مجلة الدراسات التربوية والعلمية - كلية التربية - الجامعة العراقية
العدد الثاني والعشرون - المجلد الثاني - علوم الفيزياء - أيلول 2023 م
doi.org/10.52866/esj.2023.02.22.04

# دراسة المبادئ الأساسية للخصائص البصرية لصفائح اوكسيد الزنك النانوية (Zn O)

عيسى زين العابدين حسن ، رنده سعد احمد
Issa.assafly@gmail.com, ww55ggfcc@gmail.com

**مستخلص:**

أوكسيد الزنك (ZnO) هو ماده شبه موصلة من عائلة مواد الأكاسيد الشفافة الموصلة من نوع (n) المباشر ذو خصائص فيزيائية رائعة وهو ما يجعلها من أكثر المواد استعمالا في مختلف المجالات مثل : الالكترونات الضوئية و الخلايا الكهروضوئية وغيرها.بأستعمال المبادىء الأساسية وتقريب (GGA-PBE) على صفيحة أوكسيد الزنك السداسي النقي قمنا بحساب الخصائص البصرية والتي تشمل كل من (الأنعكاسية – معامل الأمتصاص – معامل الأنكسار – الموصلية – دالة الخسارة – ثابت العزل).أثبتنا من خلال دراستنا على وحدة الخلية الكبيرة (333) والصغيرة (111)، ان فجوة الطاقة هي فجوة طاقة مباشرة كما ذكرت أعلاة وان التهيئة على خلية السداسية لأوكسيد الزنك يؤدي لزيادة طول الأصرة مما يؤثر في هيكلية الخلية السداسية . تبدأ قيمة ثابت العزل الحقيقي من الصفروتسجيل اعلى دالة خسارة حيث تبلغ خسارة الدالة ( 0.49) عند الطاقة ( 7.38e V) تبداء بالتناقص عند الطاقات العالية .

**الكلمات المفتاحية:** (h-Zn O) ، نظرية دالة الكثافة (DFT) ، تقريب التدرج المعمم (GGA) ، برنامج CASTEP ، الخصائص البصرية لأوكسيد الزنك السداسي.

# Study of the basic principles of the optical properties of zinc oxide nanosheets (ZnO)

Issa Zainalabdin Hassan, Randa Saad Ahmed
Issa.assafly@gmail.com , ww55ggfcc@gmail.com

**Abstract:**

Zinc oxide (ZnO) is a semi-conductive material from the family of direct (n) transparent conductive oxides with wonderful physical properties, which makes it one of the most widely used materials in various fields such as: photoelectrons, photovoltaic cells, and others. Using basic principles and approximating GGA- PBE)) on a plate of pure hexagonal zinc oxide, we calculated the optical properties, which include (reflectivity - absorption coefficient - refractive index - conductivity - loss function - dielectric constant). We have proven through our study on the large unit cell 3x3x3)) And small (1 x 1 x 1), that the energy gap is a direct energy gap as mentioned above and that the initialization on the hexagonal cell of zinc oxide leads to an increase in the bond length, which affects the structure of the hexagonal cell.

The value of the real dielectric constant starts from zero, and the highest loss function is recorded, as the loss of the function is (0.49) at energy (7.38e V), and it begins to decrease at high energies.

