بررسی خواص ساختاری و اپتیکی V2O5 آلاییده به ناخالصی ZnO

شوقی ، زهرا[۱] ؛ جعفر تفرشی ، مجید [۱] ؛ فضلی، مصطفی[۲]

دانشکده فیزیک ، دانشگاه سمنان[۱]

دانشکده شیمی، دانشگاه سمنان[۲]

چکیده

نانو ذرات وانادیم پنتااکساید(V_2O_5) در ابتدا به صورت خالص، سپس همراه با ناخالصی اکسید روی (ZnO) با دو مقدار ۱۵٪ ، ۲۰٪ به روش هیدروترمال سنتز شدند. خواص ساختاری و اپتیکی نمونه های سنتز شده با استفاده از آنالیزهای XRD و UV-VIS بررسی گردید. الگوهایی XRD نشان می دهند که با افزایش مقدار ناخالصی اندازه ذرات کوچکتر می شود که این موضوع در الگوی ساختاری وانادیم پنتااکساید اثر می گذارد. وانادیم پنتااکساید دارای جذب نور مرئی و زینک اکساید جذبی در محدوده ی فرابنفش دارد، با بررسی UV-VIS به این نتیجه دست یافتیم که ترکیب این دو اکسید دارای جذبی در ناحیه ی مرئی می باشد و با افزایش میزان ناخالصی گاف انرژی کاهش می یابد.

Investigation of structural and optical properties of V_2O_5 doped with ZnO

Shoghi,Zahra[1]; JafarTafreshi,Majid[1]: Fazli, Mostafa[2]

[1] Department of Physics, Semnan University
[2] Department of Chemistry, Semnan University

Abstract

Vanadium pentoxide nanoparticles (V_2O_5) was first produced in pure form Then doped zinc oxide (ZnO) with two value %15 ,%20 with hydrothermal method . Structural and optical properties of synthesized samples were analyzed using analysis of XRD and UV-VIS. The XRD pattern showed Particle size becomes smaller with increase the amount of impurities this subject effect on vanadium pentoxide structure pattern. Vanadium pentoxide has visible light absorption and zinc oxide has absorption ultraviolet, with investigate UV-VIS concluded compound of oxides have visible light absorption and decrease band gap with in2crease doped.

PACS No .62

مقدمه

در سال های اخیر، تحقیقات جدید در علم نانو فیزیک و نانوشیمی بر روی ساختار مولکولی و واکنش شیمیایی مواد به سرعت گسترش یافته است،که نتیجه آن کنترل ساختار بلوری نانومواد بر اساس خواص مکانیکی، الکتریکی، اپتیکی و مغناطیسی آن ها است[۱]. در این میان نیمرساناها به دلیل کاربردهای بالقوه در زمینه های گوناگون از توجه خاصی برخوردارند. از مهم ترین ویژگی های نیمرساناها، که آنها را کاملا از فلزات و عایق ها متمایز می کند، گاف انرژی آن ها است که تحت شرایط خاصی می توان تغییرات دلخواه را در نانوساختار آن ها ایجاد کرد. از طرفی علاوه بر گاف انرژی، چگالی حالت های الکترونی در ابعاد مختلف نیز، متفاوت می‌باشد. کاهش در ابعاد مواد، مستقیما بر روی خواص فیزیکی آن ها تاثیر می گذارد.وانادیوم ، یک عنصر کمیاب ، نرم و هادی است که به صورت ترکیبی با کانی‌های خاصی یافت می‌شود. همچنین کاربردهای صنعتی فراوانی دارد که از آن جمله می توان به استفاده از آن به عنوان آلیاژساز برای افزودن به صورت فرو وانادیم به فولاد

،کاتالیست برای افزایش سرعت واکنش های همگن و غیرهمگن مانند واکنش تولید اسید سولفوریک از گاز دی اکسید گوگرد و اسید اکریلیک از پروپان و استفاده اپتیکی مانند طراحی ابزارهای اپتوالکترونیک و پوششهای اپتیکی به صورت فیلم های اپتیکی نازک چند لایه اشارهه نمود. این فلز چندین ترکیب نظیر V_2O_4، V_2O_5 ، V_2O_3و VO داشته که ، پنتا اکسید وانادیم V_2O_5 مهمترین و پایدارترین نوع می باشد.نیمه رسانای این ترکیب به علت ویژگی های منحصر به فرد ساختاری و خواص اپتیکی مناسب، در چند سال اخیر مورد توجه قرار گرفته است[۲].

