

Research Paper

The effect of thermal treatment on the microstructure and optical properties of In_2S_3 thin films prepared by thermal evaporation

Heydar Izadneshan

Department of solid state physics, Marv.C., Islamic Azad University, Marvdasht, Iran

Received: 2025/06/16

Accepted: 2025/08/06

Use your device to scan and read the article online

**Keywords:**

Thin films, Indium sulfide, Thermal annealing, Raman spectroscopy, Thin films solar cell

Abstract

Introduction: In thin-film solar cells based on multi-component semiconductors like $\text{CuIn}_x\text{Ga}_{(x-1)}\text{Se}_2$ (CIGS), the buffer layer between the p-type absorber and low-resistance n-type layer plays a crucial role. Typically, n-conductive buffer layers employ wide-bandgap semiconductors such as cadmium sulfide (CdS) deposited from chemical solutions. Chemically vapor-deposited CdS layers (40-100 nm thick) in CIGS solar cells have achieved ~21% conversion efficiency. However, due to CdS toxicity, researchers are seeking alternative materials. Current investigations focus on B^3C^6_3 semiconductor compounds (where $\text{B}^3 = \text{Al/Ga/In}$ and $\text{C}^6_3 = \text{S/Se/Te}$) for developing radiation-resistant, high-efficiency thin-film solar cells. Among these, the binary compound In_2S_3 has shown particular promise. This study aims to obtain new data on the microstructure and optical properties of In_2S_3 thin films as functions of deposition methods, with potential implications for advancing thin-film photovoltaic technology.

Methods: In this study, In_2S_3 thin films of varying thicknesses were deposited with using of In_2S_3 polycrystalline target on BK7 glass substrates via thermal evaporation at 250°C , with a pressure of [X] and a deposition rate of $5.2 \text{ \AA/s}$. Post-deposition annealing was performed at $300\text{--}400^\circ\text{C}$ for 30–60 minutes. The crystalline structure and phase composition were analyzed using XRD (DRON-3M, $\text{CuK}\alpha$ radiation, $2\theta = 15\text{--}100^\circ$), while surface morphology and elemental composition were examined via SEM (JEOL 6400) and AES (PHI-660). AFM (NT-206) revealed surface topography, and optical properties were characterized using UV-Vis-NIR spectroscopy (Cary-500, 400–2500 nm). Raman spectroscopy (Nanofinder, 532 nm laser) identified active modes (9A_1 and 14E), with spectral shifts and bandwidth changes indicating annealing effects. XRD and Raman results confirmed a phase transition from tetragonal to cubic at higher annealing temperatures. Data analysis was performed using Origin software, demonstrating the significant impact of thermal treatment on the structural and optical properties of In_2S_3 thin films.

Findings: This study developed a thermal evaporation technique for producing In_2S_3 thin films (40-1500 nm) on substrates at $200\text{--}240^\circ\text{C}$, followed by thermal annealing ($300\text{--}400^\circ\text{C}$, 30-60 min). XRD analysis revealed as-deposited films were amorphous, while annealing at 330°C induced a tetragonal phase (peaks at 103, 214, 324, 303), and 400°C annealing produced mixed tetragonal/cubic phases. AFM and SEM showed optically homogeneous films with grain size increasing from.

Citation: Heydar Izadneshan, The effect of annealing on the microstructure and optical properties of In_2S_3 thin films prepared by thermal evaporation method, Quarterly Journal of New Materials. 2025 15(58):48-60

***Corresponding author:** Heydar Izadneshan

Address: Department of solid state physics, Marv.C., Islamic Azad University, Marvdasht, Iran

Tell: +989177102596

Email: izadneshan@yahoo.com

DOI: <https://doi.org/10.71905/jnm.2025.1209909>

Extended Abstract

Introduction:

In thin-film solar cells based on multi-component semiconductor materials such as $\text{CuIn}_x\text{Ga}_{x-1}\text{Se}_2$, the formation of a buffer layer between the p-type absorber layer and the low-resistance n-type layer plays a crucial role. The buffer layer material typically consists of n-type conductive layers based on wide-bandgap semiconductor compounds, such as cadmium sulfide (CdS), which are deposited from salt solutions. The use of CdS layers prepared by chemical vapor deposition with a thickness of 40 to 100 nanometers in $\text{CuIn}_x\text{Ga}_{x-1}\text{Se}_2$ -based solar cells has led to an efficiency of approximately 21% for thin-film photovoltaic converters. Due to the toxicity of cadmium sulfide, researchers are seeking alternatives for this material in electronic components. Currently, $\text{B}_3\text{C}_6\text{S}_3$ -type semiconductor compounds (where B_3 represents Al, Ga, or In, and C_6 represents S, Se, or Te) are being extensively studied for use in high-efficiency, radiation-resistant thin-film solar cells. Among these compounds, the binary compound In_2S_3 has attracted significant attention. Therefore, the aim of this article is to obtain new data on the microstructure and optical properties of In_2S_3 thin films depending on their fabrication methods. The results of this work could contribute to the advancement and development of thin-film solar cell technology.

Findings and Discussion

Scientific findings of this research include determination of microstructural characteristics (crystalline structure, phase and elemental composition, surface morphology, crystallite size) and optical properties of In_2S_3 thin films, along with establishing their correlation with layer preparation and formation conditions such as substrate temperature, layer thickness, and annealing temperature/duration.

Among the most significant achievements of this work is the identification of a phase transition from tetragonal to cubic crystal structure depending on

the annealing conditions applied to the thin films, which was confirmed by X-ray diffraction analysis and Raman spectroscopy results.

Furthermore, the experimental data regarding variations in the optical bandgap of In_2S_3 thin films based on their fabrication and annealing conditions are of particular importance in this study for predicting the physical properties of thin-film solar cells based on these layers.

Conclusion

The findings of present article indicate that the physical and structural characteristics of In_2S_3 thin films are strongly influenced by deposition conditions and thermal processing parameters such as temperature and time.

This study demonstrated that heat treatment reduces structural defects such as vacancies and dislocations, which act as trap states for photon absorption, leading to decreased light absorption at lower energies and a redshift of the absorption edge toward longer wavelengths. Furthermore, changes in the electronic structure due to the evolution of atomic bonds and density of states influence light absorption behavior and modify the absorption edge.

Ethical Considerations compliance with ethical guidelines

The cooperation of the participants in the present study was voluntary and accompanied by their consent.

Funding

No funding.

Authors' contributions

Design experiments and perform: heydar Izadneshan

Conflicts of interest

The authors declared no conflict of interest.

مقاله پژوهشی

تاثیر عملیات حرارتی بر روی ریزساختار و خواص نوری لایه‌های نازک In_2S_3 تهیه شده به روش تبخیر حرارتی

حیدر ایزدشنان*

استادیار، گروه فیزیک حالت جامد، واحد مرودشت، دانشگاه آزاد اسلامی، مرودشت، ایران

تاریخ دریافت:

تاریخ پذیرش:

از دستگاه خود برای اسکن و خواندن مقاله به صورت آنلاین استفاده کنید



DOI:

واژه‌های کلیدی:

فیلم‌ها لایه نازک، سولفید ایندیوم، عملیات حرارتی، طیف سنجی رامان، سلول خورشیدی لایه نازک

چکیده

مقدمه: در سلول‌های خورشیدی لایه نازک مبتنی بر مواد نیم رسانای چند جزئی مانند $\text{CuInxGa}_{(x-1)}\text{Se}_2$ ، تشکیل یک لایه بافر بین لایه جاذب نوع p و نوع n با مقاومت کم نقش مهمی ایفا می‌کند. ماده لایه بافر معمولاً لایه‌هایی با رسانایی نوع n است که بر اساس ترکیبات نیمه‌هادی با شکاف باند وسیع، مانند سولفید کادمیوم (CdS)، که از محلول‌های نمکی رسوب داده شده‌اند، ساخته می‌شوند. استفاده از لایه‌های CdS تهیه شده به روش تبخیر شیمیایی با ضخامت ۴۰ تا ۱۰۰ نانومتر در سلول‌های خورشیدی مبتنی بر ترکیبات $\text{CuInxGa}_{(x-1)}\text{Se}_2$ منجر به بازده حدود ۲۱٪ برای مبدل‌های نوری لایه نازک شد. به دلیل سمی بودن سولفید کادمیوم محققین به دنبال جایگزین‌هایی برای این ماده در قطعات الکترونیک می‌باشند. در حال حاضر، ترکیبات نیمه‌هادی از نوع B^3_2C^6_3 که در آن B^3_2 معادل Al ، Ga ، In و C^6_3 معادل S ، Se ، Te است) به طور گسترده برای استفاده در ایجاد سلول‌های خورشیدی لایه نازک مقاوم در برابر تابش با راندمان بالا مورد مطالعه قرار می‌گیرند. از این دسته از ترکیبات، ترکیب دوتایی In_2S_3 بسیار مورد توجه است. بنابراین هدف از این مقاله به دست آوردن داده‌های جدید در مورد ریزساختار و خواص نوری لایه‌های نازک In_2S_3 بسته به روش‌های تولید آنها می‌باشد. نتایج این کار می‌تواند باعث پیشرفت و توسعه فناوری سول‌های خورشیدی لایه نازک گردد.

