وزارة التعليم العالي
جامعة البعث
كلية العلوم

دراسة الخصائص البنيوية و البصرية لأفلام رقيقة من Y_2O_3

دراسة أعدت لنيل درجة الماجستير
في فيزياء المادة الكثيفة

للطالب

حيدر محمد ملحم

بإشراف

الأستاذ الدكتور رياض العبد الله **الأستاذ الدكتور أيمن كسيبي**

1432هـ **2011 م**

Ministry of Higher Education
Al-Baath University
Faculty of Science

Investigation Of Structural And Optical Properties Of Y_2O_3 Thin Films

A thesis Submitted
For The Degree Of Master

By

Haider Mohmmed Mlhm

Supervised by:

Prof. Reiad Al-Abdellah & Prof. Ayman Ksibe

1432 A.H. **2011 A.D.**

ملخص البحث :

أجريت أبحاث عديدة في السنوات الأخيرة حول استخدام أكاسيد المعادن ذات ثابت العازلية الكهربائية المرتفع ، و الذي يجب أن يحقق و بقوة الاحتياجات الملحة من كمون انهيار مرتفع و تيار تسرب منخفض و استقرار حراري مرتفع ، و التي بدأت تحقق نجاحات تطبيقية في وقتنا الحالي حيث يمكن لبعضها أن يكون بديلاً عن SiO_2 .

تمت دراسة خصائص الأفلام الرقيقة لأحد الأكاسيد الترابية النادرة من خلال دراسة أفلام أكسيد اليتريوم Y_2O_3 الرقيقة .

قمنا بترسيب أفلام رقيقة من Y_2O_3 النقي بطريقة التبخير بالحزمة الالكترونية (electron-beam) في الخلاء تحت الضغط ($\sim 10^{-6}$mbar) عند درجة حرارة الغرفة بمنظومة تخلية نموذج (Edwards-Auto 306) على ركائز من الكوارتز الصنعي و ركائز سيلكونية .

أشارت الدراسة البنيوية للأفلام المرسبة باستخدام (XRD) إلى الحقائق التالية :

تترسب الأفلام الرقيقة من Y_2O_3 على ركائز من الكوارتز الصنعي في درجة حرارة الغرفة على شكل طبقة رقيقة لا متبلورة (Amorphous) و هو موضح في الشكل (4-1-a) . كما لاحظنا أن أفلام Y_2O_3 الملدنة عند الدرجة $(500)\,^{\circ}C$ تحتفظ بطورها اللامتبلور و الموضح في الشكل (4-1-b) ، و تبقى هذه الأفلام بطورها اللامتبلور حتى درجات الحرارة ما قبل الدرجة $(900)\,^{\circ}C$ حيث لا تظهر أي قمم تشير إلى وجود بنية بلورية ، و يكون بدء التبلور للأفلام الملدنة عند الدرجة $(900)\,^{\circ}C$ و الموضح في الشكل (4-1-c) ، كما لاحظنا ارتفاع الشدات النسبية للقمم عند الدرجة $(1000)\,^{\circ}C$ و الذي يدل على زيادة نمو البلورات كما في الشكل (4-1-d) ، علماً أن مدة التلدين كانت(10) دقائق .

كما رسبت الأفلام الرقيقة من Y_2O_3 على ركائز من السيلكون $Si\,(111)$ في درجة حرارة الغرفة مع ظهور بوادر بنية بلورية مكعبة نوع (C-type) و تأخذ التوجه (222) مع ظهور بوادر للتوجه (440) كما هو موضح في الشكل (4-3-a) ، و تتحسن البنية البلورية بزيادة درجة حرارة التسخين حيث تزداد شدة القمم ، و أفضل تبلور للأفلام الرقيقة من Y_2O_3 كان على ركائز من السيلكون $Si\,(111)$ عند التسخين للدرجة $(900)\,^{\circ}C$ و لمدة (10) دقائق كما هو موضح في الشكل (4-3) .

أشارت الدراسة الضوئية لأفلام Y_2O_3 إلى ما يلي :

نلاحظ سلوكاً ضوئياً نموذجياً لأفلام Y_2O_3 الرقيقة المرسبة على ركائز من الكوارتز الصنعي فهي تتميز بنفوذية ضوئية عالية في المجالين المرئي و تحت الأحمر حيث تتجاوز قيمتها الوسطية (85%) يقابلها قيم وسطية من الانعكاسية (R) حوالي (15%) كما هو موضح في الشكل (4−5) ، في حين أن امتصاصاً ضوئياً يلاحظ في مجال الضوء فوق البنفسجي بالجوار للمجال المرئي الأمر الذي يتوافق مع عرض المجال المحظور الكبير لأفلام Y_2O_3 اللامتبلورة $(6.1)\,eV$ كما في الشكل (5−5) . يشير الشكلان (7−5) و (8−5) إلى انخفاض عام للشفافية و انزياح حافة الامتصاص قليلاً باتجاه الأطوال الموجية الأطول للفيلم المتبلور و الملدن