پنتااکساید وانادیم یک نیمه رسانای نوع n بود که تراز ۳d آن در حال پر شدن بوده و متعلق به دسته ای از مواد هوشمند است که با تغییرات دما ، میدان الکتریکی یا مغناطیسی و تغییرات فشار واکنش نشان می دهد. بدلیل وجود بیشترین سطح و ساختار لایه ای منحصر به فرد، برای این ماده چندین روش برای ساخت نانو ذرات اکسیدهای وانادیم وجود دارد از جمله هیدروترمال ، سل- ژل و اپیتکسی از فاز بخار.[۳]

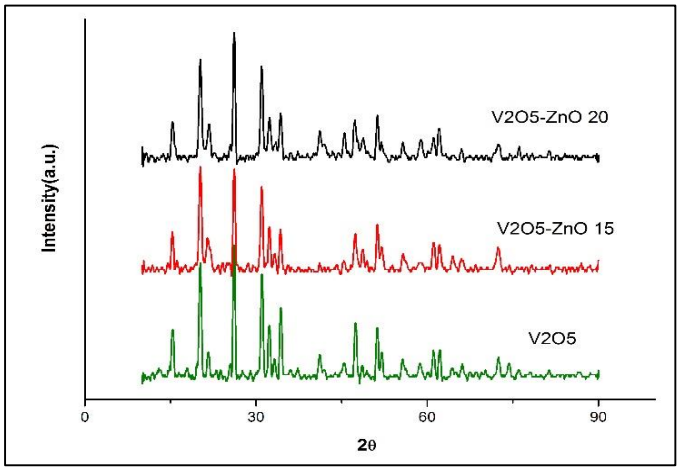
این اکسید با عناصری مانند Cr , Fe , Ag و Zn آلاییده شده است [۴].همچنین آلایش ماده به ZnO با روش سل-ژل برای بهبود خواص اپتیکی گزارش شده است [۵].ولی دراین‌مقاله ویژگی های ساختاری و اپتیکی نیمه رسانای V_2O_5-ZnOبه روش هیدروترمال بررسی می شود.

روش آزمایش

در این آزمایش برای تهیه ی نانوذرات V_2O_5 آلاییده به ZnO از روش هیدروترمال استفاده شده است.مواد اولیه شامل وانادیم پنتا اکساید (V_2O_5) ،اکسید روی (ZnO) ،آب مقطر ، پلی اتیلن گلیکول ، هیدروژن پراکسید جهت فرایند سنتز استفاده گردید. در این روش سه نمونه تهیه گردید. در ابتدا نمونه ی اول به صورت تنها نانوذرات وانادیم پنتا اکساید خالص تهیه شد ، برای این منظور ابتدا پودر وانادیم پنتا اکساید را در آب مقطر به اندازه دو ساعت حل کرده و سپس هیدروژن پراکسید قطره قطره به آن اضافه گردید، و در انتها پلی اتیلن گلیکول نیز به آن اضافه شد شد.اتوکلاو به مدت یک ساعت در آون دمای ۲۰۰ درجه سانتیگراد قرار گرفت ، پس از سرد شدن تدریجی ماده را شسته و با قرار دادن در یک پتردیش به مدت ۱۲ ساعت ، در آون دمای ۶۰ درجه سانتیگراد قرار گرفت . پس از آن ماده ی حاصل را در بوته قرار داده و به مدت ۱ ساعت کلسینه نمودیم ماده حاصل را در هاون کوبیده ، و پودر نهایی را در میکرو تیوب جهت آزمایشات XRD و UV قرار دادیم. نمونه های ی دوم و سوم هم با این روش تهیه گردید با این تفاوت که در این نمونه ها به ترتیب ۱۵٪و ۲۰٪ از ماده ی اصلی را با اکسید روی،در مرحله ی اول ترکیب نمودیم .

نتایج و تحلیل داده ها

نمودار آنالیز XRD نمونه های خالص و آلاییده شده در شکل۱ نشان داده شده است. شدت، پهنای پیک و همچنین جایگاه قله ها در نمونه های آلاییده نسبت به نمونه خالص تغییر یافته است که مطابق با نتایج بدست آمده در مقالات مختلف است[۶]. این تغییرات نشانگر حضور اتم های ماده ناخالصی در شبکه ماده سنتز شده می باشد.



شکل ۱: آنالیز XRD نمونه های خالص و آلاییده پنتا وانادیم اکساید

جدول ۱: پهنای قله اصلی نمونه های خالص و آلاییده

	pure	٪۱۵	٪۲۰
FWHM	۰/۴۳۳	۰/۴۱۷	۰/۴۵۲
۲θ	۳۴/۳۴	۳۲/۳۳	۳۰/۹۸
D	۲۰/۰۶	۱۹/۸۰	۱۸/۲۱

اندازه ذرات با بهره گیری از داده های آنالیز XRD و با استفاده از رابطه ی دبای شرر محاسبه گردید:

$$D = \frac{0.9\times\lambda}{\beta cos\theta} \qquad (۱)$$

که در آن λ طول موج پرتو فرودی (۱/۵۴ نانومتر)، β پهنای قله در نیمه ارتفاع برای جهت ترجهی و θ جایگاه قله می باشد. از داده های جدول۱ می توان نتیجه گرفت که افزایش ناخالصی باعث کاهش اندازه ذرات می گردد و این به معنای بهبود خواص ساختاری نمونه خالص است.