## 1- المقدمة

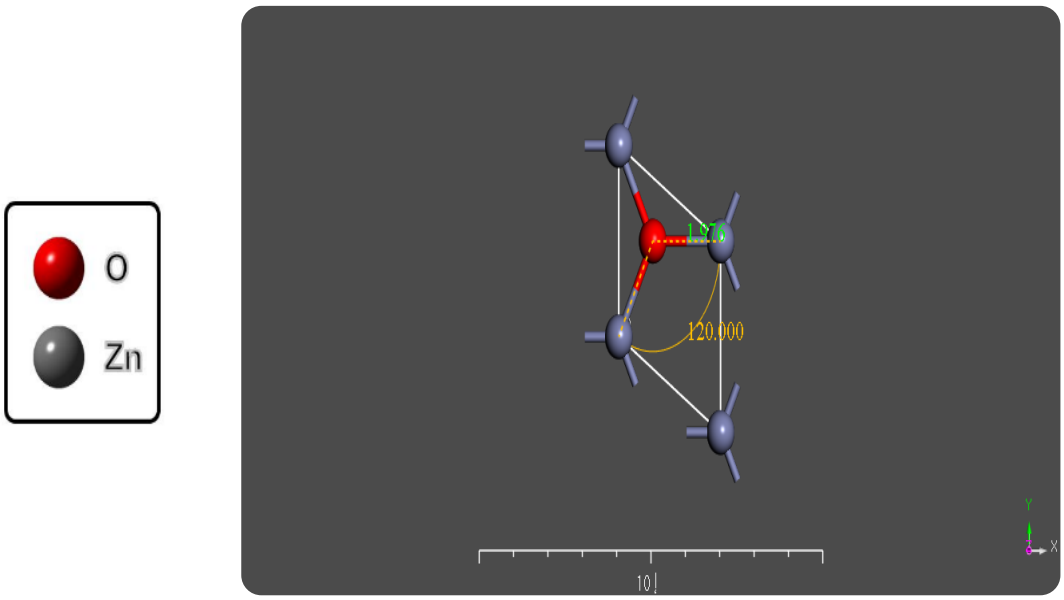
جذبت جزيئات أوكسيد الزنك (ZnO) النانوية اهتمامًا كبيرًا نظرًا لخصائصها الكيميائية والكهربائية والميكانيكية والبصرية والكهربائية الانضغاطية الفريدة الرائعة حيث يبلغ عرض النطاق لأوكسيد الزنك السداسي (3.4e V) وهو ذو فجوة نطاق واسعة، فهو يمتلك طاقة ارتباط كبيرة ( 60m eV) في درجة حرارة الغرفة و استقرارية كيميائية عالية[1، 2]. تُستخدم جسيمات أوكسيد الزنك على نطاق واسع في الأبحاث الأساسية والتطبيقات المحتملة، مثل تخزين الهيدروجين، والانبعاثات الميدانية، ومستشعرات الغاز، والليزر فوق البنفسجي، والخلايا الشمسية، والأجهزة الكهروضغطية، والمحفزات الضوئية [9-1]. تعتمد الخصائص والتطبيقات المحتملة لمواد ZnO بشدة على تراكيبها وأشكالها. لذلك، من المهم توليف التراكيب الدقيقة والنانوية الجديدة ذات الأحجام والأشكال المختلفة لاستكشاف تطبيقاتها المحتملة في الأجهزة الوظيفية. تم تصنيع العديد من التراكيب النانوية ZnO أحادية البعد في أشكال nanorod ، مصفوفات الأسلاك النانوية ، الأحزمة النانوية nanocones ، nanoflowers ، nanosheets ، nanonee-dles ، nanotetrapods ، الأنابيب النانوية باستخدام تقنيات تخليق مختلفة، مثل المواد الكيميائية الصلبة، والحرارة المائية السائلة [10] وبشكل عام تمتلك المواد النانوية ثنائية الأبعاد مساحة سطح كبيرة ونسبة سطح إلى حجم عالية. بالإضافة إلى ذلك، فإن تراكيبها الفريدة وطبقاتها الرقيقة ذريا جذابة نظرا لخصائص المواد المميزة، والتي لا يمكن تحقيقها باستخدام تراكيب الكتلية التقليدية. التطورات الحديثة في عملية التوليف (synthesis) واكتشاف أنواع جديدة من المواد النانوية ثنائية الأبعاد،بما في ذلك ثنائي كالكوجينيدات المعادن الانتقالية [11] (TMDs) transition metal chal-cogenides [12, 13]، واوكسيد الزنك السداسي h-ZnO وكبريتيد الموليبدينوم (Mo) ، الموليبدينوم ديسلينيد (Mo) و نيتريد البورون السداسي (h-BN) [11]، [1]. اكتسبت التراكيب النانوية لأوكسيد الزنك السداسي ثنائي الأبعاد 2D (h-ZnO) الاهتمام بسبب وجود الموصلية الحرارية العالية (50 $WmK^{-1}$) ، مساحة سطح عالية، غير سامة، وكونها غير ضارة بالبيئة. بالإضافة إلى ذلك، فجوة نطاق الطاقة المباشرة واسعة [11].

