.

بالعودة الى الشكل (3) يتضح زحف في حافة الامتصاص البصري باتجاه الاطوال الموجية الحمراء مع وجود قمتين لقيم (α) ، عند لف قلب أوكسيد الحديد بقشرة CT_{Sh} ، وذلك بسبب وجود حافتي امتصاص ضمن منطقتي الطيف المحددتين. بصورة عامة، فان قيم معامل الامتصاص بعد لف القلب بالقشرة فان السلك النانوي امتلك قيم اعلى لمعامل الامتصاص اذا ما قورن بتلك القيم للقلب قبل لفه بقشرة CT_{Sh} ، وقد يعود السبب في ذلك الى ان وجود القشرة أدى الى خلق مستويات مانحة بالقرب من حزمة التوصيل ضمن منطقة فجوة الطاقة التي ستقوم بامتصاص طاقة الفوتونات ذات القيم الواطئة وبالتالي زيادة في قيم معامل الامتصاص [14].

فجوة الطاقة البصرية

تم حساب فجوة الطاقة البصرية اعتمادا على صيغة تاوس (Tauc formula) التي تعطى بالشكل التالي [15]:

$$\alpha = \frac{B(h\nu - E_g)^n}{h\nu} \dots \dots \dots (5)$$

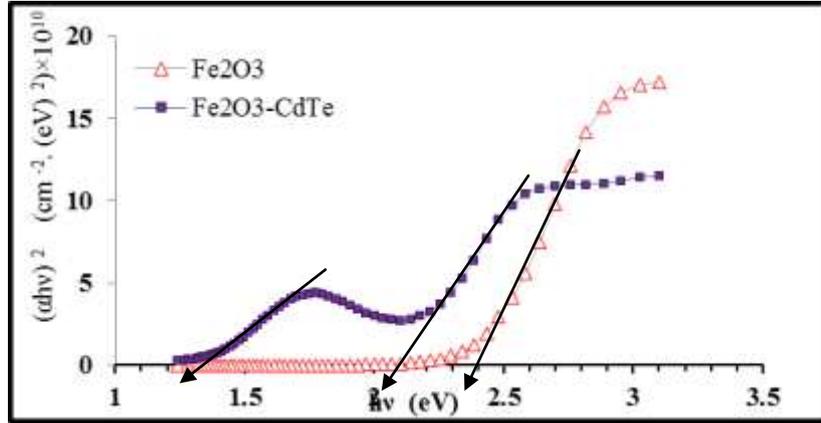
وباستخدام الامتصاصية المحسوبة من قبل البرنامج المستخدم والمذكور في الجزء النظري حيث ان α تمثل معامل الامتصاص و B ثابت على نوع المادة و $h\nu$ هي طاقة الفوتون الساقط بينما E_g تمثل فجوة الطاقة البصرية وان n يمثل ثابتا تعتمد قيمته على طبيعة الانتقال الإلكتروني بين حزمتي الطاقة كونه مباشرا مسموحا، مباشرا ممنوعا، غير مباشر مسموح او غير مباشر ممنوع وتكون قيمه كالتالي $1/2$ ، $3/2$ ، 2 او 3 وعلى الترتيب [16]. تم حساب قيم فجوة الطاقة البصرية من رسم العلاقة بين $(ah\nu)^{\frac{1}{n}}$ كدالة لطاقة الفوتون الساقط ($h\nu$) ومن رسم المماس للجزء المستقيم من المنحني وتقاطعته مع محور ($h\nu$)، أي عند ($ah\nu = 0$) ، فانه يمثل قيم فجوة الطاقة البصرية للمادة، كما موضح في الشكل (4). اشارت بعض التقارير الى ان مركب أكسيد الحديد يمتلك فجوة طاقة بصرية من النوع المباشر المسموح [11] [17] بينما أشار الباحث [18] الى امتلاك Fe_2O_3 فجوة طاقة بصرية من النوع غير المباشر، اما الباحث [19] فقد توصل الى امتلاك أكسيد الحديد الى كلا النوعين، مباشرة وغير مباشرة. كما هو موضح في الشكل (4) فان النموذج F_{Co} يمتلك فجوة طاقة بصرية من النوع المباشر مساوية الى 2.4 eV، وهي نتيجة مقارنة جدا لما توصل اليها الباحث [13].