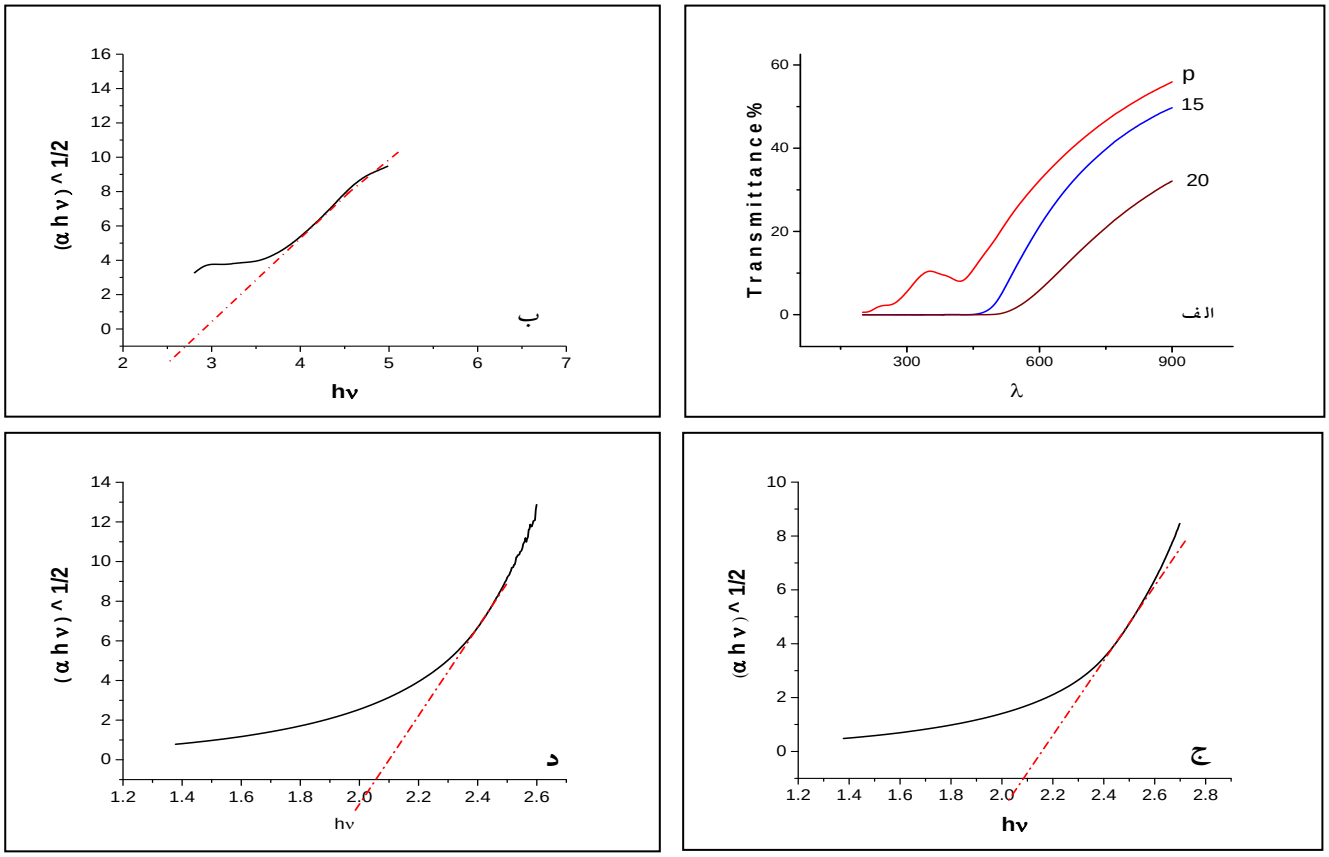
برای بررسی خواص اپتیکی مواد سنتز شده از آنالیز UV-VIS استفاده شده است. شکل ۲-الف نمودار میزان شفافیت نمونه ها را نسبت به طول موج فرودی نشان می دهد. همچنین برای محاسبه گاف انرژی نمونه ها روش تاک (Tauc) بکار برده شده است[۷].