## 2- طريقة حساب الخصائص البصرية

## (Method for calculating optical) properties

تم دراسة الخواص البصرية لأوكسيد الزنك السداسي النقي بأستخدام المبدأ الأول (First (Prin-ciple Calculations [14]، ونظرية دالة الكثافة (DFT) (Density Functional Theory) وتقريب التدرج المعمم [15, 16](Generalized gra-dient approximation)(GGA) في برنامج[17] (CASTAP). أجريت الحسابات على الخلية السداسية البسيطة (111) والخلية الكبيرة (331) حيث من خلال الحسابات لاحظنا بأن الخلية الصغيرة تأخذ وقت اقل من الخلية الكبيرة وتعطي نفس الدقة بالنتائج، إذ تظهر طول الأصرة حسب القياسات العملية وقيم الزوايا أن طول الأصرة الأصلي يبلغ (1.501) وبعد أجراء التهيئة (Geometry Opti-mization) اصبحت ( 1.976). أما وحدة الخلية الأساسية (Primitives cell unit) تتكون من ثوابت

الشبيكة الأصلية (a=b=2.600, c= 30.00) اخذت النقاط عند نقطة 2×11×11 )k( أما الزاوية بين الذرات مرتبطة مع بعضها ألزنك والأوكسجين (Zn-O-Zn) وتساوي ($120^{o}$). ثوابت الشبيكة (a=b= 3 .525 A°) ( lattice parameters) (a,b,c) في المستوي X،Y واما قيمة (c) والتي تمثل البعد بين كل طبقتين فقد تم اختيارها (c=5.025 A°) باتجاه المحور Z تم اختيار هذه المسافة الكبيرة لأغراض حسابية لتكون الخواص المحسوبة لأوكسيد الزنك ذي الطبقة الواحدة (Layer) فقط وليس الكتلي (bulk) أذ يمكن في هذه الحالة اهمال التفاعل بين الطبقات حيث أجريت الحسابات باستخدام التدرج المعمم (GGA-PBE) لحساب الخصائص البصرية وتحليل كل من منحنيات (الأنعكاسية – معامل الأمتصاص – معامل الأنكسار – الموصلية – دالة الخسارة – ثابت العزل).




**الشكل (1) خلية أوكسيد الزنك النقي السداسية بعد التهيئة وقيمة الزاوية المحصورة بين (Zn-O-Zn)**

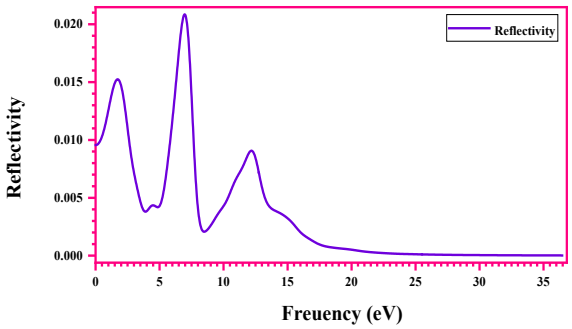
## 3 - النتائج والمناقشة

### Results and discussion

3 . 1 . الخصائص البصرية (Optical properties)

3 . 1 . 1 . الأنعكاسية (Refractivity)

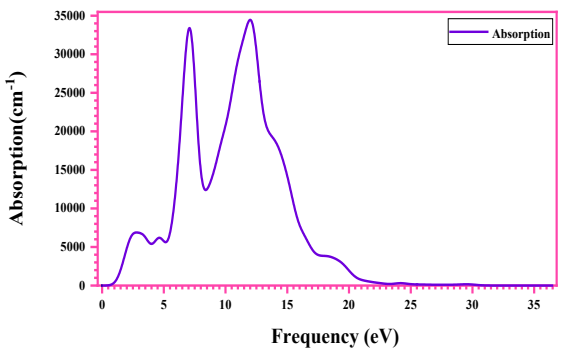
نلاحظ من خلال المنحنى علاقة بين (التردد و الأنعكاسية) بأن الأنعكاسية تزداد بدء من (0.009) عند (0) الى أن تصل (0.0152) عند الطاقة (1.8e V ) وتسجيل اعلى قمة للأنعكاسية (0.0208) عند الطاقة (6.9e V) ثم تبدأ بالتناقص لتصل الى (0.0088) عند الطاقة (12e V) ثم يبدأ الأنخفاض السريع في الأنعكاسية عند الطاقات (الترددات) العالية وهذا يعزى الى العلاقة العكسية بين التردد والطاقة اي عند زيادة الطاقة يقل التردد وأن الأمتصاصية تكون عند الطاقات المنخفظة عالية وهذا يعني أن صفيحة أوكسيد الزنك السداسي النقي تسلك سلوك أ شباة موصلات.