في الدرجة $^{\circ}C$ (900) و الدرجة $^{\circ}C$ (1000) على الترتيب ، و يظهر أثر ذلك على عرض المجال المحظور الذي يتناقص عند الانتقال من الطور اللامتبلور إلى الطور المتبلور، و يترافق ذلك بتحسن واضح في البنية البلورية للأفلام حيث تقترب قيمة المجال المحظور من قيمته للأفلام المتبلورة eV (5.7) كما هو موضح في الشكل (9−5) ، و يمكن أن يعود ذلك إلى أنه عند التبلور تنتظم الذرات في بنية بلورية محددة مما يسهل انتقال الالكترونات في البنية الطاقية من عصابة التكافؤ إلى عصابة الناقلية الأمر الذي يظهر في الحسابات كنقصان في قيمة المجال المحظور.

دُرسَ السلوك الضوئي لأفلام Y_2O_3 المتبلورة المرسبة على ركائز من السيلكون انطلاقاً من قياس طيف الانعكاسية R كما هو موضح في الشكل (5−10−a−b−c) حيث تمَ تحديد حد الامتصاص المرتبط بالمجال المحظور الذي طرأ عليه انزياح باتجاه الأطوال الموجية الأقصر عند زيادة درجة حرارة التلدين ، لأن الانعكاسية تتناقص في المجالين المرئي و تحت الأحمر في أفلام Y_2O_3 البلورية الأمر الذي يؤكد إمكانية استخدام هذه الأفلام كطبقات مانعة للانعكاس في الخلايا الشمسية ، حيث تبين أن المجال المحظور عند بدء التبلور في درجة حرارة الغرفة كان قريباً من eV (5) كما في الشكل (5−12−a) ، ليزداد برفع درجة الحرارة إلى $^{\circ}C$ (600)ليصل إلى eV (5.2) كما هو موضح في الشكل (5−12−b) ، و عند الدرجة $^{\circ}C$ (900) تصبح قيمة المجال المحظور eV (5.4) الشكل (5−12−c) ، و يعود ذلك إلى توقع وجود عيوب بلورية قد يشكلها الأوكسجين عند ترسيب أفلام Y_2O_3 ، و تكون هذه العيوب على شكل سويات متموضعة في المجال المحظور و عند إزالة هذه الحالات الطاقية المتموضعة بالتلدين الحراري يزداد عرض المجال المحظور الذي يجتازه الإلكترون عند إثارته من عصابة التكافؤ إلى عصابة الناقلية .

تم تعين ثابت العزل الكهربائي العقدي لأفلام Y_2O_3 بتحديد الثوابت الضوئية n و k للأفلام المرسبة على ركيزة من الكوارتز و على ركيزة من السيلكون ، بعد إجراء القياس على هذه العينة في الإلبسوميتر و تحليل النتائج في برنامج التحليل المرفق و المطابقة لمنحنيات ألفا و بيتا الخاصة بالعينة ، و تلك الموافقة للنموذج الخاص بـ Y_2O_3 الذي يتضمنه برنامج الإلبسوميتر ، كما هو متوقع فإن المركب Y_2O_3 مادة عازلة شفافة تتميز بقرينة انكسار نموذجية (1.9) للأفلام غير الملدنة و القمة ذاتها بالنسبة للأفلام الملدنة على ركيزة الكوارتز في المجالين المرئي و تحت الأحمر ، يقابله معامل تخامد صغير جداً في هذين المجالين كما هو موضح في الشكل (14−5) ، بينما كانت قرينة الانكسار (1.7) للأفلام المرسبة على ركيزة من السيلكون غير الملدنة كما في الشكل (17−5) ، و بالتلدين زادت لتصل (1.9) في المجالين المرئي و تحت الأحمر كما في الشكل (5−21) ، و يقابلها معامل تخامد صغير جداً في هذين المجالين ، كما حُسِبَ الجزأين الحقيقي و التخيلي لثابت العزل الكهربائي العقدي ε_1 و ε_2 ، و لاحظنا توافق تغيرات ε_1 مع تغيرات n و تغيرات ε_2 مع تغيرات k .

درس التبدد $n = f(\lambda)$ في أكسيد اليتريوم Y_2O_3 من خلال علاقة كوشي فتبين أنه يسلك سلوك التبدد النظامي في العوازل الشفافة خارج منطقة الامتصاص و في مناطق بدء الامتصاص ، و كان التبدد محقق في

أفلام Y_2O_3 المرسبة على ركيزة من الكوارتز و على ركيزة من السيلكون ، و تبين أن التطابق تام بين النتائج التجريبية و النظرية خارج منطقة الامتصاص و في مناطق بدء الامتصاص.