یافته‌ها: یافته‌های علمی این تحقیق شامل تعیین ویژگی‌های ریزساختاری (ساختار کریستالی، ترکیب فازی و عنصری، مورفولوژی سطح، اندازه کریستالیت‌ها) و خواص نوری لایه‌های نازک In_2S_3 و تعیین رابطه آنها با شرایط تهیه و آماده سازی تشکیل لایه‌ها مانند دمای زیرلایه، ضخامت لایه و دما و زمان عملیات حرارتی می‌باشد. همچنین از مهمترین دستاوردهای این مقاله تعیین گذار فاز از ساختار کریستالی تتراگونال به ساختار کریستالی مکعبی بر حسب شرایط عملیات حرارتی انجام شده بر روی لایه‌های نازک می‌باشد که بوسیله آنالیز پراش پرتو ایکس و نتایج طیف‌سنجی رامان تأیید شده است. همچنین داده‌های تجربی در مورد تغییرات پهنای باند اپتیکی لایه‌های نازک In_2S_3 بسته به شرایط تولید و بازپخت نیز برای پیش‌بینی ویژگی‌های فیزیکی سلول‌های خورشیدی لایه نازک مبتنی بر آنها در این تحقیق دارای اهمیت می‌باشد.

نتیجه‌گیری: نتایج این تحقیق به صورت خلاصه بیانگر وابستگی مشخصات فیزیکی و ساختاری فیلم‌های لایه نازک In_2S_3 به شرایط تهیه و آماده سازی و شرایط مختلف دمایی و زمانی عملیات حرارتی بر روی آنها می‌باشد.

* نویسنده مسئول: حیدر ایزدشنان

نشانی: گروه فیزیک حالت جامد، واحد مرودشت، دانشگاه آزاد اسلامی، مرودشت، ایران

تلفن: ۰۹۱۷۷۱۰۲۵۹۶

پست الکترونیکی: izadneshan@ahoo.com

مقدمه

در سالهای اخیر فیلم‌های لایه نازک به صورت گسترده‌ای در سلول‌های خورشیدی مورد استفاده قرار می‌گیرند. فیلم‌های لایه نازک به روشهای مختلف مانند واکنش‌های اتمی، یونی، مولکولی، استفاده از لیزر و روش‌های شیمیایی بر روی زیرلایه‌ها تهیه می‌شوند. خواص ساختاری، شیمیایی، متالورژیکی و فیزیکی این قبیل مواد به پارامترهای لایه نشانی و ضخامت وابستگی زیادی دارد. فیلم‌های لایه نازک، محدوده‌ی ضخامت چند نانومتر تا ده میکرومتر را در برمی‌گیرد که برحسب مورد استفاده این فیلم‌های لایه نازک بهترین ضخامت انتخاب می‌شود. (۱)

از همین جهت بررسی خواص متعدد فیلم‌های نازک موردنیاز برای سلول خورشیدی کارآمد، مستلزم داشتن اطلاعات دقیق از مواد و همین‌طور بازبینی طیف وسیعی از امکانات تحلیلی می‌باشد. همچنین حساسیت بالای خواص فیلم به پارامترهای لایه نشانی می‌تواند بسیاری از نتایج نامطلوب را حاصل نماید؛ بنابراین جهت رسیدن به شرایط ایده آل تهیه سلول‌های خورشیدی لایه نازک انتخاب مواد و روش‌های لایه نشانی و همچنین شناسایی پارامترهای ساختاری و فیزیکی اهمیت ویژه‌ای دارد (۲).

افزایش عملکرد سلول‌های خورشیدی لایه‌نازک تا حد زیادی وابسته به کیفیت و ضخامت لایه بافر است. در سلول‌های استاندارد CIS بهینه‌سازی ضخامت لایه بافر بین لایه جاذب و لایه تماس با رسانای شفاف ضروری می‌باشد. انتقال فوتو حامل‌های تولیدی در پیوندگاه با کمینه تلفات حامل‌ها، برای به دست آوردن بازده بالا در سلول‌های خورشیدی کارآمد الزامی است. سلول‌های خورشیدی ناهمگون لایه‌نازک نور بیشتری در پیوندگاه جذب می‌کنند زیرا لایه بافر گاف بزرگ‌تر و ضخامت کمی نسبت به آن دارد. این قابل‌اطمینان‌ترین روش برای افزایش بهره‌وری سلول را فراهم می‌کند. اثرات سودمند دیگر لایه بافر اصلاح شیمی سطح جذب است که منجر به حفاظت فصل مشترک حساس در حین لایه نشانی لایه‌ی بعد می‌شود. خواص مطلوب فصل مشترک، شامل تطابق بین پارامترهای شبکه مربوط می‌شود (۳).

از این رو گزینه‌های انتخابی برای لایه بافر باید دارای گاف انرژی بزرگ‌تری برای جذب نور داشته باشند. همچنین فرایند لایه نشانی نیز باید این قابلیت را داشته باشد که از دید میکروسکوپی دارای یکنواختی با سطح لایه جاذب بوده و ایجاد یک هم ترازوی نوار رسانش با ماده جاذب بازده بهتری را تهیه خواهد کرد. سولفیدهای

دوتایی، اکسیدها و اکسی سولفیدها غالباً به‌عنوان گزینه‌های لایه‌ی بافر بدون کادمیوم در نظر گرفته می‌شوند. لایه‌های بافر همچنین پایداری سلول را افزایش می‌دهند، جاذب‌های نوری معمولاً حساس‌اند و نیاز به حفاظت در طول لایه نشانی و هنگام تماس با لایه‌های اکسید رسانای شفاف را دارند و به همین خاطر وجود لایه بافر می‌تواند به پایداری جاذب در سلول خورشیدی کمک نماید. علاوه بر این، لایه جاذب زمانی که توسط یک لایه بافر محافظت می‌شود. پایداری بیشتری در مجاورت هوا قرار دارد (۴).

ممنوعیت استفاده از کادمیوم در تجهیزات الکترونیکی یا الکترونیکی به دلیل سمی بودن این ماده توسط مقررات قانونی در کشورهای مختلف اجرا شده است که می‌تواند یک مشکل بازاریابی سلول‌های نازک CIGS بر پایه سولفید کادمیوم باشد (۵). گزینه‌های جایگزین برای مواد بافر باید دارای چهار خاصیت مشترک زیر باشند:

-جنس ماده باید نوع n باشد برای اینکه یک پیوندگاه به شکل P-N با لایه جاذب تنظیم شود.

-گاف گسترده‌ای برای جذب نور محدود داشته باشد.

-فرایند لایه نشانی باید کم‌هزینه و مناسب برای یک سطح بزرگ باشد. علاوه بر این روش قابلیت اثر ناپذیر ساختن حالت‌های سطح لایه جاذب را دارا باشد.

-در فرایند و انتخاب ماده لایه بافر باید هم ترازوی نوار رسانش با جاذب Cu(In,Ga)SO_2 با گاف انرژی از ۰ تا ۰/۴ فراهم شود. سولفید ایندیم ماده‌ای مهم برای کاربردهای اپتوالکترونیک و فتوولتائیک است و به دلیل پایداری آن، گاف انرژی بزرگ، رفتار رسانای حساس به نور^۱ (نور رسان) و خواص فوتولومیسانس^۲ (نورتایی) گزینه‌ای امیدوارکننده برای کاربردهای اپتوالکترونیک می‌باشد و به‌عنوان جایگزین غیر سمی مناسب برای سولفید کادمیوم در سلول‌های خورشیدی بر اساس Cu(In,Ga)SO_2 مطرح می‌باشد. علاوه بر زیست سازگار بودن با توجه به داشتن گاف بزرگ‌تر از سولفید کادمیوم انتقال نور بیشتری در ناحیه طول موج آبی دارد (۶).

علاقه به In_2S_3 به دلیل شرایط زیر است: الف) مقادیر شکاف باند این ترکیب نزدیک به مقدار بهینه برای توسعه مبدل‌های تابش خورشیدی است. ب) ضریب جذب نوری، در محدوده طیفی تابش خورشیدی، به مقادیر بزرگی ($\alpha > 10^4 \text{ cm}^{-1}$) می‌رسد که ظرفیت

^۱ Photoconductive

^۲ Photoluminescence

الکترونیک نوری و سلول های هورشیدی بر مبنای فیلم های لایه نازک می باشد.

مواد و روش ها

در این تحقیق فیلم های لایه نازک In_2S_3 با ضخامت های مختلف با استفاده از تارگت پلی کریستالی In_2S_3 و به روش تبخیر حرارتی در دمای 250°C درجه ساتیگراد و فشار 5.2×10^{-4} و آهنگ $5.2 \text{ \AA/s}$ بر روی زیرلایه های شیشه BK7 لایه نشانی شدند. سپس بر روی فیلم های لایه نازک تهیه شده پس از لایه نشانی، عملیات حرارتی در دمای $300-400^\circ\text{C}$ درجه ساتیگراد به مدت ۳۰ دقیقه و ۶۰ دقیقه انجام گرفت.

