

Research Paper

# Simulation and Fabrication of Zirconium Dioxide/Gold/Zirconium Dioxide Spectrally Selective Coating<sup>1</sup>

Hamid Motahari\*<sup>2</sup> and Mojtaba Allahpoor<sup>3</sup>

Received: 2024.10.18

Revised: 2024.12.12

Accepted: 2024.12.29

## 1. Introduction

The increase in electricity consumption for cooling buildings in the residential and office sectors is challenging in summer. Increasing the number of cooling devices and reducing cooling temperatures for greater comfort in summer, are among the main reasons for this imbalance. To address this imbalance challenge, various solutions have been proposed and examined, which focus on electricity consumption on the one hand and electricity production on the other. In general, buildings can be protected against environmental thermal radiation as a passive solution. Heat-reflective smart glasses and spectrally selective coatings have recently gained attention for their potential to reduce electrical energy consumption. In this research, theoretical and experimental investigation of multi-layered coatings on glass has been investigated which is called spectrally selective glass. The aim was to prevent the entry of infrared thermal radiation and maintain transparency in the visible spectrum. High infrared reflectivity and controlling radiation in the visible range can be gained by spectrally selective glass. The optical properties of thin-film structures depend on the material type, the deposited layers thickness, and the sequence of the layers. The principles of multilayer thin film structure theory have been used for this study.

## 2. Methodology

In the present study, simulation and vacuum deposition techniques for fabrication were used. Using the theoretical method of multilayer thin film structures theory, the three layers of zirconium dioxide/gold/zirconium dioxide have been simulated on glass. The optical constants, such as the refractive index and extinction coefficient, were derived from Johnson and

<sup>1</sup> <https://doi.org/10.22051/ijap.2024.48643.1431>

<sup>2</sup> Assistant Professor, Department of physics, Yazd University, Yazd, Iran. (Corresponding Author).

Email: H.motahari@yazd.ac.ir

<sup>3</sup> MSc Graduated, Department of physics, Yazd University, Yazd, Iran. Email: mojtaba.allahpoor@stu.yazd.ac.ir



Christy, as well as Wood. After the optimization, the samples were made by the electron beam in the vacuum chamber of the physical vapor deposition system. The UV-Vis-NIR optical reflectivity and absorption properties of a three-layer structure were analyzed by using a UV-Vis spectrophotometer.

### 3. Results and Discussion

The results of the simulation show the effect of dielectric layer thickness. The peak transmittance shifts toward longer wavelengths as the thickness increases. The control of optical properties such as transmission, reflection, and absorption are essential for advanced multilayer thin film structures. The experimental results show a strong correlation with the simulation data. The simulations show the optimum thickness of the three layers of zirconium dioxide/gold/zirconium dioxide as a spectrally selective smart glass was about 160/20/160 nm. Also, in the electron beam PVD coating of a three-layer zirconium dioxide/gold/zirconium dioxide structure with layer thicknesses of 160/20/160 nanometers, the peak transmittance is centered in the visible spectral range. The NIR reflectance was about 80–90%.

### 4. Conclusion

The simulations show that this three-layer structure with a thickness of about 160 nm for ZrO<sub>2</sub> and a gold coating thickness of about 20 nm is a proper choice. The sample made in the laboratory for this structure with a thickness of 160/20/160 nm matches well with the spectrum of the simulated samples. There is a slight deviation due to experimental error sources. The simulated and fabricated sample has more than 50% transmittance in the visible spectral range from 500 to 700 nm. There is a transmittance peak of more than 70% in the center of the visible range. The transmittance is less than 20% in the near-infrared spectrum range for the wavelength of 750 nm to 1100 nm. Therefore, this structure is proper as a reflector of infrared thermal radiation. This structure is a good spectrally selective glass. It can be used as a smart glass for radiant cooling purposes.

**Keywords:** *Spectrally Selective Coating, Smart Glass, Thermal Radiation, Infra-Red, Zirconium Oxide.*

### References

- [1] Guillén, C. and Herrero, "SnO<sub>x</sub>/Ag/SnO<sub>x</sub> heat-reflector coatings prepared by DC sputtering", *SN Applied Sciences* 2(10), 1717, 2020. <https://doi.org/10.1007/s42452-020-03508-1>
- [2] Javed, F., Javed, S., Mujahid, M., ul Inam, F. and Bhatti, A.S., "Modified optical characteristics of TiO<sub>2</sub>/Au/TiO<sub>2</sub> thin composite films", *Ceramics International* 45(17), 22336-22343, 2019. <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2019.07.262>

- [3] Dalapati, G.K., Masudy-Panah, S., Chua, S.T., Sharma, M., Wong, T.I., Tan, H.R. and Chi, D., "Color tunable low cost transparent heat reflector using copper and titanium oxide for energy saving application", *Scientific reports* 6(1), 20182, 2016. <https://doi.org/10.1038/srep20182>
- [4] Leftheriotis, G., Yianoulis, P. and Patrikios, D., "Deposition and optical properties of optimised ZnS/Ag/ZnS thin films for energy saving applications", *Thin solid films* 306(1), 92-99, 1997. [https://doi.org/10.1016/S0040-6090\(97\)00250-2](https://doi.org/10.1016/S0040-6090(97)00250-2)
- [5] Hassan, M.F., Sagor, R.H., Tathfif, I., Rashid, K.S. and Radoan, M., "An optimized dielectric-metal-dielectric refractive index nanosensor", *IEEE Sensors Journal* 21(2), 1461-1469, 2020. <http://doi.org/10.1109/JSEN.2020.3016570>
- [6] Kim, S. and Lee, J.L., "Design of dielectric/metal/dielectric transparent electrodes for flexible electronics", *Journal of Photonics for Energy* 2(1), 021215-021215, 2012. <https://doi.org/10.1117/1.JPE.2.021215>
- [7] Çetinkaya, Ç., Çokduygular, E., Güzelçimen, F. and Kınacı, B., "Functional optical design of thickness-optimized transparent conductive dielectric-metal-dielectric plasmonic structure", *Scientific Reports* 12(1), 8822, 2022. <https://doi.org/10.1038/s41598-022-13038-y>
- [8] Butt, M.A., Fomchenkov, S.A. and Khonina, S.N., "Dielectric-Metal-Dielectric (DMD) infrared (IR) heat reflectors", In *Journal of Physics: Conference Series*, 917(6), 062007. IOP Publishing, 2017. <http://doi.org/10.1088/1742-6596/917/6/062007>
- [9] Ko, M., Lee, G., Kim, C., Lee, Y., Ko, J. and Song, H.J., "Dielectric/metal/dielectric selective reflector for improved energy efficiency of building integrated bifacial c-Si photovoltaic modules", *Current Applied Physics* 21, 101-106, 2021. <https://doi.org/10.1016/j.cap.2020.10.008>
- [10] Nawade, A., Ramya, K., Chakraborty, S., Bamola, P., Sharma, H., Sharma, M., Chakraborty, K., Ramakrishna, S., Biring, S., Wong, T.K.S. and Kumar, A., "Copper based transparent solar heat rejecting film on glass through in-situ nanocrystal engineering of sputtered TiO<sub>2</sub>", *Ceramics International* 48(2), 2482-2491, 2022. <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2021.10.030>
- [11] Xu, K., Du, M., Hao, L., Mi, J., Lin, Y., Li, S., Wang, J. and Deng, X., "Optical optimization and thermal stability of SiN/Ag/SiN based transparent heat reflecting coatings", *Infrared Physics & Technology* 122, 104089, 2022. <https://doi.org/10.1016/j.infrared.2022.104089>
- [12] Nur-E-Alam, M., Vasiliev, M. and Alameh, K., "Dielectric/metal/dielectric (DMD) multilayers: growth and stability of ultra-thin metal layers for transparent heat regulation (THR)", In *Energy Saving Coating Materials*, 83-112. Elsevier, 2020. <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-822103-7.00004-2>
- [13] Martin, P.M., *Handbook of deposition technologies for films and coatings: science, applications and technology*. William Andrew, 2009.
- [14] Howari, H. and Uddin, I., "Variations in optical properties of ZnS/Cu/ZnS nanostructures due to thickness change of ZnS cap layer",