الشكل (2) منحنى الأنعكاسية

3 . 1 . 2 . **معامل الأمتصاص** (absorption)

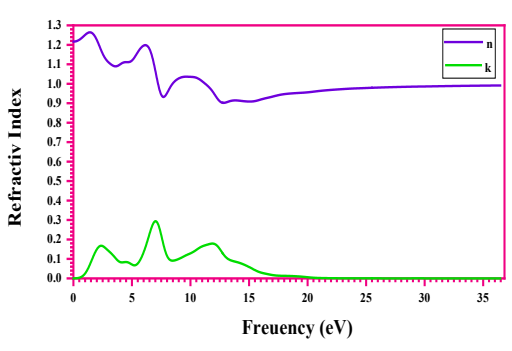
ومن الشكل (3) أدناة نلاحظ أن شدة الأمتصاص عالية عند القمة (34504) بأستعمال التقريب (GGA) ونلاحظ أن صفيحة أوكسيد الزنك السداسي النقي تكون شفافة في المنطقة المرئية للمجالين طاقة من (8.2-5.32(e)7. 22-8.36 ), (e V)) لهذا تستخدم كمرهم واصباغ وطلاء لكونها ممتصة في منطقة الفوق بنفسجية في مجال طاقة من (8.36-17.1 (e V)) تسمح فجوة النطاق الكبيرة لـ لأوكسيد الزنك السداسي النقي فقط بامتصاص جزء صغير من ضوء الشمس ، أي الضوء فوق البنفسجي.وجد أن حافة امتصاص أوكسيد الزنك النقي هي (5.32e V) ، وتقع في منطقة الأشعة فوق البنفسجية.




الشكل (3) منحنى معامل الأمتصاص

3 . 1 . 3 . **معامل الأنكسار (Refractive Index)**

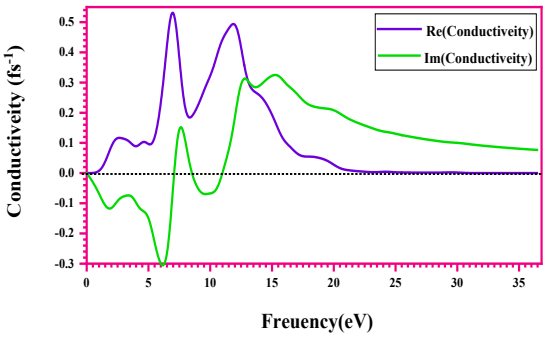
معامل الأنكسار يبين مدى تأثر المادة بالأمواج الكهرومغناطيسية وهو يتكون من جزئين حقيقي وخيالي وهو قيمة غير ثابتة تتخير وفق اتجاة أنتشار الموجة الكهرومغناطيسية . الجزء الحقيقي يمثل أنكسار الضوء في المادة وجزؤه الخيالي يمثل عدد مركب ويعبر عن توهين شعاع الضوء[18] . نلاحظ من خلال منحنى الأنكسار ووجود معاملين انكسار تخيلي وحقيقي يكونان علاقة مع التردد . (يرتبط توهين الموجات الكهرومغناطيسية داخل المادة بالجزء التخيلي من مؤشر الانكسار) يعتمد معامل الأنكسار على الطول الموجي والزيادة في معامل الأنكسار يؤدي الى نقصان سرعة الضوء المرئي في الوسط حيث يعتبر معامل الأنكسار مهم في المنطقة تحت فجوة الطاقة اي المنطقة الممتصة فقط. نلاحظ أن معامل الأنكسار الحقيقي لايتغير في مناطق عالية الطاقة، و نلاحظ أن معامل الانكسار الحقيقي يبلغ (1.2) مقارب لنتائج بحث سابق [19] وهو اطول من معامل الانكسار التخيلي الذي يبدأ من الصفر ثم بعدها يتزايد تدريجيا وأن معامل انكسار المادة هو (1.26) عند التردد (1.36e V) يقترب من معامل انكسار الثلج 1.33 .