ساختار بلوری و ترکیب فازی نمونه ها با استفاده از آنالیز پراش پرتو ایکس (XRD) بر روی دستگاه DRON-3M در طرح براگ-برنتانو با تابش $\lambda = 1.5418 \text{ \AA}$ ($\text{CuK}\alpha$) با اندازه گیری زاویه 2θ در محدوده 10° تا 40° درجه و گام 0.01° درجه مورد مطالعه قرار گرفت. ترکیب فازی با استفاده از پایگاه داده کمیته مشترک استانداردهای پراش پودر (JCPDS) تجزیه و تحلیل شد. ریزساختار و مورفولوژی لایه ها با استفاده از میکروسکوپ الکترونی روبشی JEOL 6400 با سیستم آنالیز عنصری LINK مورد مطالعه قرار گرفت. ترکیب عنصری نمونه های لایه با استفاده از طیف سنجی اوزه الکترونی روبشی بر روی دستگاه PHI-660 (Perkin Elmer Physical Electronics) تجزیه و تحلیل شد. محل و حساسیت کاوش با پرتو یون آرگون به ترتیب 100 nm و 0.1 eV اتمسفر درصد بود. میکروسکوپ نیروی اتمی (AFM) برای مطالعه توپولوژی سطح لایه های سولفید ایندیوم استفاده شد که امکان دستیابی به داده هایی در مورد برجستگی های ریز لایه ها را فراهم می کند. اندازه گیری ها بر روی یک میکروسکوپ نیروی روبشی NT-206 از شرکت Microtestmachines انجام شد. طیف های عبوری نمونه های آزمایشی در محدوده طول موج 400 nm تا 2500 nm با وضوح 10 nm بر روی یک اسپکتروفتومتر اسکن (Cary-500 Varian) اندازه گیری شدند که به عنوان داده های تجربی مورد استفاده برای تجزیه و تحلیل ویژگی های نوری لایه های به دست آمده عمل کرد. طیف های پراکندگی رامان بر روی یک طیف سنج High End LOTIS (Nanofinder TII) که بر اساس یک میکروسکوپ کانفوکال پیاده سازی شده است، در طول موج 532 nm ، توان تابش لیزر 60 mW تا 3000 mW میکرووات در دمای اتاق اندازه گیری شدند. همچنین برای تجزیه

جذب بالای تابش فرودی در لایه های نازک را تضمین می کند. ج) امکان جایگزینی CdS سمی در تولید سلول های خورشیدی (۷). آر. اس مبین ۱ و سی. دی. لکاند ۲ با استفاده از روش چندبعدی و ساده جذب و واکنش لایه یونی متوالی لایه های نازک سولفید ایندیوم را به دست آورده بودند (۸). گاف انرژی نوری لایه های سولفید ایندیوم 2.3 eV بوده و مقاومت ویژه از مرتبه $10^9 \Omega \text{ cm}$ بوده است. استفاده از تری اتانول آمین و هیدرات هیدرازین کمپلکس سولفات ایندیوم و سولفید سدیم به عنوان ماده های اولیه نیز منجر به لایه های نازک سولفید ایندیوم شده و گاف انرژی نوری 2.7 eV شد. اثرات بازپخت در لایه های نازک سولفید ایندیوم با استفاده از روش جذب و واکنش لایه یونی متوالی رسوب شده توسط آر. انجیس ۳ و همکاران بررسی شده. نمونه ها توسط غوطه وری و زمان شستشوی مختلف تهیه شدند و دارای فاز آمورف بودند (۹).

بر ۴۱ و همکارانش فیلم های نازک سولفید ایندیوم با استفاده از روش اسپری تف کافت را آماده کرده اند. فرایند لایه نشانی را بر روی شیشه ی پیرکس با اسپری محلول کلرید ایندیوم $3-10 \text{ M}$ و تیورا $3-10 \times 10^{-3}$ انجام دادند. در حین لایه نشانی دمای زیرلایه در 340°C درجه سانتی گراد نگه داشته شد. آن ها نیتروژن را به عنوان «گاز حامل» نگه دارنده محلول و میزان جریان گاز در $3 \text{ cm}^3/\text{min}$ و 2 l/min استفاده کردند. رشد لایه های بلوری در فاز بتای-سولفید ایندیوم در جهت ترجیحی (۴۰۰) می باشد. میکرو آنالیز نوک دار لایه ها کسری از کالکوزن (۴۶٪) را نشان داده و با استفاده از تجزیه و تحلیل طیف سنجی فوتوالکترون اشعه ایکس نیز تأیید شده است (۱۰).

همچنین مطالعات دیگر نشان می دهد که ساختار کریستالی و فاز این ماده بستگی زیادی به مراحل لایه نشانی، آماده سازی و عملیات حرارتی پس از آن دارد (۱۰-۸).

در این مقاله نتایج حاصل از لایه نشانی و مشخصه یابی فیلم های لایه نازک سولفید ایندیوم، و وابستگی ساختاری و مشخصه های طیفی فیلم های نازک سولفید ایندیوم در شرایط مختلف لایه نشانی و عملیات حرارتی پس از آن بررسی می شود. همچنین طیف پراش پرتو ایکس، جذب نوری و پراکندگی رامان به عنوان روشی قابل اعتماد برای تجزیه و تحلیل و تست غیرمخرب ساختار فیلم های نازک استفاده می شود که تاکنون با این شرایط آماده سازی مورد ارزیابی قرار نگرفته است. از سوی دیگر این تحقیق می تواند به عنوان یک راهنمای مدل سازی جهت استفاده در دستگاه های

و تحلیل نتایج، از نرم‌افزار Origin برای ارائه تجزیه و تحلیل آماری تصاویر به‌دست‌آمده استفاده شد.

ما از طیف‌سنجی رامان و پراش پرتو ایکس برای ارزیابی تأثیر عملیات حرارتی بر ساختار لایه‌ها استفاده کردیم. مدهای فعال رامان که می‌توانند به عنوان مدهای 9A₁ و 14E طبقه‌بندی شوند، در طیف‌های رامان لایه‌های نازک In₂S₃ مشاهده شده‌اند. تغییرات در جایجایی رامان و پهنای باند لایه‌های نازک مختلف In₂S₃، تأثیر اثر بازپخت را نشان می‌دهد. نتایج طیف‌سنجی رامان و XRD نشان داد که اثر بازپخت، فاز تبلور را در دماهای بالا از تتراگونال به مکعبی تغییر می‌دهد.

نتایج

۱- طیف پراش پرتو ایکس (XRD)

نتایج طیف پراش پرتو ایکس ساختار بلوری و ترکیب فازی پلی‌کریستال‌های In₂S₃ مورد استفاده برای تولید لایه‌ها، و همچنین ریزساختار لایه‌های In₂S₃ تولیدشده با روش لایه‌نشانی حرارتی تحت خلاء و عملیات حرارتی بعدی ارائه شده است. مشخص شد که ماده پلی‌کریستالی سنتز شده In₂S₃ تک‌فازی با ساختار چهارگوشه‌ای و پارامترهای سلول واحد $a = 7.62 \pm 0.01$ Å و $c = 32.25 \pm 0.01$ Å مطابق با استاندارد بوده که نشان‌دهنده کارایی روش سنتز انتخاب‌شده برای تهیه ماده پلی‌کریستالی In₂S₃ و مناسب بودن نمونه‌های تولیدشده برای استفاده به عنوان ماده تبخیرشونده در تولید لایه‌های In₂S₃ با روش لایه‌نشانی حرارتی تحت خلاء است. شکل ۱ طیف‌های پرتو ایکس و تصاویر SEM لایه‌های نازک In₂S₃ را نشان می‌دهد که با روش تبخیر حرارتی تحت خلاء روی زیرلایه شیشه‌ای لایه‌نشانی شده و در دماها و زمان‌های مختلف عملیات حرارتی شده‌اند. عدم وجود پیک‌های مشخص در نوار پهن در محدوده زوایای ۰ تا ۱۰۰ درجه نشان می‌دهد که لایه‌ها دارای ساختار آمورف هستند و با افزایش ضخامت نیز آمورف باقی می‌مانند (شکل 1D). با این حال، باید توجه داشت که نتایج XRD نمی‌توانند به‌طور کامل وجود مقدار کمی بلور در حجم لایه‌ها را رد کنند. روش XRD نمی‌تواند پراش در بلورهایی که اندازه آنها در محدوده نانومتر است و مقدار آنها کمتر از سطح بحرانی است، یا اگر نانوذر بلوری اندازه‌ها و جهت‌های رشد ترجیحی متفاوتی دارند، را تشخیص دهد. تحلیل ترکیب شیمیایی نشان داد که عناصر اصلی نمونه‌های لایه‌ای ایندیم (In) و گوگرد (S) هستند، اما ترکیب عنصری پوشش‌ها با افزایش ضخامت تغییر می‌کند. اگرچه در لایه‌های مجاور سطح لایه‌ها، نمونه‌ها نسبت $S/In=1.5$ را نشان دادند که مشخصه ترکیب استوکیومتری In₂S₃ است، اما در ناحیه لایه نازک مجاور زیرلایه،

نسبت S/In تقریباً برابر با ۱ مشاهده شد که نشان‌دهنده کمبود گوگرد در این لایه‌هاست. انتظار می‌رود که مقداری ایندیم به صورت In₂O₃ یا In(OH)_x وجود داشته باشد (که با طیف‌سنجی اوژه قابل تشخیص نیست).