- Journal of Modern Materials 2(1), 25-30, 2016.  
<https://doi.org/10.21467/jmm.2.1.25-30>
- [15] Pedrotti, F. L., , & Pedrotti, L. S., shikh-o-eslami, M (1993).  
Introduction to optics. prentice Hall, iup publications, 4th edition  
(1388)(in persain) <https://doi.org/10.1017/9781108552493>
- [16] Daneshfar,N., Tabrizi, M., Amini-javid, S., "Study of optical of  
plasmonic nanoparticles on a dielectric substrate", Iran applied physics  
8(1), 11-19, 2018. (in persain)  
<http://doi.org/10.22051/jap.2019.20668.1098>
- [17] Johnson, P.B. and Christy, R.W., "Optical constants of the noble  
metals", Physical review B 6(12), 4370, 1972.  
<https://doi.org/10.1103/PhysRevB.6.4370>
- [18] Wood, D.L. and Nassau, K., "Refractive index of cubic zirconia  
stabilized with yttria", Applied Optics 21(16), 2978-2981, 1982.  
<https://doi.org/10.1364/AO.21.002978>



## شبیه‌سازی و ساخت پوشش انتخابگر طیفی دی‌اکسید زیر کونیوم / طلا / دی‌اکسید زیر کونیوم<sup>۱</sup> حمید مطهری\*<sup>۲</sup> و مجتبی اله پور<sup>۳</sup>

تاریخ دریافت: ۱۴۰۳/۰۷/۲۷

تاریخ بازنگری: ۱۴۰۳/۰۹/۲۲

تاریخ پذیرش: ۱۴۰۳/۱۰/۰۹

فصلنامه علمی فیزیک کاربردی ایران

دانشکده فیزیک، دانشگاه الزهرا

سال پانزدهم، پیاپی ۴۰، بهار ۱۴۰۴

صص ۱۴۰ - ۱۶۵

### چکیده:

استفاده از شیشه‌های بازتاب‌کننده حرارت در سال‌های اخیر با هدف کاهش مصرف انرژی الکتریکی مورد نیاز در خنک‌سازی ساختمان‌ها و کاهش ناترازی برق، مورد توجه قرار گرفته است. در این پژوهش، بررسی نظری و تجربی پوشش‌های چند لایه بر روی شیشه با هدف جلوگیری از ورود تابش حرارتی مادون قرمز و کنترل تابش در محدوده مرئی، تحت عنوان انتخابگر طیفی بررسی شده است. با بهره‌گیری از مبانی نظری ساختارهای لایه‌نازک چندلایه، ساختار سه لایه دی‌اکسید زیر کونیوم / طلا / دی‌اکسید زیر کونیوم بر روی شیشه شبیه‌سازی شده و سپس به روش باریکه الکترونی ساخته شده است. نتایج شبیه‌سازی‌ها نشان داد که این ساختار سه لایه‌ای در ضخامت‌های در حدود ۱۶۰ نانومتر برای  $ZrO_2$  و ضخامت پوشش طلا در حدود ۲۰ نانومتر، گزینه مناسبی است. نمونه واقعی ساخته شده در آزمایشگاه برای سطح پوشش‌دهی شده سه لایه‌ای با ضخامت ۱۶۰/۲۰/۱۶۰ نانومتر، به خوبی با طیف نمونه‌های شبیه‌سازی شده برابری می‌کند و انحراف جزئی ناشی از منابع خطای آزمایشی وجود دارد. نمونه شبیه‌سازی شده و ساخته شده، در ناحیه طیفی ۵۰۰ تا ۷۰۰ نانومتر مرئی دارای بیش از ۵۰ درصد عبوردهی و در میانه طول موج مرئی دارای قله عبوردهی بیش از ۷۰ درصد بوده است. همزمان، در ناحیه طیف مادون قرمز نزدیک برای طول موج ۷۵۰ نانومتر تا ۱۱۰۰ نانومتر، دارای عبور کمتر از ۲۰ درصد بوده است. بنابراین، این ساختار برای استفاده به عنوان بازتاب‌کننده تابش حرارتی مادون قرمز، بسیار مناسب است. این ساختار یک شیشه انتخابگر طیفی است که می‌تواند به عنوان یک شیشه هوشمند برای مقاصد خنک‌سازی تابشی مورد استفاده قرار گیرد.

**واژگان کلیدی:** پوشش انتخابگر طیفی، شیشه هوشمند، تابش حرارتی، مادون قرمز، دی‌اکسید زیر کونیوم.

<sup>۱</sup> <https://doi.org/10.22051/ijap.2024.48643.1431>

<sup>۲</sup> استادیار، دانشکده فیزیک، دانشگاه یزد، یزد، ایران. (نویسنده مسئول). Email: H.motahari@yazd.ac.ir

<sup>۳</sup> دانش‌آموخته کارشناسی ارشد فیزیک، دانشکده فیزیک، دانشگاه یزد، یزد، ایران. Email: mojtaba.allahpoor@stu.yazd.ac.ir



## ۱. مقدمه

در سال‌های اخیر مصرف انرژی الکتریکی برای مقاصد خنک‌سازی در تابستان با افزایش زیادی همراه بوده است. این موضوع به افزایش ناترازی برق در تابستان منجر شده است و چالش قطعی برق در کشور ما به صورت جدی در فصول گرم سال وجود دارد. بیشتر برق مصرفی در کشور در بخش‌های صنعتی، مسکونی، اداری، تجاری و کشاورزی است. اما افزایش مصرف برق برای خنک‌سازی ساختمان در بخش مسکونی و اداری، رشد چشم‌گیری در تابستان دارد، به صورتی که در اوج مصرف تابستان به حدود ۶۰ درصد مصرف برق کشور می‌رسد. این افزایش مصرف برق ناشی از بکارگیری کولرها، سامانه‌های تهویه و خنک‌سازی است. افزایش جمعیت و افزایش ساختمان‌ها و در نتیجه افزایش تعداد وسایل خنک‌سازی و کاهش دمای خنک‌سازی برای رفاه بیشتر در تابستان نیز از جمله دلایل این ناترازی است. برای مقابله با این چالش ناترازی، راهکارهای مختلفی پیشنهاد شده و مورد بررسی قرار گرفته است که یک سو به مصرف برق توجه دارد و دیگر سو به تولید برق توجه می‌نماید. به طور کلی به دو روش پویا و غیرپویا می‌توان ساختمان‌ها را در برابر تابش گرمایی محیط محافظت کرد [۱-۲]. در روش پویا استفاده از کولرها، سامانه‌های تهویه، و روش‌های مشابه برای خنک‌سازی محیط استفاده می‌شود که از انرژی الکتریکی برق به شکل روزافزونی استفاده شده، نیازمندی به تولید برق و ساخت نیروگاه‌ها را موجب گشته و به افزایش ناترازی مصرف برق در کشور دامن می‌زند. در روش غیرپویا از تجهیزات و روش‌هایی برای خنک کردن محیط استفاده می‌شود که هیچ‌گونه مصرف برق ندارند و حتی به صورت همیشگی موجب خنک‌سازی محیط می‌شوند. از جمله روش‌های غیرپویا می‌توان به عایق‌بندی حرارتی ساختمان، استفاده از شیشه‌های هوشمند برای دفع حرارت تابشی در تابستان و جذب تابش در زمستان، استفاده از شیشه‌های انتخابگر طیفی برای عبور نور مرئی به میزان دلخواه و حذف تابش مادون قرمز که عامل ایجاد عمده گرمایش است، بدون آنکه کاربرد دیگری در روشنایی محیط داشته باشند، اشاره نمود. در این میان شیشه پنجره‌ها به عنوان یکی از عوامل اصلی هدررفت انرژی به دلیل ارتباط مستقیم با محیط بیرونی شناخته می‌شود. چرا که شیشه‌های معمولی افزون بر نور مرئی، اجازه عبور نور مادون قرمز که عامل بیش از ۵۴ درصد گرمایش هستند را نیز می‌دهد و سبب گرمایش محیط داخل ساختمان می‌شوند [۳]. برای مقابله با افزایش مصرف انرژی و در عین حال، ایجاد شرایط محیطی مطبوع و خنک برای ساکنین، مفهوم پنجره‌های هوشمند که محیط درونی ساختمان را در برابر تابش‌های گرمایی خارجی محافظت می‌کنند، معرفی شده‌اند [۴]. این پنجره با جذب یا بازتاب ناحیه طول موجی مادون قرمز یا مادون قرمز نزدیک که عامل اصلی افزایش دمای

محیط داخلی ساختمان است، دما را کاهش داده و نیاز به مصرف انرژی الکتریکی جهت خنک‌سازی را کاهش می‌دهد. بر اساس پژوهش‌های انجام شده در دهه‌های اخیر این شیشه‌ها را می‌توان از مواد و روش‌های مختلفی تولید کرد. شیشه‌های هوشمند را می‌توان با توجه به نوع کارکرد به صورت سطوح الکتروکرومیک، ترموکرومیک، فوتوکرومیک، مکانوکرومیک و انتخابگر طیفی دسته‌بندی کرد. در این پژوهش دسته سطوح انتخابگر طیفی به صورت ساختار دی‌اکسید زیر کونیوم / طلا / دی‌اکسید زیر کونیوم مورد بررسی، شبیه‌سازی و سپس ساخت قرار گرفته است. نوآوری پژوهش جاری در انتخاب این ساختار و مواد دی‌الکتریک و ترکیب این دی‌الکتریک با طلا و سپس استفاده به عنوان شیشه هوشمند انتخابگر طیفی و بهینه‌سازی به کمک شبیه‌سازی بوده است.