الشكل (4) منحنى معامل الأنكسار

### 3 . 1 . 4 . الموصلية (Conductivity)

نلاحظ الموصلية الحقيقية واقعة في منطقة حزمة التوصيل لاتسجل اي توصيلية عند المدى الطاقي (-0 1.2 (e V)) الواقع على مستوى فيرمي ( الصفري ) كونة خالي من الألكترونات وتسجيل اعلى موصلية تبلغ (0.51) عند الطاقة (6.81e V) . أما الموصلية الخيالية هي موصلية الواقعة في نطاق حزمة التكافؤ تمتدد ( 2.11–0 (e V)) ونتيجة الانتقالات بين المستويات الأنتقال من حزمة التكافوء لحزمة التوصيل لنطاق الزنك والأوكسجين حيث تتعرض الموصلية للتشتت البصري تبلغ (0.325) عند الطاقة (15.2e V) .

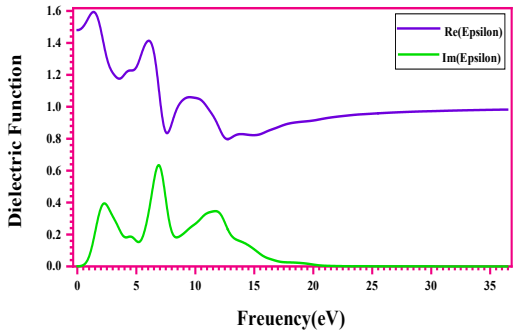



**الشكل (5) منحنى الموصلية**

### 3 . 1 . 5 . ثابت (دالة) العزل الكهربائي ( Dielectric Function )

الدالة العازلة هي كمية تصف الأستجابة الخطية لنظام الأشعاع الكهرومغناطيسي والتحكم في انتشار الأشعاع في الوسط ترتبط بتفاعل الفوتونات مع الألكترونات [20] .

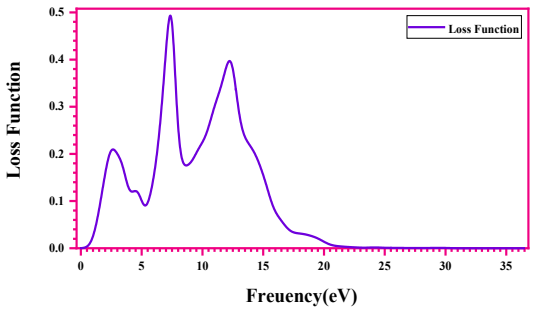
ثابت العزل للجزء الحقيقي يبدأ من مجال الطاقة (0) ويقدر ( 1.48 ) و ينتج الجزء التخيلي من الانتقال بين حزمة التوصيل والتكافؤ الجزء التخيلي لثابت العزل (0.01) يبدأ من الطاقة (0.53e V).




**الشكل (6) محنى ثابت العزل**

### 3 . 1 . 6 . دالة الخسارة ( Loss Function )

وهي تمثل بمنحنى علاقة بين دالة الخسارة والتردد حيث نلاحظ تكون في منطقة التوصيلية خسارة الدالة ممتدة ضمن نطاق (0.64-0 (e V)) ولاتسجل أي قيمة لكونها واقعة على (مستوى الصفري) مستوى فيرمي الخالي من الألكترونات وتسجل عند الطاقة (7.38e V) أعلى قمة خسارة الدالة (0.49).




**الشكل (7) منحنى دالة الخسارة**

## 4 - الأستنتاجات ( Conclusions )

الغرض من هذا البحث هودراسة الخصائص البصرية لأوكسيد الزنك السداسي النقي (h-Zn O) على شكل صفيحة وبالأعتماد على نظرية داله الكثافة (DFT) مع الموجة المستوية طريقة( pseu-dopotential). لاحظنا من خلال الحسابات أن فجوة الطاقة لمعامل الأمتصاص يساوي (1.74e V) بالنسبة لحسابات فجوة النطاق ، تقلل (GGA) من فجوات النطاق قليلا . تقترب قيمة معامل الأنكسار من (1.3) عند التردد الطاقي (1.36e V) حيث يزداد بزيادة حركة الألكترونات، ويبلغ الحد الأعظم للأنعكاسية (0.0208) عند التردد الطاقي(6.9e V) . وتم تسجيل أعلى قيمة لدالة ثابت العزل الكهربائي والتي تساوي حوالي (1.48). أما اعلى موصلية كهربائية فتبلغ (0.51) عند الطاقة (6.81e V ) حيث تكون حركة انتقال الألكترونات بين مستويات الطاقة أعلى مايمكن . نستنتج أن أوكسيد الزنك السداسي النقي شفاف في المنطقة المرئية و ممتص في المنطقة فوق البنفسجية وبالتالي يمكن أستخدام (h-Zn O) في كثير من التطبيقات الألكترونية والكهربائية ويمكن أيضا تطويرها في دراسات مستقبلية .