عملیات حرارتی بر روی فیلم‌های لایه نازک تهیه شده در دمای ۳۳۰ درجه سانتی‌گراد به مدت ۶۰ دقیقه منجر به تشکیل فاز تتراگونال In₂S₃ شد (شکل 1E). طیف‌های پرتو ایکس فیلم‌های لایه نازک عملیات حرارتی شده در دمای ۴۰۰ درجه سانتی‌گراد به مدت ۶۰ دقیقه (شکل 1F) پیک‌هایی را نشان می‌دهد که مربوط به فاز مکعبی In₂S₃ هستند (JCPDS. 05-0731). این نتایج با داده‌های لایه‌های In₂S₃ رشدیافته با روش رسوب شیمیایی مطابقت دارد (۸). پارامترهای سلول واحد برای لایه‌های نازک In₂S₃ پس از عملیات حرارتی $a = 7.61 \pm 0.01$ Å و $c = 32.31 \pm 0.01$ Å بود. مورفولوژی لایه‌ها بر اساس شرایط تشکیل در شکل ۱ (A,B,C) نشان می‌دهد که در همه موارد، لایه‌ها عاری از ریزترک‌ها تشکیل شده‌اند. همچنین این تصاویر نشان می‌دهد که اندازه دانه‌های بلوری با افزایش دمای عملیات حرارتی افزایش می‌یابد (۱۱).

۲- بررسی آنالیز AFM

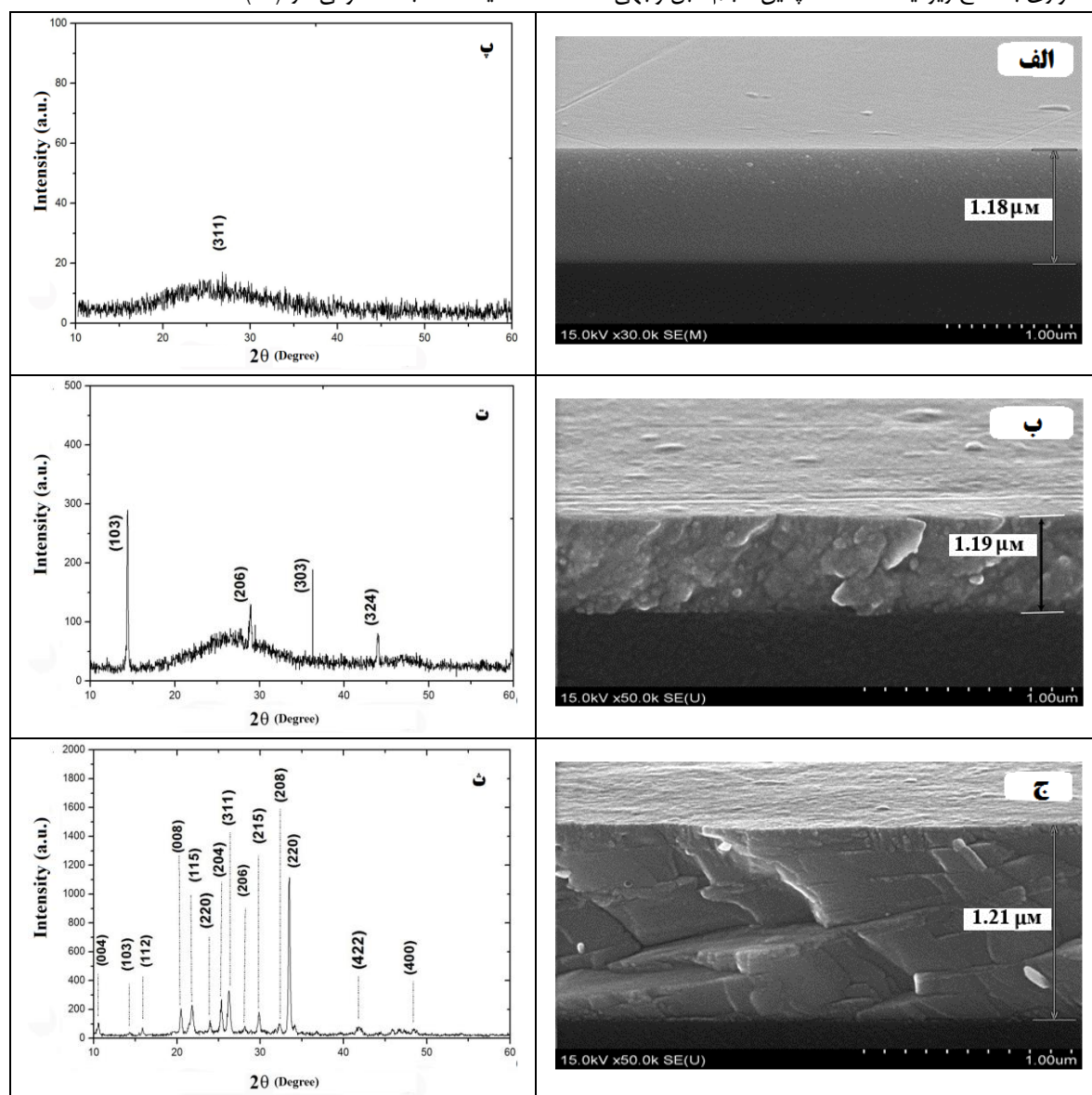
بررسی‌های AFM مورفولوژی نانوگرنولی همه نمونه‌های لایه‌ای را تأیید کرد. شکل ۲ تصاویر معمول AFM دوبعدی و سه‌بعدی لایه‌های نازک In₂S₃ با ضخامت ۱۲۰۰ نانومتر را بر اساس شرایط تولید نشان می‌دهد. لایه‌های نازک In₂S₃ پیوسته و یکنواخت هستند. نتایج تحلیل AFM لایه‌های In₂S₃ با ضخامت ۱۲۰۰ نانومتر بر اساس شرایط تشکیل در جدول ۱ ارائه شده است که برای لایه‌های با ضخامت‌های مختلف نیز ویژگی‌های مشابهی دارند. لایه‌های نازک In₂S₃ پیوسته و یکنواخت هستند. به عنوان نمونه نتایج تحلیل AFM لایه‌های In₂S₃ با ضخامت ۱۲۰۰ نانومتر بر اساس شرایط مختلف آماده سازی به عنوان نمونه در جدول ۱ ارائه شده است که برای لایه‌های با ضخامت‌های مختلف نیز ویژگی‌های مشابهی دارند.

نتایج آنالیز میکروسکوپ نیروی اتمی نشان می‌دهد که زبری متوسط (R_a) و زبری میانگین مربعات (R_{rms}) با افزایش دمای عملیات حرارتی افزایش می‌یابد. افزایش R_a و R_{rms} با افزایش دمای عملیات حرارتی ناشی از افزایش اندازه دانه‌های بلوری است. نتایج به‌دست‌آمده از بررسی AFM درک کامل‌تری از تأثیر پارامترهای عملیات حرارتی بر مورفولوژی سطح لایه‌های In₂S₃ مطابق با نیازهای سطحی برای ساخت سلول‌های خورشیدی لایه‌نازک ارائه می‌دهد.

از فیلم با دانه‌های بزرگ (در حدود چند میکرومتر) پر شده است (۱۲).