### ۱.۱ ساختارهای دی‌الکتریک / فلز / دی‌الکتریک

ساختارهای چندلایه دی‌الکتریک / فلز / دی‌الکتریک که به عنوان بازتاب‌کننده‌های حرارتی شفاف شناخته می‌شوند [۳]، کاربردهای مختلفی در زمینه اپتیک دارند. از جمله این کاربردها می‌توان به ساخت نانوسنسورها [۵]، الکترودهای شفاف [۶]، ساختارهای پلاسمونیک [۷] و شیشه‌های هوشمند [۸] اشاره کرد. از جمله پژوهش‌های انجام شده در زمینه بازتاب‌کننده‌های حرارتی، می‌توان به ساخت ساختار سه لایه  $Te/Ag/Te$  با بیشینه عبور ۸۰ درصد در طول موج ۵۰۰ نانومتر توسط سونگ و همکارانش در سال ۲۰۲۰ که با هدف بکارگیری در ساختمان‌های هوشمند مورد بررسی قرار گرفته است، اشاره نمود [۹]. در پژوهش دیگری که توسط پردازش و همکارانش انجام شده یک ساختار سه لایه  $TiO_2/Cu/TiO_2$  به روش کندوپاش جریان مستقیم لایه‌نشانی شده است. ضخامت لایه پوشش داده شده در این پژوهش برای سطوح دی‌الکتریک ۲۰ نانومتر و برای سطح رسانا ۱۵ نانومتر گزارش شده است. همچنین بیشینه عبور برای نمونه پوشش داده شده به صورت میانگین ۷۰ درصد گزارش شده است [۱۰]. مقاله دیگری که با لایه‌نشانی به روش کندوپاش بسامد رادیویی ساختار  $SiN/Ag/SiN$  را بر روی زیرلایه شیشه‌ای پوشش‌دهی کرده است، توسط زو و همکارانش منتشر شده است. ضخامت بهینه لایه‌های دی‌الکتریک بالایی و پایینی آن به ترتیب ۵۵ و ۳۰ نانومتر و ضخامت بهینه لایه نقره ۱۵ نانومتر گزارش شده است و بیشینه عبور ساختار تولید شده نیز ۷۴ درصد گزارش شده است [۱۱]. در زمینه شیشه‌های هوشمند، سطوح بازتاب‌کننده حرارتی به صورت ساختار سه لایه دی‌الکتریک / فلز / دی‌الکتریک ساخته می‌شوند. مواد دی‌الکتریک به کار رفته در این ساختارها بیشتر ترکیباتی هستند که لایه نازک‌شان در بازه طول موجی مرئی تا مادون قرمز میانی، شفاف است. از جمله این ترکیبات می‌توان  $ZnO$ ،  $WO_3$ ،  $SiO_2$ ،  $ZrO_2$ ،  $TiO_2$  را



نام برد. لایه فلزی نیز بیشتر از جنس نقره، طلا و مس انتخاب می‌شود [۱۲]. در طول فرآیند لایه‌نشانی به روش باریکه الکترونی به دلیل انرژی بالای الکترون‌های فرودی دمای محفظه خلاء افزایش پیدا می‌کند. این افزایش دما در محل قرار گرفتن مواد هدف بسیار شدیدتر است و سبب برهم خوردن استکیومتری مواد هدف می‌شود. دی‌اکسید زیرکونیوم به دلیل نقطه ذوب بالا نسبت به سایر مواد دی‌الکتریک یاد شده (۲۷۰۰ درجه سانتی‌گراد) در برابر تغییرات حرارتی مقاومت بیشتری از خود نشان می‌دهد [۱۳]. براساس نظریه ساختارهای چندلایه، اگر ضخامت لایه دی‌الکتریک در ساختار به اندازه یک چهارم طول موج ( $\lambda/4$ ) نور تابیده شده باشد، در بازگشت از لایه، در مجموع به اندازه نصف طول موج اختلاف ایجاد شده و موجب تداخل ویرانگر شده و موجب کاهش میزان بازتاب از سطح شده و عبور نور را افزایش می‌دهد که این ویژگی را خاصیت ضدبازتاب می‌گویند [۱۴]. بنابراین با کنترل دقیق تعداد لایه‌ها، ضخامت لایه‌ها، و جنس لایه‌ها، می‌توان مقادیر عبور یا بازتاب نور را کنترل نمود.

## ۲. مباحث نظری و شبیه‌سازی ساختار چندلایه

### ۱.۲ نظریه ساختارهای چندلایه

نظریه ساختارهای چندلایه بیان می‌کند که هر لایه در ساختارهای چندلایه را می‌توان به صورت یک ماتریس در نظر گرفت و با دانستن معادله موج میدان‌های فرودی، می‌توان میدان نهایی و عبوری از ساختار را پیش‌بینی کرد. برای مثال، اگر موج الکترومغناطیسی تخت را در نظر بگیریم که به یک ساختار تک‌لایه شامل یک فیلم لایه نازک بر روی یک زیرلایه تابانده می‌شود، مطابق شکل (۱)، عبور، بازتاب و شکست از سطوح اول و دوم رخ می‌دهد. با اعمال شرایط مرزی برای میدان‌های الکتریکی و مغناطیسی نور تابیده شده به ساختار در مرز محیط - لایه نازک پوششی یعنی سطح (الف) در شکل (۱) و لایه نازک پوششی - زیرلایه یعنی سطح (ب) داریم:

$$E_a = E_0 + E_{r1} = E_{t1} + E_{i1}, \quad (1)$$

$$E_b = E_{t2} + E_{r2} = E_{t2}, \quad (2)$$

$$B_a = B_0 \cos \theta_0 - B_{r1} \cos \theta_0 = B_{t1} \cos \theta_1 - B_{i1} \cos \theta_1, \quad (3)$$

$$B_b = B_{t2} \cos \theta_1 - B_{r2} \cos \theta_1 = B_{t2} \cos \theta_2, \quad (4)$$

همچنین میدان الکتریکی و مغناطیسی موج تخت به صورت زیر به یکدیگر مرتبط هستند:

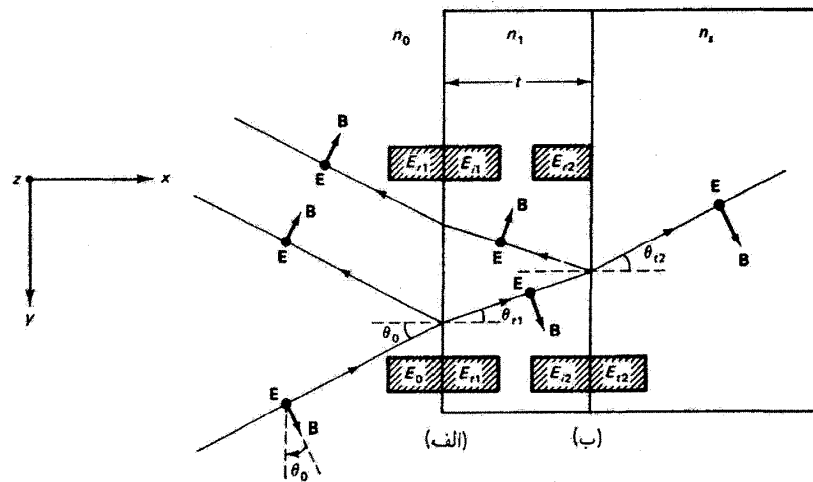


$$B = \frac{E}{v} = \left(\frac{n}{c}\right)E = n\sqrt{\epsilon_0\mu_0}E \quad (5)$$

با استفاده از رابطه (۵) می‌توان شرایط مرزی توصیف شده در رابطه‌های (۱) تا (۴) را تنها با وابستگی به شدت میدان الکتریکی بازنویسی کرد که در این صورت خواهیم داشت:

$$B_a = \gamma_0(E_0 - E_{r1}) = \gamma_1(E_{t1} - E_{t1}), \quad (6)$$

$$B_b = \gamma_1(E_{t2} - E_{r2}) = \gamma_s E_{t2}. \quad (7)$$



**Fig. 1** Schematic of the planar electromagnetic wave incidence on a single-layer structure.

شکل ۱ طرحواره تابش موج الکترومغناطیسی تخت بر ساختار تک لایه [۱۵].