طبق این روش ، نمودار $(\alpha h\nu)^{1/2}$ بر حسب hv برای هر نمونه رسم می‌گردد. نقطه تقاطع این خط با محور x ها نشانگر گاف انرژی می باشد. شکل۲-ب ، ج و د، به ترتیب مربوط به نمودارهای تاک برای نمونه های خالص ،آلاییده با ۱۵٪ و ۲۰٪ اکسید روی می باشد. محور افقی نمودار و ضریب جذب(α) از روابط زیر حاصل می گردند:

$$h\nu = \frac{1240}{\lambda} \qquad (۲)$$

$$\alpha = -Ln(\frac{T}{100}) \qquad (۳)$$

که در آن T مقدار شفافیت در طول موج های مختلف را نشان می دهد. با استفاده از این روش، گاف انرژی برای نمونه خالص، آلاییده با ۱۵ ٪ و ۲۰ ٪ اکسید روی به ترتیب برابر با ۲/۷۳، ۲/۰۸ و ۱/۸۳ الکترون ولت محاسبه گردید.



شکل ۲ : (الف) نمودار ترنس برای سه نمونه (ب) نمودار نمومه خالص V2O5 (ج) نمودار نمونه V2O5 با ۱۵٪ ZnO (د) نمودار نمونه V2O5 با ۲۰٪ ZnO

جدول ۲ به طور خلاصه گاف نواری و اندازه ذره، نمونه های سنتزشده را نشان می دهد.

جدول ۲: گاف نواری و اندازه ذرات نمونه های سنتز شده

نمونه	اندازه ذره	گاف انرژی
خالص V_2O_5	۲۰/۰۶	۲/۷۳
آلاییده به ۱۵٪	۱۹/۸۰	۲/۰۸
آلاییده به ۲۰٪	۱۸/۲۱	۱/۸۳

اکسید روی دارای گاف انرژی حدود ۳,۳۷ ev می باشد ، درحالی که وانادیم پنتا اکساید در حالت خالص دارای گاف نواری حدود ۲,۷۲ ev می باشد. با استفاده از ناخالصی اکسید روی مقدار گاف انرژی وانادیم پنتااکساید کاهش یافت که درواقع باعث بهبود خاصیت اپتیکی آن گردید.

نتیجه گیری

بدلیل ساختار لایه ای و منحصر به فرد وانادیم پنتااکساید، اکسید روی به خوبی در ساختار می نشیند که نتیجه آن کوچکتر شدن اندازه ذرات می باشد. همچنین با کاهش اندازه ذرات سطح بیشتری از ماده در معرض امواج قرار میگیرد که نتیجه آن جذب بالای امواج می باشد.

با استفاده از داده های بدست آمده مشخص شد که با افزایش ناخالصی اکسید روی در وانادیم اکساید، اندازه ذرات نمونه های بدست آمده کاهش یافت که منجر به کاهش مقادیر گاف نواری شد.

مراجع

[1] Zou, C. W., X. D. Yan, J. M. Bian, and W. Gao. "Enhanced visible photoluminescence of V 2 O 5 via coupling ZnO/V 2 O 5 composite nanostructures." *Optics letters* **35**, no. 8 (2010): 1145-1147.

[2] Wachs, Israel E. "Catalysis science of supported vanadium oxide catalysts." *Dalton Transactions* **42**, no. 33 (2013): 11762-11769.

[3] Zou, C. W., X. D. Yan, R. Q. Chen, Z. Y. Wu, A. Alyamani, and W. Gao. "Effect of annealing on the microstructure and optical properties of ZnO/V2O5 composite." *Applied Physics Letters* **98**, no. 11 (2011): 1904.

[4] Suresh, R., K. Giribabu, R. Manigandan, S. Munusamy, S. Praveen Kumar, S. Muthamizh, A. Stephen, and V. Narayanan. "Doping of Co into V 2 O 5 nanoparticles enhances photodegradation of methylene blue." *Journal of Alloys and Compounds* **598** (2014): 151-160.

[5] Castriota, M., E. Cazzanelli, A. Fasanella, and D. Teeters. "Electrical conductivity and Raman characterization of V2O5 grown by sol–gel technique inside nanoscale pores." *Thin Solid Films* 553 (2014): 127-131.

[6] Sion F Olive-Méndez1*, Carlos R Santillán-Rodríguez1, Ricardo A González-Valenzuela2, Francisco Espinosa-Magaña1 and José A Matutes-Aquino1, Olive-Méndez et al. Nanoscale Research Letters, **9:**169(2014)

[7] Allen W. Burton;“ On the estimation of average crystallite size of zeolites from the Scherrer equation: A critical evaluation of its application to zeolites with one-dimensional pore systems”; *Journal of* microporous and mesoporous materials **117** (2009) 75–90