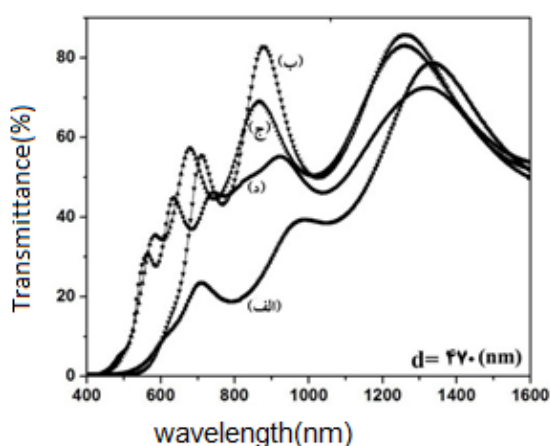
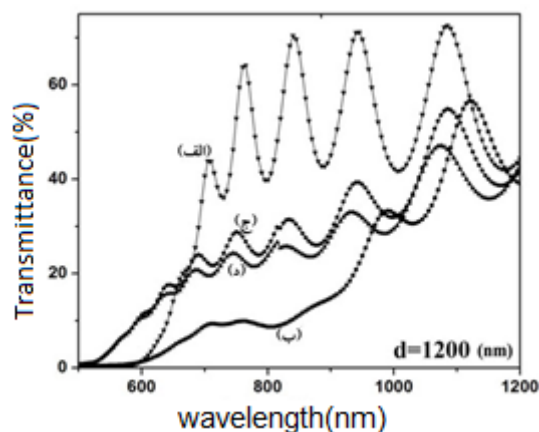
مطالعات میکروسکوپ الکترونی روبشی (SEM) روی لایه‌ها، وابستگی شدید ساختار سطحی فیلم‌های نازک In_2S_3 به دمای بازپخت را نشان می‌دهد. همچنین مشخص شد که دانه‌های رشد یافته به صورت نامتراکم در کنار هم قرار گرفته و سطحی با زبری بالا تشکیل داده‌اند. دانه‌ها از نظر الکتریکی اتصال خوبی به یکدیگر دارند که برای ایجاد پیوند p-n امری ضروری است. چگالی فیلم‌ها از اهمیت بالایی برخوردار است، زیرا از نفوذ اتم‌ها در طول رشد لایه‌های بافر و لایه‌های پنجره‌ای برای تولید سلول‌های خورشیدی فیلم نازک جلوگیری می‌کند که با نتایج تحقیقات مشابه همخوانی دارد (۱۳).

می‌توان مشاهده کرد که مورفولوژی سطحی فیلم‌های In_2S_3 با تغییر دمای بازپخت، تغییر می‌کند. در تمام موارد، فیلم‌های پیوسته‌ای متشکل از دانه‌های بلوری به دست آمد. فیلم‌های نازک رشد یافته در حالت اولیه، مورفولوژی یکنواختی با بلورک‌هایی در اندازه‌های بسیار کوچک نشان دادند که با تحلیل الگوهای پراش اشعه ایکس (XRD) مطابقت دارد. با افزایش دمای بازپخت به 400°C درجه سانتی‌گراد، فیلم دارای دانه‌های صفحه‌ای شکل می‌شود. همانطور که مشاهده می‌شود با افزایش دما دانه‌های کوچک به ذرات بزرگتری تبدیل می‌شوند. فیلم‌های بازپخت شده، تراکم بالایی داشته و عاری از حفره‌های ریز و ترک‌های میکروسکوپی هستند. این فیلم‌ها ساختار لایه‌ای دارند که بیشتر لایه‌ها موازی با سطح زیرلایه هستند. همچنین حجم قابل توجهی



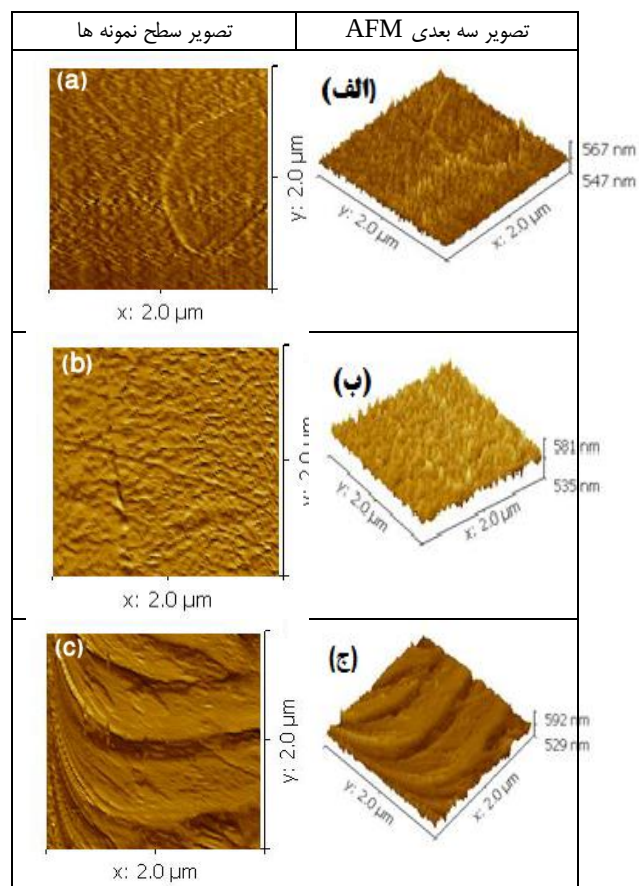
شکل ۱- تصاویر SEM لایه‌های نازک In_2S_3 (الف، ب، ج) و طیف پراش پرتو ایکس (پ، ت، ث) بر اساس شرایط آماده سازی: (الف و پ) قبل از عملیات حرارتی؛ (ب و ت) - عملیات حرارتی در 330°C درجه سانتی‌گراد به مدت ۶۰ دقیقه؛ (ج، ث) - عملیات حرارتی در 400°C درجه سانتی‌گراد به مدت ۶۰ دقیقه

شدند. بررسی طیف‌های عبور نشان داد که با افزایش دمای عملیات حرارتی، لبه نوار جذب ذاتی به ناحیه طول موج کوتاه‌تر جابه‌جا می‌شود، افزایش عبور مشاهده می‌شود و الگوی تداخل با کاهش ضخامت لایه‌ها واضح‌تر می‌شود. این موضوع، مانند داده‌های پرتو ایکس، نشان‌دهنده بهبود ساختار بلوری لایه‌های نازک In_2S_3 با افزایش دمای عملیات حرارتی است (۱۴).



شکل ۳- طیف‌های عبور فیلم‌های لایه نازک In_2S_3 با ضخامت ۴۷۰ و ۱۲۰۰ نانومتر: (الف) - قبل از عملیات حرارتی، (ب) - عملیات حرارتی در ۳۳۰ درجه سانتی‌گراد به مدت ۶۰ دقیقه، (ج) - عملیات حرارتی در ۴۰۰ درجه سانتی‌گراد به مدت ۳۰ دقیقه، (د) - عملیات حرارتی در ۴۰۰ درجه سانتی‌گراد به مدت ۶۰ دقیقه

همچنین تحلیل طیف‌های عبور و مشتق اول مقدار عبور نسبت به طول موج امکان تشخیص گذارهای نوری مستقیم و غیرمستقیم در لایه‌ها را فراهم کرد. در شکل ۴ دو نوع گذار به صورت دو پیک پهن در ناحیه طیفی ۵۰۰-۷۰۰ نانومتر بوسیله نرم افزار Origin8 رسم شده است. نتایج نشان می‌دهد که موقعیت این پیک‌ها به ضخامت لایه‌های In_2S_3 و شرایط تشکیل بستگی دارد (۱۵).



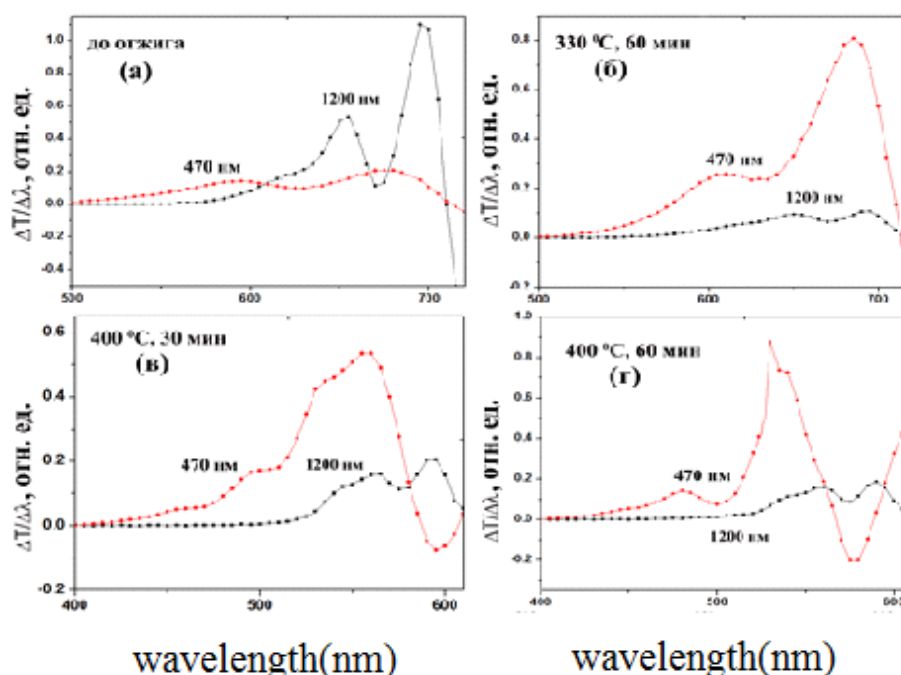
شکل ۲- تصاویر آنالیز AFM دوبعدی و سه‌بعدی لایه‌های نازک In_2S_3 با ضخامت ۱۲۰۰ نانومتر: (الف) - قبل از عملیات حرارتی، (ب) - عملیات حرارتی در ۳۳۰ درجه سانتی‌گراد به مدت ۶۰ دقیقه، (ج) - عملیات حرارتی در ۴۰۰ درجه سانتی‌گراد به مدت ۶۰ دقیقه