همچنین، مقادیر  $\gamma$  با توجه به رابطه (۵) به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\gamma_0 \equiv n_0 \sqrt{\epsilon_0 \mu_0} \cos \theta_0, \quad (8)$$

$$\gamma_1 \equiv n_1 \sqrt{\epsilon_1 \mu_1} \cos \theta_{t1}, \quad (9)$$

$$\gamma_s \equiv n_s \sqrt{\epsilon_0 \mu_0} \cos \theta_{t2}. \quad (10)$$



که در آن‌ها  $n_0$ ،  $n_1$  و  $n_s$  به ترتیب ضریب شکست محیط، لایه نازک پوششی و زیرلایه هستند. همچنین،  $\mu_0$ ،  $\mu_1$  و  $\mu_s$  به ترتیب ضریب گذردهی مغناطیسی لایه نازک پوششی، محیط و زیرلایه هستند. کمیت‌های  $\epsilon_0$ ،  $\epsilon_1$  و  $\epsilon_s$  نیز گذردهی الکتریکی لایه نازک پوششی، محیط و زیرلایه هستند. عبارت‌های  $\theta_{t1}$ ،  $\theta_{t2}$  و  $\theta_0$  به ترتیب زاویه نور عبوری در مرز محیط-لایه پوششی، لایه پوششی-زیرلایه و زاویه نور تابیده شده در مرز محیط-لایه پوششی است. تفاوت  $E_{i2}$  با  $E_{t1}$  تنها به دلیل اختلاف فاز  $\delta$  است که با یک بار عبور از لایه ایجاد می‌شود و عبارت است از:

$$\delta = k_0 \Delta = \left( \frac{2\pi}{\lambda_0} \right) n_1 t \cos \theta_{t1}, \quad (11)$$

در نتیجه بنابر رابطه (۱۱) داریم:

$$E_{i2} = E_{t1} e^{-i\delta}, \quad (12)$$

$$E_{i1} = E_{r2} e^{-i\delta}, \quad (13)$$

با در نظر گرفتن روابط (۱۲) و (۱۳) می‌توان میدان‌های  $E_{i1}$  و  $E_{i2}$  را برحسب  $E_b$  و  $B_b$  بدست آورد:

$$E_b = E_{i1} e^{-i\delta} + E_{i1} e^{i\delta} = E_{t2}, \quad (14)$$

$$B_b = \gamma_1 (E_{i1} e^{-i\delta} - E_{i1} e^{i\delta}) = \gamma_s E_{t2}. \quad (15)$$

سمت راست دو معادله (۱۵) و (۱۴) را به صورت موقت نادیده می‌گیریم و با استفاده از سمت چپ معادلات خواهیم داشت:

$$E_{i1} = \left( \frac{\gamma_1 E_b + B_b}{2\gamma_1} \right) e^{i\delta}, \quad (16)$$

$$E_{i1} = \left( \frac{\gamma_1 E_b - B_b}{2\gamma_1} \right) e^{-i\delta}. \quad (17)$$

با جایگذاری رابطه‌های (۱۶) و (۱۷) در شرایط مرزی اولیه روابط ماتریسی بدست می‌آید که به آن ماتریس تبدیل لایه نازک گفته می‌شود [۱۵، ۱۶]، این ماتریس به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\begin{bmatrix} E_a \\ B_a \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \cos \delta & \frac{i \sin \delta}{\gamma_1} \\ i\gamma_1 \sin \delta & \cos \delta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E_b \\ B_b \end{bmatrix} \quad (18)$$

که در آن،  $\delta$  اختلاف فاز از رابطه (۱۱) بدست می‌آید و  $\gamma_1$  به ویژگی‌های ذاتی ماده و محیط انتشار بستگی داشته و از رابطه (۹) محاسبه می‌شود. ماتریس بدست آمده را می‌توان برای زیر لایه با یک لایه نازک پوشش به کاربرد برد. اگر تعداد لایه نازک در ساختار افزایش یابد، شکل کلی تبدیل میدان‌های اولیه به میدان‌های نهایی به صورت زیر خواهد بود:

$$\begin{bmatrix} E_a \\ B_a \end{bmatrix} = M_1 M_2 M_3 \dots \begin{bmatrix} E_N \\ B_N \end{bmatrix} \quad (19)$$

با استفاده از روابط (۱)، (۲)، (۶) و (۷) نیز داریم:

$$E_a = E_0 + E_{r1} \quad (20)$$

$$E_b = E_{t2} \quad (21)$$

$$B_a = \gamma_0 (E_0 - E_{r1}) \quad (22)$$

$$B_b = \gamma_s E_{t2} \quad (23)$$

حال با توجه به رابطه (۱۸)، ماتریس بدست آمده را بر حسب روابط (۲۰) الی (۲۳) باز نویسی می‌کنیم،

$$\begin{bmatrix} E_0 + E_{r1} \\ \gamma_0 (E_0 - E_{r1}) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} m_{11} = \cos \delta & m_{12} = \frac{i \sin \delta}{\gamma_1} \\ m_{21} = i\gamma_1 \sin \delta & m_{22} = \cos \delta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} E_{t2} \\ \gamma_s E_{t2} \end{bmatrix} \quad (24)$$

ضرایب بازتاب و عبور برابر با رابطه (۲۵) تعریف می‌شود:

$$r \equiv \frac{E_{r1}}{E_0}, \quad t \equiv \frac{E_{t2}}{E_0} \quad (25)$$

با وارد کردن ضرایب  $r$  و  $t$  در ماتریس تبدیل بدست آمده، خواهیم داشت:

$$1 + r = m_{11}t + m_{12}\gamma_s t \quad (26)$$



$$\gamma_0(1-r) = m_{21}t + m_{22}\gamma_s t \quad (27)$$

با حل دو معادله (۲۶) و (۲۷) برای ماتریس تبدیل بدست آمده در رابطه (۲۴) می توانیم ضرایب عبور و بازتاب را محاسبه کنیم.

$$t = \frac{2\gamma_0}{\gamma_0 m_{11} + \gamma_0 \gamma_s m_{12} + m_{21} + \gamma_s m_{22}} \quad (28)$$

$$r = \frac{\gamma_0 m_{11} + \gamma_0 \gamma_s m_{12} - m_{21} - \gamma_s m_{22}}{\gamma_0 m_{11} + \gamma_0 \gamma_s m_{12} + m_{21} + \gamma_s m_{22}} \quad (29)$$

عبور کل و بازتاب کل به صورت  $R = |r|^2$  و  $T = |t|^2$  محاسبه می شود [۱۵]. اما باید دقت داشت که مقادیر بازتاب کل و عبور کل موهومی هستند و از این رو خواهیم داشت:

$$r = \frac{A + iB}{C + iD} \quad (30)$$

$$|r|^2 = rr^* = \frac{A+iB}{C+iD} \frac{A-iB}{C-iD} = \frac{A^2+B^2}{C^2+D^2} \quad (31)$$

پس از انجام محاسبات بازتاب کل و عبور کل برابر می شود با:

$$R = \frac{n_1^2 (n_0 - n_s)^2 \cos^2 \delta + (n_0 n_s - n_1^2)^2 \sin^2 \delta}{n_1^2 (n_0 + n_s)^2 \cos^2 \delta + (n_0 n_s + n_1^2)^2 \sin^2 \delta} \quad (32)$$

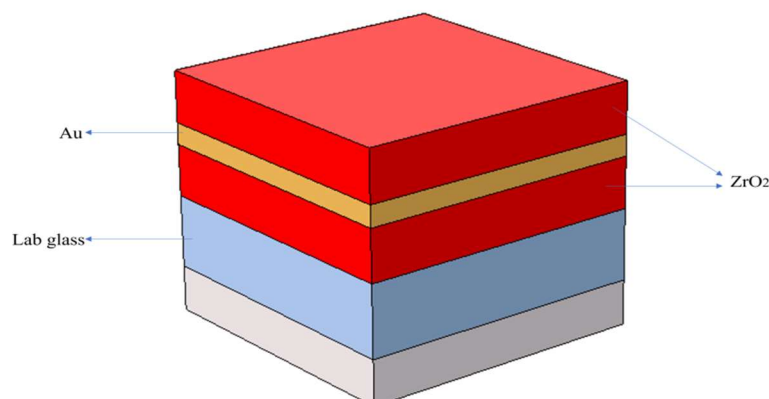
$$T = \frac{4n_1^2 n_0^2}{(n_0 + n_s)^2 \cos^2 \delta + (n_0 n_s + n_1^2)^2 \sin^2 \delta} \quad (33)$$

## ۲.۲ شبیه سازی ساختارهای چندلایه

در بخش پیشین بیان شد که می توان با انجام ریاضیات ماتریس پرتو و بهره گیری از ابزارهای شبیه سازی، ویژگی های نوری لایه های نازک را پیش بینی کرد. نرم افزار کامسول مولتی فیزیک<sup>۱</sup> یکی از ابزارهای قوی شبیه سازی برای این کار است و البته سایر نرم افزارهای شبیه سازی مبتنی بر روابط فرنل برای این موضوع قابل استفاده می باشند. در این پژوهش ساختار سه لایه دی اکسید

<sup>1</sup> Comsol Multiphysics

زیرکونیوم / طلا / دی‌اکسید زیرکونیوم در فضای سه بعدی در ماژول Wave Optics شبیه‌سازی شده است. در شکل (۲) ساختار سه بعدی شبیه‌سازی نمایش داده شده است. در این ساختار نواحی قرمز رنگ لایه‌های اکسید زیرکونیوم، ناحیه زرد رنگ لایه طلا و لایه آبی رنگ، زیر لایه شیشه هستند. زاویه تابش نور به سطح ساختار سه لایه در تمامی مراحل شبیه‌سازی ۹۰ درجه و عمودی مشخص شده است. ویژگی‌های نوری لایه فلزی میانی که از جنس طلا است با استفاده از ضرایب شکست و خاموشی در بازه ۲۰۰ الی ۲۰۰۰ نانومتر محاسبه شده است.