## المصادر

1. Cassabois, G., P. Valvin, and B. Gil, Hexagonal boron nitride is an indirect bandgap semiconductor. Nature photonics, 2016. **10**(4): p. 262-266.
2. Chung, K., C.-H. Lee, and G.-C. Yi, Transferable GaN layers grown on ZnO-coated graphene layers for optoelectronic devices. Science, 2010. **330**(6004): p. 655-657.
3. Tang, Q. and Z. Zhou, Graphene-analogous low-dimensional materials. Progress in materials science, 2013. **58**(8): p. 1244-1315.
4. Hong, H.-K., et al., Atomic scale study on growth and heteroepitaxy of ZnO monolayer on graphene. Nano letters, 2017. **17**(1): p. 120-127.
5. Wang, F., et al., Nanometre-thick single-crystalline nanosheets grown at the water–air interface. Nature communications, 2016. **7**(1): p. 10444.
6. Wang, J., et al., Molecular dynamics and density functional studies of a body-centered-tetragonal polymorph of ZnO. Physical Review B, 2007. **76**(17): p. 172103.
7. Heyd, J. and G.E. Scuseria, Efficient hybrid density functional calculations in solids: Assessment of the Heyd–Scuseria–Ernzerhof screened Coulomb hybrid functional. The Journal of chemical physics, 2004. **121**(3): p. 1187-1192.
8. Clark, S., et al., Intrinsic defects in ZnO calculated by screened exchange and hybrid density functionals. Physical Review B, 2010. **81**(11): p. 115311.
9. Lee, G., T. Kawazoe, and M. Ohtsu,

18. Attwood, D., Soft x-rays and extreme ultraviolet radiation: principles and applications. 2000: Cambridge university press.
19. Wang, Q.-B., et al., A GGA+ U study of the optical properties of vanadium doped ZnO with and without single intrinsic vacancy. Optics Communications, 2013. **297**: p. 79-84.
20. Kittel, C. and P. McEuen ,Introduction to solid state physics. 2018: John Wiley & Sons.

Difference in optical bandgap between zinc-blende and wurtzite ZnO structure formed on sapphire (0001) substrate. Solid state communications, 2002. **124**(5-6): p. 163-165.
10. Wang, Z.L., Zinc oxide nanostructures: growth, properties and applications. Journal of physics: condensed matter, 2004. **16**(25): p. R829.
11. Patil, S.A., et al., 2D zinc oxide–synthesis, methodologies, reaction mechanism, and applications. Small, 2023. **19**(14): p. 2206063.
12. Weng, Q., et al., Functionalized hexagonal boron nitride nanomaterials: emerging properties and applications. Chemical Society Reviews, 2016. **45**(14): p. 3989-4012.
13. Kim, K.K., et al., Synthesis of monolayer hexagonal boron nitride on Cu foil using chemical vapor deposition. Nano letters, 2012. **12**(1): p. 161-166.
14. Freysoldt, C., et al., First-principles calculations for point defects in solids. Reviews of modern physics, 2014. **86**(1): p. 253.
15. Niraula, P.R., Density functional theory study of two-dimensional boron nitride films. 2020, City University of New York.
16. Chakarawet, K., R.J. Debus, and R.D. Britt, Mutation of a metal ligand stabilizes the high-spin form of the S2 state in the O2-producing Mn4CaO5 cluster of photosystem II. Photosynthesis Research, 2023: p.1-6 .
17. Rutter, M.J., C2x: A tool for visualisation and input preparation for Castep and other electronic structure codes. Computer Physics Communications, 2018. **225**: p. 174-179.