جدول ۱- نتایج تحلیل AFM لایه‌های In_2S_3 با ضخامت ۱۲۰۰ نانومتر بر اساس شرایط مختلف آماده سازی

پارامتر	قبل از عملیات حرارتی	۳۳۰ °C (60 min)	۴۰۰ °C (60 min)
مینیمم زبری	547.24 nm	534.83 nm	529.38 nm
ماکزیمم زبری	566.79 nm	581.36 nm	591.98 nm
Ra میانگین زبری	1.30 nm	3.74 nm	3.97 nm
زبری میانگین مربعات, Rrms	1.68 nm	4.76 nm	5.06 nm

۳- خواص اپتیکی فیلم‌های لایه نازک In_2S_3

در شکل ۳ طیف‌های عبور فیلم‌های لایه نازک In_2S_3 با ضخامت ۴۷۰ و ۱۲۰۰ نانومتر به عنوان نمونه در محدوده ۵۰۰ تا ۲۰۰۰ نانومتر در دمای اتاق نشان داده شده است. همه لایه‌های بررسی‌شده با ضرایب عبور بالا ($T \sim 60-85\%$) در محدوده طول موج ۸۰۰-۲۰۰۰ نانومتر و لبه جذب مشخص مشخصه‌گذاری



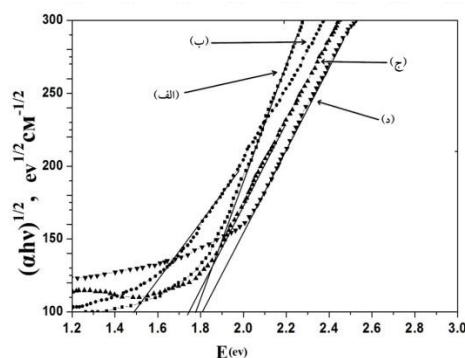
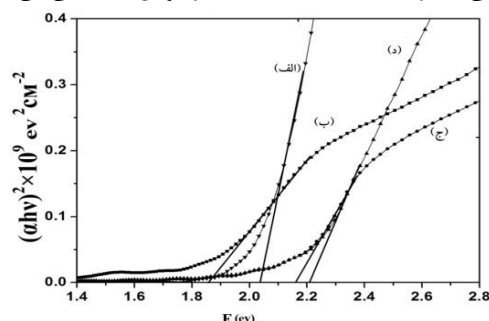
شکل ۴ - مشتق اول مقدار طیف عبور برای لایه‌های In_2S_3 با ضخامت ۴۷۰ نانومتر و ۱۲۰۰ نانومتر

(ب) - عملیات حرارتی در 330°C ، ۶۰ دقیقه، (ج) - عملیات حرارتی در 400°C ، ۳۰ دقیقه، (د) - عملیات حرارتی در 400°C ، ۶۰ دقیقه

ضریب جذب در نزدیکی لبه جذب حدود $10^3 - 10^4 \text{ cm}^{-1}$ بود. تحلیل توابع $(\alpha E)^n = f(E)$ در شکل ۵ نشان داده شده است. نتایج نشان می‌دهد که بخش‌های جداگانه نقاط بدست آمده در نمودارهای $(\alpha E)^2 - E$ مربوط به گذارهای نوری مستقیم و $(\alpha E)^{1/2} - E$ مربوط به گذارهای نوری غیرمستقیم خطی می‌شوند.

در شکل ۶ وابستگی انرژی عرض ممنوعه مستقیم (الف) و غیرمستقیم (ب) لایه‌های نازک In_2S_3 با ضخامت‌های مختلف به شرایط تشکیل ترسیم شده است. دمای عملیات حرارتی 330°C درجه سانتی‌گراد، که در آن لایه‌های نازک In_2S_3 کمترین مقدار انرژی عرض ممنوعه را دارند، مطابق با داده‌های ادبیات مربوط به گذار فازی از ساختار چهارگوشه‌ای به مکعبی است. افزایش عرض ممنوعه با کاهش ضخامت لایه‌ها را می‌توان به وجود ترکیب‌های مختلف دانه‌های بلوری و/یا تغییرات ساختاری آنها نسبت داد. این نتیجه را می‌توان با وجود اکسیژن در لایه‌ها، اثر اندازه کوانتومی و اکسیداسیون که در لایه‌های نازک In_2S_3 رخ می‌دهد، توضیح داد.

این نتایج با داده‌های موجود در پژوهش‌های قبل برای فیلم‌های لایه نازک تولیدشده با روش رسوب شیمیایی مطابقت خوبی دارد. بررسی‌های پرتو ایکس، مورفولوژی سطح وجود دو نوع گذار نوری بر اساس دمای عملیات حرارتی نشان می‌دهد که عملیات حرارتی منجر به گذار ساختاری از فاز تراگونال به مکعبی می‌شود.



شکل ۵ (I) -- وابستگی طیفی $(\alpha E)^{1/2}$ به انرژی فوتون E و (II) وابستگی طیفی $(\alpha E)^2$ به انرژی فوتون E برای لایه‌های In_2S_3 با ضخامت ۱۲۰۰ نانومتر: (الف) - قبل از عملیات حرارتی،

تغییراتی در نحوه جذب نور توسط ماده تأثیر گذاشته و باعث جابه‌جایی لبه جذب می‌شود (۱۸).

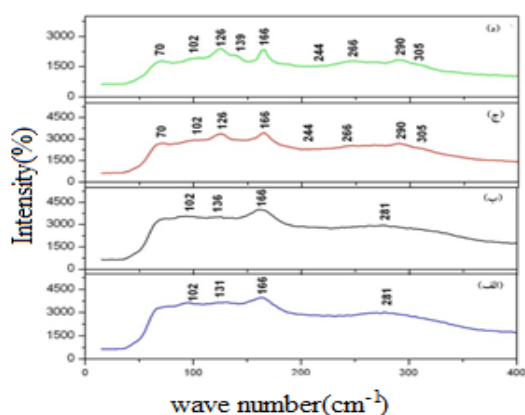
ویژگی‌های نوری:

خصوصیات نوری مواد، از جمله لبه جذب، به شدت به ساختار اتمی و الکترونیکی آن‌ها وابسته است. عملیات حرارتی با تغییر این ساختارها می‌تواند تأثیر چشمگیری بر رفتار نوری ماده بگذارد (۱۹).

در حالت کلی به کار بردن عملیات حرارتی روشی برای کنترل ریزساختار و خواص الکترونیکی مواد است که در نهایت بر موقعیت لبه جذب آن‌ها تأثیر می‌گذارد. جابه‌جایی لبه جذب به سمت طول‌موج‌های بلندتر (انرژی‌های پایین‌تر) نتیجه رایج عملیات حرارتی است، به‌ویژه زمانی که منجر به ساختاری منظم‌تر و عاری از نقص شود.

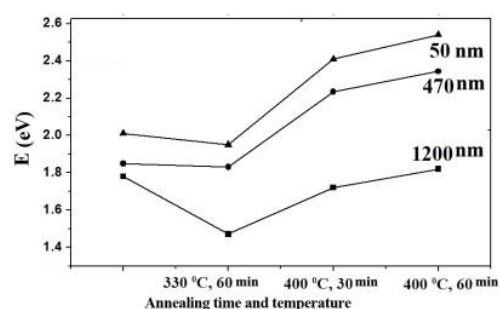
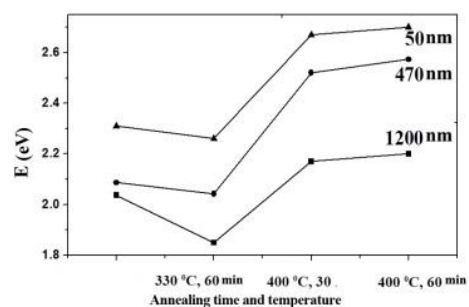
۵- طیف سنجی رامان

طیف‌سنجی پراکندگی رامان^۱ که ابزاری مهم در فیزیک حالت جامد است، امکان توصیف مدهای ارتعاشی فونون‌ها در نمونه‌های مورد بررسی، به‌دست آوردن اطلاعات درباره ترکیب شیمیایی ماده، وجود فازهای خارجی و نواحی با نظم بلوری موضعی را فراهم می‌کند. در مقایسه با روش کلاسیک تحلیل فازی پرتو ایکس، این روش برای بررسی شبکه بلوری ماده امیدوارکننده‌تر است زیرا امکان ثبت مقادیر بسیار کم فازهای مختلف را فراهم می‌کند. در شکل ۷ به عنوان نمونه طیف‌های پراکندگی رامان لایه‌های In₂S₃ با ضخامت ۱۲۰۰ نانومتر بر اساس شرایط تشکیل نشان داده شده است.