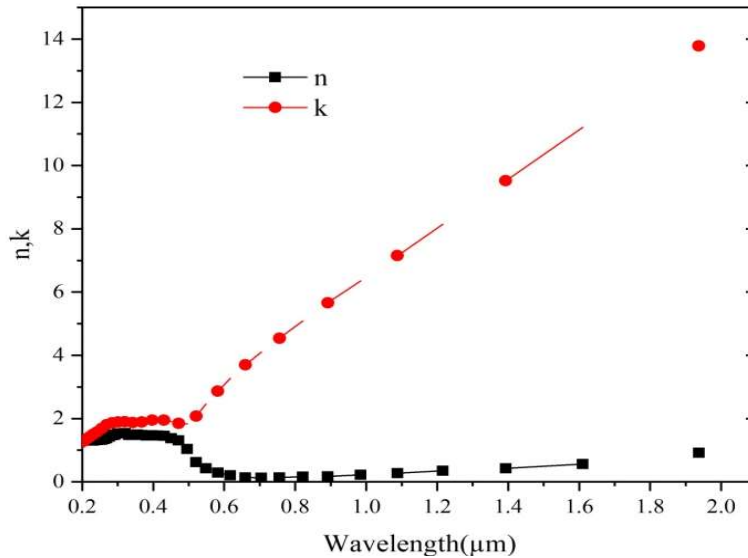


**Fig. 2** Schematic of the simulated three-layer zirconium oxide/ gold/ zirconium oxide structure on a glass substrate.

**شکل ۲** طرحواره شبیه‌سازی شده برای ساختار دی‌اکسید زیرکونیوم / طلا / دی‌اکسید زیرکونیوم بر بستر شیشه.

تغییرات ضرایب شکست و خاموشی لایه نازک طلا با افزایش طول موج نور فرودی در شکل (۳) ارائه شده است. مرجعی که ثابت‌های اپتیکی طلا در محدود طیف ۲۰۰ الی ۲۰۰۰ نانومتر را اندازه‌گیری کرده است، مطالعات جانسون کریستی در سال ۱۹۷۲ بوده است [۱۷].





**Fig. 3** Refractive index and extinction coefficient of the gold reflector layer.

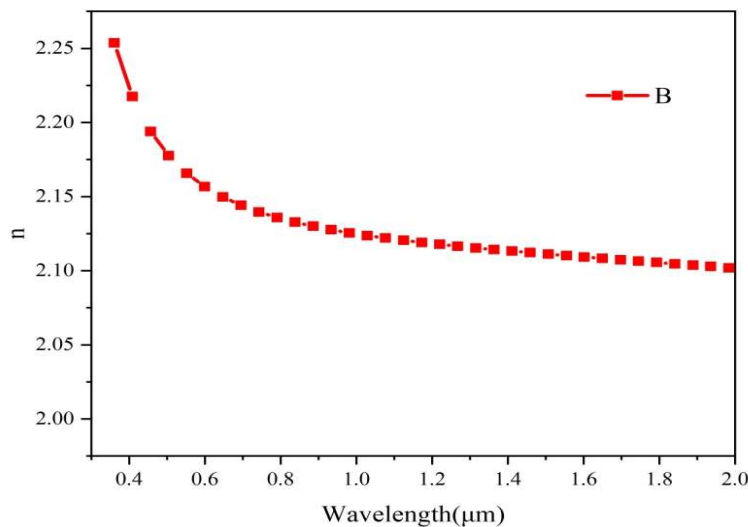
شکل ۳ ضریب شکست و ضریب خاموشی لایه بازتاب کننده طلا [۱۷].

ضروری است یادآوری شود که مش بندی انجام شده در حل این مساله به صورت خود کار با استفاده از نرم افزار کامسول مولتی فیزیک به صورت physics-controlled mesh انجام شده است. همچنین ثابت های اپتیکی اکسیدزیر کونیوم نیز با استفاده از رابطه سلمایر توسط وود و همکاران در سال ۱۹۸۲ در محدوده طیف ۳۰۰ الی ۵۰۰۰ نانومتر محاسبه شده است [۱۸]:

$$n^2 - 1 = \frac{1.347091\lambda^2}{\lambda^2 - 0.062543^2} + \frac{2.117788\lambda^2}{\lambda^2 - 0.166739^2} + \frac{9.452943\lambda^2}{\lambda^2 - 24.320570^2} \quad (34)$$

که در رابطه (۳۴)، ضریب شکست اکسید زیر کونیوم  $n$  در طول موج  $\lambda$  است. در شکل (۴) تغییرات ضریب شکست ماده اکسیدزیر کونیوم نسبت به تغییرات طول موج فرودی نمایش داده شده است. مشاهده می شود که با افزایش طول موج مقدار ضریب شکست ماده کاهش پیدا می کند. با استفاده از موارد بیان شده، در مرحله اول شبیه سازی، ساختار تک لایه ای از لایه نازک فلز طلا بر روی زیر لایه شیشه ای شبیه سازی شد. ضخامت لایه طلا در این شبیه سازی ها تحت زاویه ۹۰ درجه، از کمینه ضخامت لایه نشانی نمونه واقعی در آزمایشگاه در حدود ۴ نانومتر تا بیشینه ۲۵ نانومتر بوده

است که ضمن وجود شفافیت ناحیه مرئی، بازتاب ناحیه مادون قرمز را نیز داشته باشد و بیش از این مقدار عملاً شفافیت مرئی از بین می‌رود.



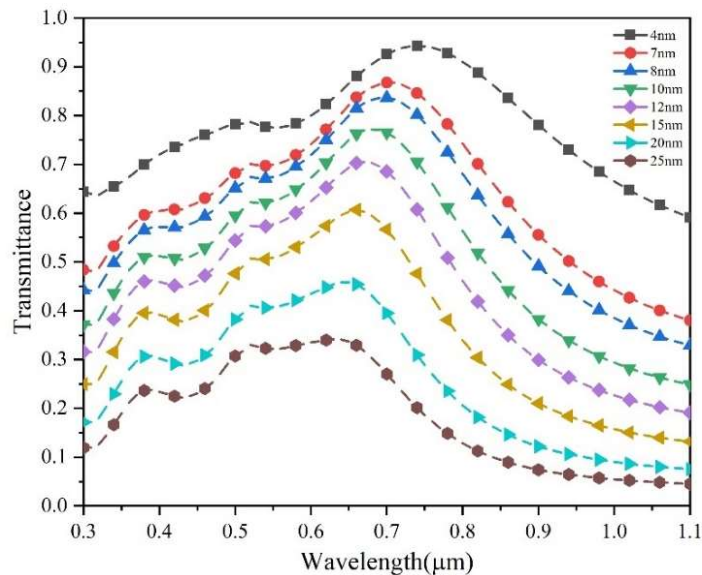
**Fig. 4** Refractive index of the zirconium oxide protective layer.

شکل ۴ ضریب شکست لایه محافظ اکسید زیر کونیوم [۱۸].