SUMMARY

Extensive researches have been conducted in recent years to use metal oxides that have high dielectric constants which should satisfy stringent requirements such as high breakdown voltage, low leakage current, high thermal stability . The metal oxides performed successful applications in our time which became replacement for (SiO_2) .

The properties of thin films of rare earth oxide, yttrium oxide Y_2O_3 were studied.

thin films of Y_2O_3 were deposited on quarts and silicon $Si(111)$ substrates , by electron-beam evaporation under pressure 10^{-6} mbar at room temperature using Edward Auto306 .

The structural properties of Y_2O_3 thin films were studied by X- ray diffraction (XRD) and resulted to these facts :

Y_2O_3 Thin films which deposited at room temperature onto quarts substrates were found to be amorphous Fig (4-1-a) .

The above thin films which annealed at temperature between $(500)^\circ C$ up to $(900)^\circ C$ were found to be still amorphous , fig (4-1-b).

The X-ray diffraction spectra showed that crystallization began at $(900)^\circ C$, Fig (4-1-c) , and increased with increasing annealing temperature, the spectrum intensity peaks , increased at temperature $(1000)^\circ C$, Fig (4-1-d) .

The deposited thin films of Y_2O_3 on silicon $Si(111)$ substrates start crystallization at room temperature with cubic crystal structural a (c-type) and take the preferred orientation (222) , (440) , Fig (4-3-a) . The crystallization structural improved when annealed , and the best crystallization was at $(900)^\circ C$ for 10 min , Fig (4-3) .

Optical studies of Y_2O_3 thin films , Revealed :

They have high optical transmittance in visible and infrared regions , where the average value was about (85%) , and the reflectance average value (15%) as shown in fig (5-4) , and there is an optical absorption in the ultraviolet region near the visible region , which correspond to a large energy gap $(6.1)\,eV$ for Y_2O_3 amorphous thin films , Fig (5-5) . Fig (5-7) and (5-8) indicate a general low transmittance , and to a displacement if absorption edge toward the wavelengths , for crystalline films long which annealed at $(900)\,^{\circ}C$, $(1000)\,^{\circ}C$ respectively , and the effect appeared on the wide energy gap which decreases by transition from the amorphous phase to the crystalline phase . when the crystal structure of films improve , the value of the energy gap approach the value of the crystalline films $(5.7)\,eV$, Fig (5-9) , which could be due to the regular atoms of the certain crystalline structure and that made the transition of the electrons in the energy structure from the valence band to the conductivity band easier and that appeared as a decrease in the energy gap .

The optical behavior of the Y_2O_3 crystalline films were deposited on silicon $Si\,(111)$ substrates and studied through the measurement of reflections spectrum (R) , fig (5-10-a-b-c) .The absorption edge which is related to the energy gap displace toward the shorter wavelengths when we increased the annealing temperature , because the reflections is decreasing in both visible and infrared regions of the Y_2O_3 crystalline films , so we can use these films as antireflective coatings in the solar cells .When Y_2O_3 films start crystallization at room temperature the energy gap is $(5)\,eV$, fig (5-12-a) , at higher temperature annealing reached $(5.2)\,eV$ at $(600)\,^{\circ}C$, fig (5-12-b) , and $(5.4)\,eV$ at $(900)\,^{\circ}C$, fig (5-12-c) . The change of the energy gap is likely to be due to the crystalline defects may be formed by oxygen when Y_2O_3 films deposited . these defects can be exist as levels in the energy gap , when annealing these films the energy states remove and the energy gap increase which is passed by excited electron from the valence band to the conductivity band .

We calculated the complex dielectric function of Y_2O_3 films through determining the optical constants n and k of the films which were deposited on quarts and silicon $Si\,(111)$ substrates ,after doing the ellipsometric measurement on these films and analyzing the results on the ancon program . These results should be identical to the (α) and (β) curves of Y_2O_3 films .

Y_2O_3 compound , as expectant , is transparent insulator material has exemplary refractive index (1.9) of films which were deposited on quarts substrates before and after annealing in both visible and infrared regions , and the extinction coefficient is very small in both regions , fig (5-14) . while the refractive index is (1.7) of Y_2O_3 films which were deposited on silicon $Si\,(111)$ substrates before annealing , fig (5-17) , after annealing increased to (1.9) in both visible and infrared regions , fig (5-17) .When we

calculated the real and imaginative parts of the complex dielectric function ε_1 and ε_2 , we observed that there is congruent in the change between (ε_1 and n) , (ε_2 and k) .

We studied the dispersion $n = f(\lambda)$ in yttrium oxide Y_2O_3 through Cauchy Relationship and we note the normal dispersion in the transparent insulates out the absorption edge and in regions of starting absorption . The dispersion was satisfied in the deposited films on quarts and silicon $Si(111)$ substrates , and we found the congruent between the experimental and theoretical results out absorption region and regions of starting absorption .