شکل ۷ -- طیف‌های رامان فیلم‌های لایه نازک In₂S₃

(۱۲۰۰ نانومتر): (الف) - قبل از عملیات حرارتی، (ب) - عملیات حرارتی در ۳۳۰ °C، ۳۰ دقیقه، (ج) - عملیات حرارتی در ۴۰۰ °C، ۳۰ دقیقه، (د) - عملیات حرارتی در ۴۰۰ °C، ۶۰ دقیقه



شکل ۶ - وابستگی انرژی (الف) عرض ممنوعه مستقیم و (ب) عرض ممنوعه غیرمستقیم به شرایط تشکیل برای لایه‌های نازک In₂S₃ با ضخامت‌های مختلف

در خصوص دلایل کاهش لبه جذب با افزایش دمای عملیات حرارتی می‌توان توضیح زیر را ارائه نمود.

کاهش نقص‌های ساختاری:

فرایند عملیات حرارتی می‌تواند تعداد نقص‌های موجود در ساختار بلوری ماده (مانند جاهای خالی یا نابجایی‌ها) را کاهش دهد. این نقص‌ها می‌توانند به عنوان «حالت‌های تله» عمل کنند و فوتون‌ها را در انرژی‌های پایین‌تر از گاف انرژی جذب نمایند. با کاهش این نقص‌ها، جذب نور در انرژی‌های پایین کمتر شده و در نتیجه، لبه جذب به سمت طول‌موج‌های بلندتر (انرژی‌های پایین‌تر) جابه‌جا می‌شود (۱۶).

رشد دانه‌ها:

عملیات حرارتی همچنین می‌تواند باعث رشد دانه‌ها در مواد چندبلوری شود. با بزرگ‌تر شدن دانه‌ها، ساختار کلی ماده منظم‌تر شده و سطوح انرژی تعریف‌شده‌تری پیدا می‌کنند. این تغییر می‌تواند منجر به باریک‌تر شدن گاف انرژی و تغییر لبه جذب به سمت انرژی‌های پایین‌تر شود (۱۷).

تغییرات در ساختار الکترونیکی:

همچنین عملیات حرارتی می‌تواند ساختار نواری انرژی ماده را تغییر دهد. این تغییرات ممکن است ناشی از تحول در پیوندهای اتمی، چگالی حالت‌ها، یا ایجاد سطوح انرژی جدید باشد. چنین

۱ Raman spectroscopy

قبل از عملیات حرارتی و پس از عملیات حرارتی در دمای ۳۳۰ درجه سانتیگراد به مدت ۳۰ دقیقه، در طیف‌های رامان بازتاب‌هایی در ۷۰، ۱۰۲، ۱۳۱ و 154 cm^{-1} مشاهده می‌شود که مربوط به ساختار چهارگوشه‌ای (فاز β) ترکیب In_2S_3 است. پس از عملیات حرارتی در دمای ۴۰۰ درجه سانتیگراد به مدت ۳۰ و ۶۰ دقیقه، بازتاب‌های اضافی در ۱۲۶، ۲۴۴ و 266 cm^{-1} در طیف‌ها ظاهر می‌شود که مربوط به ساختار مکعبی (فاز γ) In_2S_3 است. همچنین مشاهده شد که شکل و شدت بازتاب‌های به دست آمده به دما و زمان عملیات حرارتی لایه‌ها بستگی دارد.

جدول ۲. مقایسه فرکانس‌های مشاهده‌شده تجربی در طیف‌های رامان لایه‌های In_2S_3 با ضخامت ۱۲۰۰ نانومتر با داده‌های ادبیات: (الف) - قبل از عملیات حرارتی، (ب) - عملیات حرارتی در ۳۳۰ درجه سانتیگراد به مدت ۶۰ دقیقه، (ج) - عملیات حرارتی در ۴۰۰ درجه سانتیگراد به مدت ۳۰ دقیقه، (د) - عملیات حرارتی در ۴۰۰ درجه سانتیگراد به مدت ۶۰ دقیقه

مکعبی In_2S_3 (cm^{-1})	تراگونال In_2S_3 (cm^{-1})	تراگونال In_2S_3 (cm^{-1})	بلوری $\text{In}_{21.33}\text{S}_{32}$ (cm^{-1})	(د) (cm^{-1})	(ج) (cm^{-1})	(ب) (cm^{-1})	(الف) (cm^{-1})
	42						
	57						
	61						
	70			70	70	70	
	102			102	102	102	102
127	113			126(F_{2g})	126(F_{2g})		
	137		132	139		136	131
165			159	166(F_{2g})	166(F_{2g})	166(F_{2g})	166(F_{2g})
	180		177	179			
	196			198	198		
	217						
245	244	243	245	244	244	252	
266	266	263		266(E_g)	266(E_g)		
306	306	306	305	305	305	306	
325	326	324				325(F_{2g})	
			358				
366	367	365		366(A_{1g})			

ساختار بلوری چهارگوشه‌ای به مکعبی مشاهده می‌شود که با بررسی‌های پرتو ایکس تأیید می‌شود (۲۱).

نتیجه گیری

این پژوهش نشان داد که عملیات حرارتی با کاهش نقص‌های ساختاری مانند جاهای خالی و نابجایی‌ها که به عنوان حالت‌های تله برای جذب فوتون‌ها عمل می‌کنند، باعث کاهش جذب نور در انرژی‌های پایین و جابه‌جایی لبه جذب به سمت طول موج‌های

نتایج مشابهی در بررسی تأثیر اثر عملیات حرارتی بر ساختار بلوری و ترکیب فازی لایه‌های In_2S_3 با ضخامت‌های مختلف به دست آمد. مشخص شد که شدت و تعداد پیک‌ها با ضخامت افزایش می‌یابد و بازتاب‌های مشاهده‌شده در طیف‌های رامان را می‌توان به عنوان مدهای A_{1g} و E_{1g} که مشخصه طیف‌های بلورهای In_2S_3 هستند، طبقه‌بندی کرد. عملیات حرارتی لایه‌های In_2S_3 منجر به تغییر شکل بازتاب‌ها می‌شود و گذار فازی از

۵- ماهیت گذارهای نوری در فیلم‌های In₂S₃ بسته به حالت‌های تولید مورد مطالعه قرار گرفت. نشان داده شد که فیلم‌ها دارای ضریب جذب نوری $\alpha = 10^3 - 5 \times 10^4 \text{ cm}^{-1}$ هستند و گذارهای نوری مستقیم و غیرمستقیم دارند. ویژگی‌های گذارهای نوری به‌دست‌آمده در ناحیه لبه جذب اساسی با نتایج تحلیل نظری ساختار نواری تک بلورهای حجمی سازگار است.

۶- نشان داده شده است که ویژگی‌های نوری لایه‌های نازک In₂S₃ به شرایط تشکیل آنها بستگی دارد. بر اساس الگوهای تعیین‌شده، شرایط برای به‌دست آوردن لایه‌هایی با ضخامت ۴۰ تا ۱۵۰۰ نانومتر با شکاف نواری در محدوده ۱,۴۷ تا ۲,۷۰ الکترون‌ولت بهینه شده و الزامات استفاده از آنها به عنوان لایه‌های بافر و جذب در ایجاد سلول‌های خورشیدی لایه نازک بر اساس آنها را برآورده می‌کند.

۷- برای اولین بار، با استفاده از طیف‌سنجی رامان (طیف‌های پراکندگی رامان)، تأثیر اثر بازپخت حرارتی بر ساختار بلوری و ترکیب فازی لایه‌های نازک In₂S₃ با ضخامت‌های مختلف مورد مطالعه قرار گرفت. بازتاب‌های مشاهده‌شده را می‌توان به عنوان حالت‌های A₁ و E₁، که مشخصه طیف‌های بلورهای In₂S₃ هستند، طبقه‌بندی کرد. مشخص شد که تغییرات در جابجایی و پهنای بازتاب‌ها برای لایه‌ها به دلیل دما و زمان عملیات حرارتی است. نتایج مطالعات نشان داد که بازپخت حرارتی لایه‌های نازک In₂S₃ منجر به گذار فاز از ساختار بلوری تتراگونال به مکعبی می‌شود که توسط داده‌های اشعه ایکس تأیید شده است.

ملاحظات اخلاقی پیروی از اصول اخلاق پژوهش

همکاری مشارکت‌کنندگان در تحقیق حاضر به صورت داوطلبانه و با رضایت آنان بوده است.

حامی مالی

هزینه تحقیق حاضر توسط نویسندگان مقاله تامین شده است.

مشارکت نویسندگان

انجام آزمایش‌ها، تحلیل داده‌ها و نتایج، و نگارش نهایی توسط حیدر ایزدشاه انجام شده است.

تعارض منافع

بنابر اظهار نویسندگان، مقاله حاضر فاقد هرگونه تعارض منافع بوده است.