با توجه به شکل (۵) با شبیه‌سازی انجام شده لایه نازک طلا به صورت تک لایه در طول موج‌های مرئی، عبور برای ضخامت‌های کمتر از ۲۰ نانومتر، بیش از ۴۰ درصد بوده است. اما همه ضخامت‌های بیان شده، به خوبی بازتاب‌کننده محدوده مادون قرمز نسبت به مرئی هستند به حدی که برای ضخامت ۲۰ نانومتر طلا، عبور مادون قرمز، یعنی از طول موج ۷۸۰ نانومتر و بیشتر، به کمتر از ۱۰ درصد رسیده است و بازتاب عملاً بیش از ۹۰ درصد می‌باشد. در حالی که عبور مرئی به ویژه در ناحیه طول موجی ۵۰۰ تا ۷۰۰ نانومتر، بیش از ۴۰ درصد بوده است. همچنین با افزایش ضخامت لایه طلا از ۴ تا ۲۵ نانومتر، شفافیت مرئی، یعنی عبور نور مرئی نیز به تدریج کاهش یافته است. برای انتخاب دقیق‌تر، شبیه‌سازی ضخامت لایه طلا از ۵ الی ۲۵ نانومتر با گام‌های ۱ نانومتر افزایش پیدا کرده است و تلفیق تمامی نتایج بدست آمده از طیف عبور در محدوده ۳۰۰ تا ۱۱۰۰ نانومتر، در قالب یک تصویر در شکل (۶) به تصویر کشیده شده است. این تصویر به زیبایی نشان می‌دهد که عبور در ناحیه مادون قرمز بویژه در حدود ۹۰۰ نانومتر، برای ضخامت حدود ۲۰ نانومتر به کمتر از ۱۰ درصد رسیده است. در عین حال، با افزایش ضخامت تا ۲۵ نانومتر، عبور مرئی شروع به کاهش



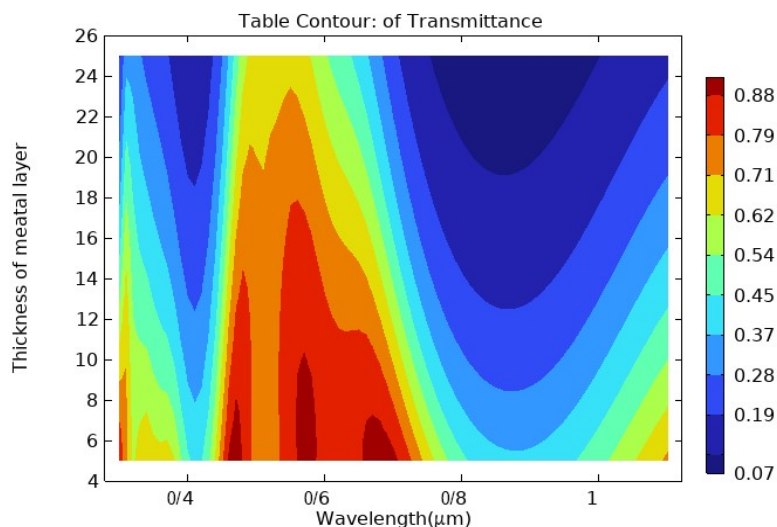
از ۸۰ درصد به حدود ۴۰ درصد کرده است. در واقع، در نمودار رسم شده در شکل (۶) تغییرات ضخامت لایه فلزی و تاثیر آن بر عبور نور از ساختار را می توان مشاهده کرد. با افزایش ضخامت لایه طلا، عبور در محدوده ۳۸۰-۷۸۰ نانومتر کاهش می یابد، اگرچه بازتاب و جذب در محدوده ۷۸۰-۱۱۰۰ نانومتر افزایش می یابد. در نتیجه، اگر ضخامت لایه پایین تر از حالت بهینه باشد، بازتاب و جذب در مادون قرمز نزدیک کاهش می یابد و امواج گرمایی عبور می کنند. اگر ضخامت انتخاب شده بیشتر از حد بهینه باشد، عبور نور مرئی کاهش پیدا می کند و سطح تاریک می شود. از این رو، انتخاب یک محدوده مناسب ضخامتی در حدود ۲۰ نانومتر برای ساخت نمونه واقعی، مناسب به نظر می رسد. در این حالت، عبور نور مرئی در حد بیش از ۴۰ درصد است که برای عبور نور و به دنبال آن، دید خوب از یک شیشه همچنان مناسب است.



**Fig. 5** Simulated transmission spectra of thin gold films with thicknesses of 4, 7, 8, 10, 12, 15, 20, and 25 nm.

شکل ۵ طیف عبور شبیه سازی شده از لایه نازک طلا به ضخامت های ۴، ۷، ۸، ۱۰، ۱۲، ۱۵، ۲۰ و ۲۵ نانومتر.





**Fig. 6** Transmission spectrum of the  $ZrO_2/Au/ZrO_2$  three-layer structure due to changes in the thickness of the gold metal layer from 5 nm to 25 nm.

شکل ۶ طیف عبور ساختار سه لایه  $ZrO_2/Au/ZrO_2$  در اثر تغییرات ضخامت لایه فلز طلا از ۵ نانومتر تا ۲۵ نانومتر.

در مرحله بعدی، شبیه‌سازی ساختار دولایه‌ای دی‌الکتریک یعنی دی‌اکسید زیر کونیوم بر سطح شیشه در کامسول انجام شد و عبور طیفی از طول موج ۳۰۰ تا ۱۱۰۰ نانومتر بدست آمد. برای این کار، ضخامت‌های اکسید زیر کونیوم به صورت متقارن برای هر دو لایه، از ۵۰ نانومتر تا ۲۰۰ نانومتر با گام‌های ۱۰ نانومتر افزایش، شبیه‌سازی شد که نتیجه برهم‌نهی تمام طیف‌ها برای تغییرات ضخامت یاد شده در قالب شکل (۷) دیده می‌شود.



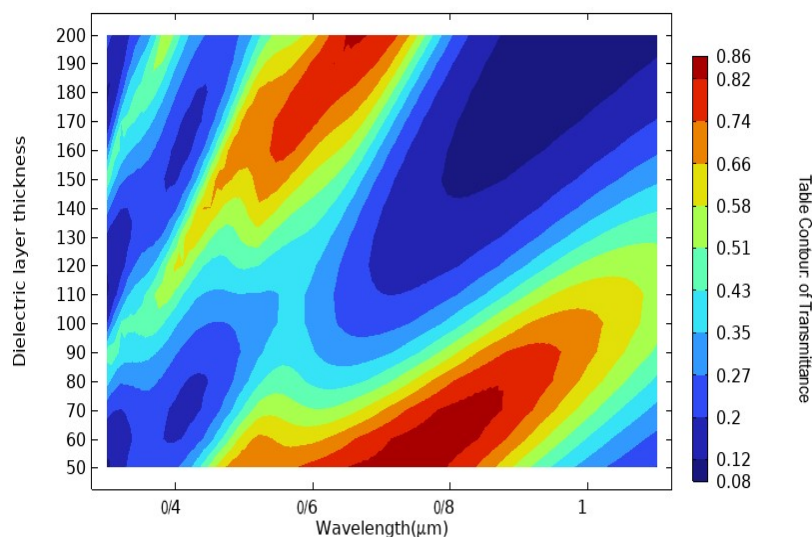
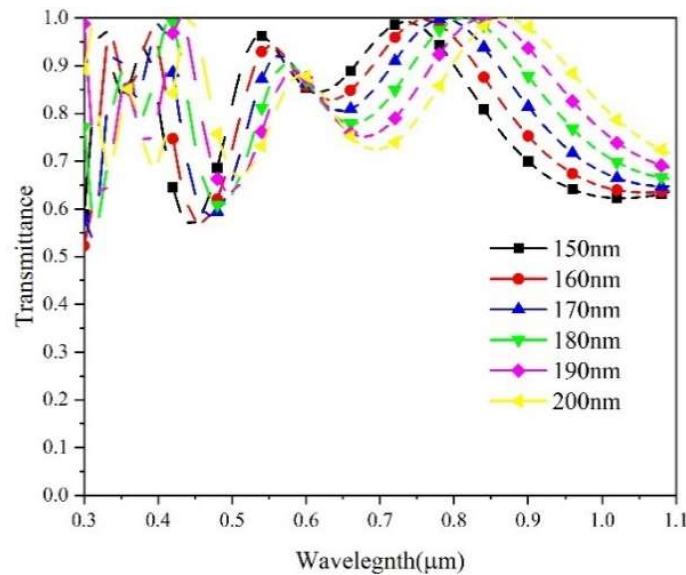


Fig. 7 Simulation of changes in the transmission spectrum of the two-layer structure due to changes in the thickness of the zirconium oxide dielectric layers from 50 to 200 nm.

شکل ۷ شبیه‌سازی تغییرات طیف عبور ساختار دو لایه در اثر تغییر ضخامت لایه‌های دی‌الکتریک اکسید زیرکونیوم از ۵۰ تا ۲۰۰ نانومتر.