تركيب Fe_2O_3 -CdTe كاسلاك محورية نانوية

امينة محسن عباس

جمال مال الله رزيق

سمير عبيد نواف



الشكل (4) : $(\alpha hv)^2$ كدالة لطاقة الفوتون الساقط

بصورة عامة، عند زيادة سمك السلك النانوي من خلال لفه بقشرة CT_{Sh} لوحظ تناقص قيمة فجوة الطاقة البصرية، وقد يعود السبب في ذلك الى إزالة بعض المستويات الموضعية في منطقة فجوة الطاقة البصرية وبالتالي نقصان قيمتها، رافق ذلك ظهور قيمتين لفجوة الطاقة البصرية 2.2 eV و 1.7 eV ، وهو متوقع مسبقا بسبب وجود حافتين للامتصاص عند 565 nm و 730 nm وعلى الترتيب. هناك عدة ميكانيكيات وضعت في تفسير التغير (زيادة او نقصان) في قيم فجوة الطاقة البصرية، منها بسبب التغير في الحصر الكمي، تغييرات في ارتفاع حاجز الجهد الناجم عن التغير الحاصل في الابعاد البلورية، اختلاف في نسب الشوائب المضافة التي ينجم عنها اجهادات الضغط او الشد للسطح البلوري وايضا تحسن او تشوه في بنية البلورة [20].

تركيب Fe_2O_3 -CdTe كاسلاك محورية نانوية

امينة محسن عباس

جمال مال الله رزيح

سمير عبيد نواف

الاستنتاجات

تمت دراسة الخواص البصرية لتركيبية الاسلاك النانوية Fe_2O_3 -CdTe الأساسية بواسطة المحاكاة النظرية باستخدام نظرية Mie Scattering. وقد تبين أن تركيب Fe_2O_3 -CdTe يؤدي الى زيادة في قيم كل من طيف الامتصاص البصري ومعامل الامتصاص بينما كان هناك انخفاض بقيم النفاذية. زيادة سمك السلك النانوي الناجم عن إضافة قشرة CdTe أدى الى انخفاض قيمة فجوة الطاقة. ن خلال دراسة الخصائص البصرية التي نوقشت في اسلاك Fe_2O_3 -CdTe النانوية تبين أن الأسلاك النانوية يمكنها أن تلعب دورًا مهمًا للغاية في مجال تصنيع الأجهزة الإلكترونية البصرية.

المصادر

- [1] L. J. Lauhon, M. S. Gudiksen, D. Wang, and C. M. Lieber, "Epitaxial core-shell and core-multishell nanowire heterostructures," Nature, vol. 420, no. 6911, p. 57, 2002.
- [2] S. Ju et al., "Proton radiation hardness of single-nanowire transistors using robust organic gate nanodielectrics," Appl. Phys. Lett., vol. 89, no. 7, p. 73510, 2006.
- [3] U. Cvelbar, Z. Chen, M. K. Sunkara, and M. Mozetič, "Spontaneous Growth of Superstructure α - Fe_2O_3 Nanowire and Nanobelt Arrays in Reactive Oxygen Plasma," Small, vol. 4, no. 10, pp. 1610–1614, 2008.
- [4] O. Lupan et al., "Localized synthesis of iron oxide nanowires and fabrication of high performance nanosensors based on a single Fe_2O_3 nanowire," Small, vol. 13, no. 16, p. 1602868, 2017.
- [5] Y. Fu, J. Chen, and H. Zhang, "Synthesis of Fe_2O_3 nanowires by oxidation of iron," Chem. Phys. Lett., vol.