References

- Reddy KK, Reddy PR, Reddy PS. Annealing temperature induced phase transformation in In₂S₃ thin films and its impact on optical and electrical properties. Journal of Alloys and Compounds. 2020;831:154788.
- Souilah M, Lafane S, Abdelli-Messaci S, Kerdja T. Structural and optical properties of thermally evaporated In₂S₃ thin films: Effect of annealing in sulfur atmosphere. Materials Science in Semiconductor Processing. 2019;101:32–39.

بلندتر می‌شود. همچنین، رشد دانه‌ها در مواد چندبلوری و منظم‌تر شدن ساختار ماده منجر به باریک‌تر شدن گاف انرژی و تغییر لبه جذب می‌گردد. علاوه بر این، تغییرات در ساختار الکترونیکی ناشی از تحول پیوندهای اتمی و چگالی حالت‌ها بر نحوه جذب نور تأثیر گذاشته و لبه جذب را جابه‌جا می‌کند. در کل، عملیات حرارتی با کنترل ریزساختار و خواص الکترونیکی مواد، موجب جابه‌جایی لبه جذب به سمت انرژی‌های پایین‌تر و طول‌موج‌های بلندتر می‌شود، به‌ویژه هنگامی که ساختار ماده منظم‌تر و عاری از نقص شود. همچنین دستاوردهای مهم این تحقیق عبارتند از:

۱- تکنیکی برای تولید لایه‌های نازک In₂S₃ با ضخامت ۴۰ تا ۱۵۰۰ نانومتر با استفاده از تبخیر حرارتی در خلاء (دمای زیرلایه ۲۰۰ تا ۲۴۰ درجه سانتیگراد) و به دنبال آن عملیات حرارتی در محدوده دمایی ۳۰۰ تا ۴۰۰ درجه سانتیگراد به مدت ۳۰ تا ۶۰ دقیقه توسعه داده شده است که از نظر ترکیب عنصری و ساختار کریستالی با کریستال‌های حجمی مطابقت دارند.

۲- مشخص شده است که لایه‌های نازک قبل از عملیات حرارتی آمورف هستند. پس از عملیات حرارتی لایه‌های In₂S₃ در دمای ۳۳۰ درجه سانتیگراد به مدت ۳۰ دقیقه، بازتاب‌های ۱,۰۳، ۲,۱۴، ۳,۲۴ و ۳,۰۳ در الگوهای پراش پرتو ایکس ظاهر می‌شوند که مربوط به فاز تتراگونال کریستالی In₂S₃ است. عملیات حرارتی در دمای ۴۰۰ درجه سانتیگراد به مدت ۳۰ و ۶۰ دقیقه منجر به ظهور فازهای تتراگونال و مکعبی در لایه‌ها می‌شود که با داده‌های موجود در مقالات پیشین سازگار است.

۳- مطالعات مورفولوژی سطح نشان داد که لایه‌های نازک از نظر نوری همگن و بدون سوراخ و ریزترک هستند. اندازه دانه با افزایش دما و زمان عملیات حرارتی از ۵۰ نانومتر به ۷۵ نانومتر افزایش می‌یابد. چگالی نابجایی‌ها با افزایش دمای عملیات حرارتی از ۳۳۰ درجه سانتیگراد (۶۰ دقیقه) به ۴۰۰ درجه سانتیگراد (۶۰ دقیقه) از $4 \times 10^{10} \text{ (cm}^{-2}\text{)}$ تا $1.7 \times 10^{10} \text{ (cm}^{-2}\text{)}$ تغییر می‌کند.

۴- تجزیه و تحلیل فیلم‌ها با میکروسکوپ نیروی اتمی نشان داد که با افزایش دما و زمان بازپخت، زبری متوسط و جذر میانگین مربعات به ترتیب از ۱,۳۰ نانومتر، ۱,۶۸ نانومتر به ۳,۹۷ نانومتر، ۵,۰۶ نانومتر افزایش می‌یابد. این نتایج درک کامل‌تری از تأثیر پارامترهای بازپخت بر ویژگی‌های مورفولوژیکی فیلم‌های نازک In₂S₃ مطابق با الزامات سطح برای ایجاد دستگاه‌های اپتوالکترونیکی ارائه می‌دهد.

3. Ouerghi A, Ben Nasr T, Turki-Kamoun N. Effect of post-deposition annealing on the properties of In₂S₃ thin films for photovoltaic applications. *Thin Solid Films*. 2021;732:138780.
4. Mariappan R, Ponnuswamy V, Ragavendar M, Chandra Bose A. Thermal annealing induced enhancement in the optical and electrical properties of In₂S₃ thin films deposited by thermal evaporation. *Journal of Materials Science: Materials in Electronics*. 2018;29(12):10296–10304.
5. Gedi S, Reddy VRM, Pejjai B, Park C. Impact of annealing on the microstructural and optoelectronic properties of thermally evaporated In₂S₃ thin films for buffer layer applications. *Solar Energy Materials and Solar Cells*. 2016;157:28–36.
6. Nguyen TKT, Le HT, Dao VA, Choi J, Yi J. Tuning the optical bandgap and microstructure of In₂S₃ thin films through post-deposition annealing for solar cell applications. *Applied Surface Science*. 2022;571:151324.
7. Moutinho HR, Dhere RG, Jiang CS, Al-Jassim MM. Effects of annealing on the properties of In₂S₃ thin films grown by thermal evaporation. *Journal of Vacuum Science & Technology A*. 2015;33(2):021502.
8. Pathan HM, Lokhande CD, Kulkarni SS, Amalnerkar DP, Seth T, Han SH. Annealing effects on In₂S₃ thin films. *Materials Research Bulletin*. 2005;40(6):1018–1024.
9. Ranjith R, John TT, Kartha CS, Vijayakumar KP, Abe T, Kashiwaba Y. Post-deposition annealing effect on In₂S₃ thin films deposited using SILAR technique. *Materials Science in Semiconductor Processing*. 2007;10(1):49–55.
10. Izadneshan H, Gremenok VF. Influence of annealing on the optical parameters of In₂S₃ thin films produced by thermal evaporation. *Journal of Applied Spectroscopy*. 2014;81(2):297–300.
11. Chaudhary M, Doiphode V, Shinde P, Punde A, Vairale P, Hase Y, Waghmare A, Prasad M, Jadkar S. Structural and optical properties of In₂S₃ thin films deposited by sulfurization-assisted thermal evaporation method. *Materials Today: Proceedings*. 2021;39(5):1889–1893.
12. Tiss B, Benfraj M, Bouguila N, Kraini M, Alaya S, Cristea D, Croitoru C, Craciun V, Craciun D, Prepelita P, Velicu IL, Tiron V, Moura C, Cunha L. The effect of vacuum and air annealing in the physical characteristics and photocatalytic efficiency of In₂S₃:Ag thin films produced by spray pyrolysis. *Materials Chemistry and Physics*. 2021;270:124838.
13. Song JE, Hwang SK, Park JH, Kim JY. A thin In₂S₃ [interfacial layer for reducing defects and roughness of Cu₂ZnSn\(S,Se\)₄ thin-film solar cells](#). *ChemSusChem*. 2022;15(4):e202102350.
14. Amin RM, Zaki MF, Elkalashy SI, Al-Naggar TI. Impact of annealing temperature on optical, morphological, and surface characteristics of PC/PBT blend exposed to alpha particles. *Radiation Physics and Chemistry*. 2024;218:111569.
15. Timoumi A, Belhadj W, Alamri SN, Al Turkestani MK. Experimental studies and new theoretical modeling on the properties of In₂S₃ thin films. *Optical Materials*. 2021;118:111238.
16. Lu H, Dong H, Jiao S, Nie Y, Wang X, Wang D, Gao S, Wang J, Su S. The influence of annealing temperature on structure, morphology and optical properties of (In_xGa_{1-x})₂O₃ films. *ECS Journal of Solid State Science and Technology*. 2019;8(7):Q3171–Q3175.
17. Raju TB, Kumar BR, Ramakrishna Y. Effect of post-annealing temperature on microstructural, morphological and optical properties of sol–gel spin coated Cu doped SnO₂ thin films. *Brazilian Journal of Physics*. 2024;54:238.
18. Zhou X, Chen P, Wu Z, Xu F, Yang G, Liu B, Tan C, Zhang L, Zhang R, Zheng Y. Influence of thermal annealing on electrical and optical properties of indium tin oxide thin films. *Materials Science in Semiconductor Processing*. 2014;26:588–592.
19. Hind PA, Patil PS, Gummagol NB, Rajendra BV. Influence of annealing on [microstructure, nonlinear optical and electrical properties of spray pyrolyzed Sn_{0.97}La_{0.03}O₂ films](#). *Optical Materials*. 2022;125:112080.
20. Ali AI, Ibrahim M, Hassen A. New fabrication method for di-indium tri-sulfuric (In₂S₃) thin films. *Scientific Reports*. 2022;12:7033.
21. Sim Y, Kim J, Chang SH, Choi CJ, Seong MJ. Highly luminescent In₂S₃ thin films with preferred growth direction of [1 0 3]. *Applied Surface Science*. 2021;555:149706.