از نتایج شبیه‌سازی شکل (۷) مشاهده می‌شود که با افزایش ضخامت لایه‌های دی‌الکتریک در ناحیه طیفی مرئی، عبور افزایش پیدا می‌کند به صورتی که در حدود بیش از ۱۵۰ نانومتر ضخامت دی‌اکسید زیرکونیوم در شبیه‌سازی، محدوده بیشترین عبور مشاهده می‌شود. از طرفی با افزایش ضخامت لایه دی‌الکتریک، درصد عبور نور در ناحیه مادون قرمز نزدیک کاهش پیدا می‌کند. بنابراین ضخامت از لایه دی‌اکسید زیرکونیوم ( $ZrO_2$ ) در حد بیش از ۱۵۰ نانومتر می‌تواند به عنوان ضخامت مناسب مشخص شود.

سپس در مرحله بعد، ساختار تک لایه دی‌اکسید زیرکونیوم نیز بر روی زیرلایه شیشه‌ای به صورت تک‌لایه شبیه‌سازی شد که در شکل (۸) نشان داده شده است و ضخامت‌های بیش از ۱۵۰ نانومتر که گزینه‌های مناسبی در شبیه‌سازی مرحله قبل تشخیص داده شدند، مورد شبیه‌سازی منفرد و جداگانه با گام‌های ۱۰ نانومتری قرار گرفتند. این شبیه‌سازی‌ها برای ۱۵۰، ۱۶۰، ۱۷۰، ۱۸۰، ۱۹۰، و ۲۰۰ نانومتر بوده است.



**Fig. 8** Simulated transmission spectra of thin zirconium oxide films with thicknesses of 150, 160, 170, 180, 190, and 200 nm.

**شکل ۸** طیف عبور شبیه‌سازی شده از لایه نازک اکسید زیر کونیوم به ضخامت ۱۵۰، ۱۶۰، ۱۷۰، ۱۸۰، ۱۹۰ و ۲۰۰ نانومتر.

همانطور که در شکل (۸) مشاهده می‌شود، لایه نازک دی‌اکسید زیر کونیوم در بازه طول موجی ۳۰۰ الی ۱۱۰۰ نانومتر به صورت کلی شفاف است و در همه ضخامت‌های بیان شده از ۱۵۰ تا ۲۰۰ نانومتر، بیش از ۶۰ درصد عبوردهی دارد. همچنین در بازه طول موجی حدود ۵۰۰ تا ۷۰۰ نانومتر، یک قله عبوردهی وجود دارد که برای ضخامت‌های ۱۵۰ و ۱۶۰ نانومتر، نوک این قله عبوردهی در حدود ۵۵۰ نانومتر به خوبی دیده می‌شود.

اگرچه نکته دارای اهمیت و قابل توجه که در نمودارهای رسم شده طیف عبور دی‌اکسید زیر کونیوم قابل مشاهده است، جابه‌جایی بیشینه عبور به سمت طول موج‌های بزرگتر با افزایش ضخامت لایه می‌باشد. جابه‌جایی به قرمز نوک قله‌ها به دلیل افزایش ضخامت و ایجاد تداخل ویرانگر در طول موج‌های بزرگتر است. همچنین بر اساس قوانین بازتاب از لایه‌های نازک و تطبیق با طول راه نوری طی شده در لایه و بازتاب از آن و سپس تداخل سازنده و ویرانگری که بر حسب مضارب صحیح نیم طول موجی در قیاس با ضخامت لایه‌ها رخ می‌دهد، به زیبایی موجب رفتار نوسانی طیف عبوری



شده است که از رابطه ریاضی زیر قابل درک است. اگر ضخامت لایه پوشش داده شده  $t$  باشد و برابر یک چهارم طول موج تابیده شده در نظر گرفته شود، خواهیم داشت:

$$t = \frac{\lambda}{4} = \frac{\lambda_0}{4n_1} \quad (35)$$

که در نتیجه آن رابطه (۱۱) که نشان دهنده اختلاف فاز نور عبوری و بازتابی است، برابر می شود با:

$$\delta = 2\pi n_1 \left( \frac{\lambda_0}{4n_1} \right) / \lambda_0 = \frac{\pi}{2} \quad (36)$$

اگر مقدار اختلاف فاز برابر  $90^\circ$  درجه باشد  $\cos \delta = 0$  و  $\sin \delta = 1$  می شود. اگر این مقادیر را در رابطه (۳۲) یعنی بازتاب کل از سطح قرار بدهیم خواهیم داشت:

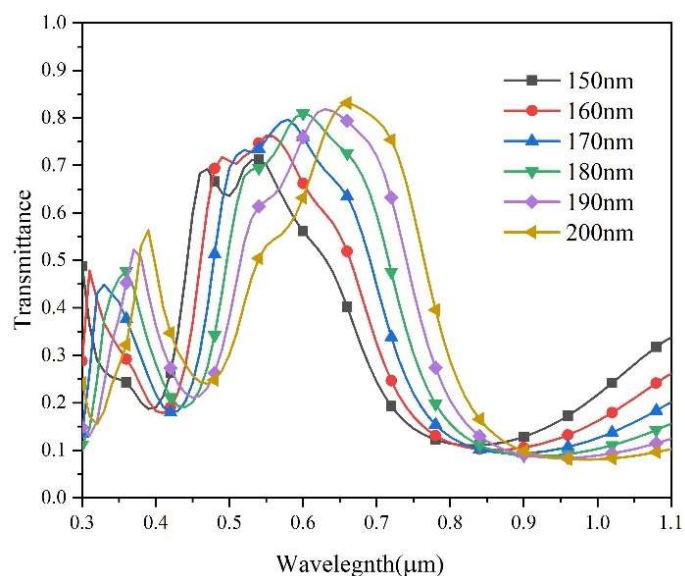
$$R = \left( \frac{n_0 n_s - n_1^2}{n_0 n_s + n_1^2} \right)^2 \quad (37)$$

و در عمل می توان مقدار بازتاب در تابش عمودی از لایه های نازک با جنس های متفاوت را محاسبه نمود.

در گام بعدی، طیف عبور ساختار نهایی سه لایه ای دی اکسیدزیرکونیوم / طلا / دی اکسیدزیرکونیوم محاسبه شد و در شکل (۹) نمایش داده شده است که در آن ضخامت لایه های دی اکسیدزیرکونیوم متقارن دو طرف طلا از ۱۵۰ تا ۲۰۰ نانومتر با گام های ۱۰ نانومتر متغیر بوده است. این تغییر به صورت متقارن برای هر دو لایه لحاظ شده است، اما ضخامت طلا ۲۰ نانومتر ثابت در نظر گرفته شده است. مثلاً لایه ۱۵۰/۲۰/۱۵۰ و سپس ۱۶۰/۲۰/۱۶۰ محاسبه شده اند تا در نهایت ۲۰۰/۲۰/۲۰۰ بدست آمده است.

نمودار طیف عبور بدست آمده از شکل (۹) نشان می دهد با افزایش ضخامت لایه های اکسید فلزی در حالی که ضخامت لایه طلا ۲۰ نانومتر و ثابت است، بیشینه عبور نور مرئی به سمت طول موج های بزرگتر حرکت می کند که این اتفاق مطلوب نیست. از طرفی نشان می دهد که عبور برای ضخامت در حدود ۱۶۰ نانومتر در ترکیب سه لایه یعنی ۱۶۰/۲۰/۱۶۰ در محدوده ۵۰۰ تا ۷۰۰ نانومتر، بهترین پاسخ را داشته است و در عین حال بازتاب در مادون قرمز نزدیک (۷۸۰ تا ۱۱۰۰ نانومتر) نیز بسیار بالا و در حدود ۸۰ تا ۹۰ درصد بوده است.