- 350, no. 5–6, pp. 491–494, 2001.
- [6] Q. Yang, K. Tang, C. Wang, Y. Qian, and S. Zhang, “PVA-assisted synthesis and characterization of CdSe and CdTe nanowires,” *J. Phys. Chem. B*, vol. 106, no. 36, pp. 9227–9230, 2002.
- [7] P. Yang et al., “Controlled growth of ZnO nanowires and their optical properties,” *Adv. Funct. Mater.*, vol. 12, no. 5, pp. 323–331, 2002.
- [8] S. Y. Wu, “Self-Assembly of Copper Oxide Core-Shell Nanowires Through Ethyl Alcohol,” in *Nanowires-Recent Advances*, IntechOpen, 2012.
- [9] H. I. Abdulah, A. M. Farhan, and A. J. Ali, “Photosynthesis of nanosized $\alpha - Fe_2 O_3$,” *J. Chem. Pharm. Res.*, vol. 7, no. 6, pp. 588–591, 2015.
- [10] Jamal M. Rzaij, “Characterization of CuO thin films for gas sensing applications,” *Iraqi J. Phys.*, vol. 14, no. 31, pp. 1–12, 2016.
- [11] P. A. K. Elttayef, A. Prof, M. H. Jaduaa, and M. A. Muhammed, “Study the structural and optical properties of Fe_2O_3 thin films prepared by RF magnetron,” *Int. J. Appl. or Innov. Eng. Manag.*, vol. 4, no. September, pp. 99–105, 2015.
- [12] B. A. Hasan, Jamal M. Rzaij, and I. M. Ali, “Sensing Properties of $(In_2O_3:Eu)$ Thin Films,” *Aust. J. Basic Appl. Sci.*, vol. 10, no. 8, pp. 143–150, 2016.
- [13] Bushra K.H.Al-Maiyaly, “The Effect of Thickness on Electrical Conductivity and Optical Constant of Fe_2O_3 Thin Films,” *Ibn Al-Haitham Jour. Pure Appl. Sci*, vol. 27, no. 3, pp. 237–246, 2014.
- [14] Jubair A. Najeem and Jamal M. Rzaij, “Study the Effect of Thickness on Structural and Optical Properties of ZnO

-
-
- Thin Films Doped with 7% Cadimium Prepared by Chemical Spray Pyrolysis Method,” J. Univ. Anbar Pure Sci., vol. 6, no. 3, pp. 138–145, 2012.
- [15] N. F. Mott and Edward Arthur Davis, Electronic processes in non-crystalline materials. Oxford: Clarendon Pr., 1979.
- [16] D. Depla and S. Mahieu, Reactive sputter deposition. Berlin: Springer, 2008.
- [17] A. Tanushevski and D. Sokolovski, “Structural and optical properties of CdTe thin films obtained by electrodeposition,” RAD Conf. Proc., vol. 2, pp. 149–154, 2017.
- [18] G. Zotti, G. Schiavon, S. Zecchin, and U. Casellato, “Electrodeposition of Amorphous Fe_2O_3 Films by Reduction of Iron Perchlorate in Acetonitrile,” JOURNAL-Electrochem. Soc., vol. 145, no. 2, pp. 385–388, 1998.
- [19] M. F. Al-Kuhaili, M. Saleem, and S.M.A. Durrani, “Optical properties of iron oxide (α - Fe_2O_3) thin films deposited by the reactive evaporation of iron,” J. Alloys Compd., vol. 521, pp. 178–182, 2012.
- [20] R. Mariappan, V. Ponnuswamy, P. Suresh, N. Ashok, P. Jayamurugan, and A. Chandra Bose, “Influence of film thickness on the properties of sprayed ZnO thin films for gas sensor applications,” Superlattices Microstruct., vol. 71, pp. 238–249, 2014.

تركيب Fe_2O_3 -CdTe كاسلاك محورية نانوية

امينة محسن عباس

جمال مال الله رزيق

سمير عبید نواف

Fe_2O_3 -CdTe Synthesis as coaxial Nanowires

Samir O. Nawaf¹, Jamal M. Rzaij¹, Amina M. Abass²

Department of Physics, University of Anbar, Ramadi, Iraq

Department of Chemistry, University of AL- Nahrain, Baghdad, Iraq

Abstract:

In this paper, a theoretical study of the effect of the shell of cadmium telluride (CdTe), CT_{Sh} , On some of the optical properties of the Fe_2O_3 , F_{Co} core, as nanotubes, using the May-Mie-Lorentz Scattering. The study showed that the nanotubes of the iron heart have very high permeability in the visible spectrum, more than 95%. Absorption and low absorption factor in the IR spectrum with the appearance of two absorption thresholds at the CT_{Sh} . Electronic transitions of the direct type allowed by the nanocouple wire and decreasing the energy gap after winding the crust around the F_{Co} . With two energy gaps of 2.2 eV and 1.7 eV.