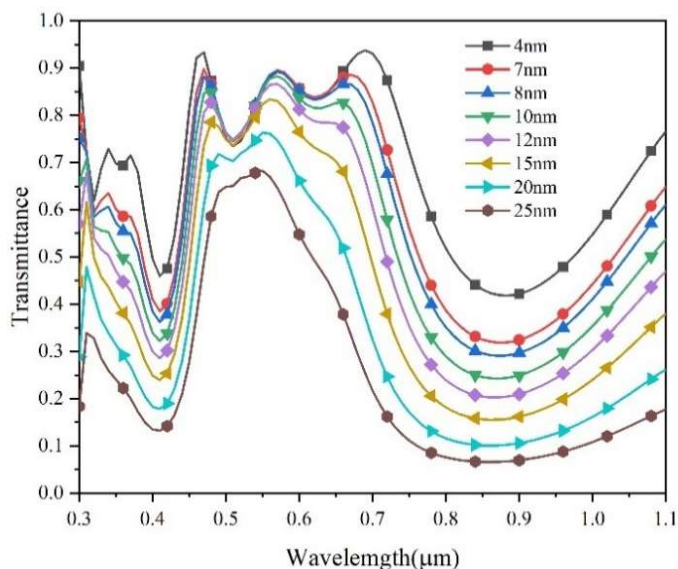
در آخرین مرحله شبیه‌سازی‌ها، ضخامت دولایه دی‌اکسید زیر کونیوم ۱۶۰ نانومتر ثابت نگه داشته شده و ضخامت لایه طلا مقادیر ۴، ۷، ۸، ۱۰، ۱۲، ۱۵، ۲۰ و ۲۵ به صورت متغیر در نظر گرفته شده است. مطابق با شکل (۱۰) در اثر افزایش ضخامت لایه طلا، عبور در طول موج ۴۰۰ الی ۷۰۰ نانومتر کاهش پیدا می‌کند اما همزمان بازتاب طول موج‌های مادون قرمز نیز افزایش پیدا می‌کند. با توجه به شکل (۱۰)، ضخامت‌های ۱۵ و ۲۰ نانومتر با عبور بیشتر از ۷۰ درصد نور مرئی در طول موج ۵۵۰ نانومتر و بازتاب ۸۰ الی ۹۰ درصدی در ناحیه مادون قرمز، گزینه‌های مطلوبی برای استفاده در ساختن نمونه آزمایشگاهی هستند.



**Fig. 9** Simulated transmission spectrum of a zirconium dioxide/ gold/ zirconium dioxide three-layer structure. Fixed thickness of the gold layer (20 nm) and varying thickness of the zirconium dioxide layers.

**شکل ۹** شبیه‌سازی طیف عبور ساختار سه‌لایه دی‌اکسید زیر کونیوم / طلا / دی‌اکسید زیر کونیوم. ضخامت ثابت لایه طلا (۲۰ نانومتر) و ضخامت متفاوت لایه‌های دی‌اکسید زیر کونیوم.





**Fig. 10** Simulation of the transmission spectrum of a zirconium oxide/ gold/ zirconium oxide three-layer structure with a constant thickness of the dielectric layers (160 nm) and varying thickness of the gold layer.

**شکل ۱۰** شبیه‌سازی طیف عبور ساختار سه‌لایه اکسید زیرکونیوم / طلا/ اکسید زیرکونیوم با ضخامت ثابت لایه‌های دی‌الکتریک (۱۶۰ نانومتر) و ضخامت متفاوت لایه طلا.

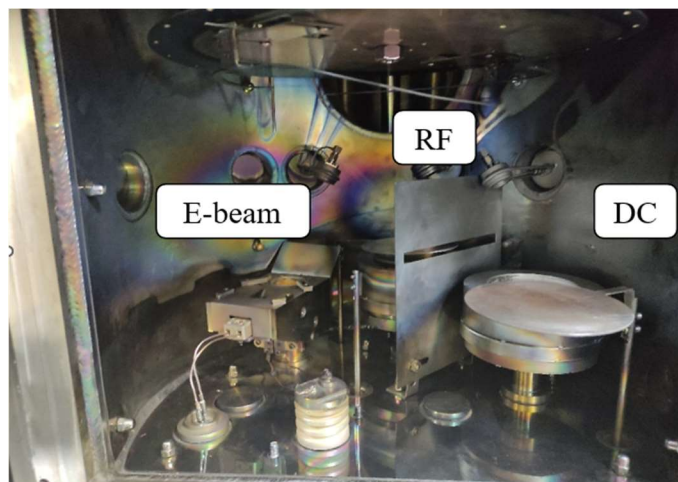
بنابراین با توجه به تمامی شبیه‌سازی‌های بیان شده و تحلیل طیف‌ها و نمودارهای بدست آمده، ضخامت‌های ۱۶۰ تا ۱۸۰ نانومتر برای اکسید زیرکونیوم و حدود ۲۰ نانومتر برای لایه طلا، حالت بهینه مستخرج از شبیه‌سازی‌ها بوده و برای ساخت نمونه آزمایشگاهی ساختار سه‌لایه مورد نظر با هدف بازتاب تابش حرارتی مادون قرمز نزدیک و عبور همزمان تابش مرئی بر روی یک شیشه انتخابگر طیفی یا شیشه هوشمند با هدف خنک‌سازی تابشی هستند. در عین حال، کمینه ضخامت برای لایه‌نشانی نمونه واقعی به نظر می‌رسد دارای ترکیب ۱۶۰/۲۰/۱۶۰ نانومتر می‌تواند باشد و از این رو برای ساخت، انتخاب می‌گردد.

### ۳. ساخت نمونه ساختار سه‌لایه دی‌اکسید زیرکونیوم / طلا/ دی‌اکسید زیرکونیوم

#### بر سطح شیشه

لایه‌نشانی ساختار سه‌لایه دی‌اکسید زیرکونیوم / طلا/ دی‌اکسید زیرکونیوم به روش باریکه الکترونی یا همان تفنگ الکترونی با دستگاه لایه‌نشانی امگا ۴۱۰ انجام شد. این دستگاه به سفارش آزمایشگاه

لایه‌نشانی دانشکده فیزیک دانشگاه یزد ساخته شد و همزمان دارای سه نوع لایه‌نشانی مجزا شامل کندوپاش جریان مستقیم<sup>۱</sup> و کندوپاش رادیو فرکانس<sup>۲</sup> و تفنگ الکترونی<sup>۳</sup> در یک محفظه خلاء می‌باشد که در شکل (۱۱) نشان داده شده است. در این مرحله از پژوهش، ساختار سه لایه که همان ساختار شبیه‌سازی شده در بخش اول پژوهش بود، با استفاده از سامانه لایه‌نشانی تفنگ الکترونی ساخته شد و نتایج بدست آمده مورد بررسی قرار گرفت.



**Fig. 11** The vacuum chamber of the Omega 410 PVD coating system and the electron gun which was used for coating of the three-layer zirconium dioxide/gold/zirconium dioxide spectral selective glass sample.

**شکل ۱۱** نمایی از محفظه خلاء دستگاه لایه‌نشانی امگا ۴۱۰ و تفنگ الکترونی دستگاه که برای ساخت نمونه شیشه انتخابگر طیفی سه‌لایه‌ای اکسید زیرکونیوم / طلا / اکسید زیرکونیوم از آن استفاده گردید.

### ۱.۳ مواد و مراحل انجام لایه‌نشانی

در این آزمایش از قطعات دی‌اکسید زیرکونیوم به خلوص ۹۹/۹۹٪ و طلا به خلوص ۹۹/۹۹٪ استفاده شده است. زیرلایه مورد استفاده شیشه آزمایشگاهی بوده که در ابتدا با استفاده از متانول و آب شست‌وشو و چربی‌زدایی شده است. لایه‌نشانی در خلاء  $10^{-4}$  / ۵ تور انجام شده است. در این پژوهش ابتدا پوشش تک‌لایه طلا با ضخامت‌های ۴، ۷، ۸، ۱۰، ۱۲ و ۱۵ نانومتر بر روی زیرلایه

<sup>1</sup> DC sputtering

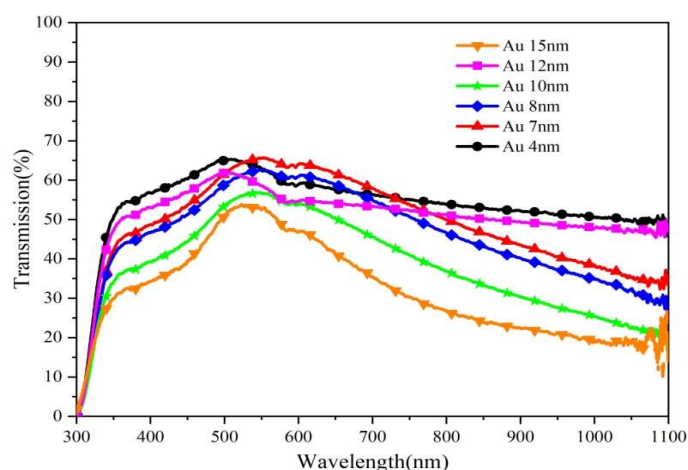
<sup>2</sup> RF Sputtering

<sup>3</sup> E-Beam



شیشه‌ای پوشش‌دهی شده است. پوشش‌دهی با نرخ  $0.2$  نانومتر بر ثانیه برای طلا انجام شده است. طیف عبور این نمونه‌ها با دستگاه طیف‌سنجی Ocean Optic مدل HR4000 آزمایشگاه لایه‌نشانی در زاویه تابش  $90^\circ$  درجه اندازه‌گیری شده است که نتایج مقایسه‌ای تمامی نمونه‌های ساخته شده در قالب یک نمودار مقایسه‌ای و در مد عبوری در شکل (۱۲) ارائه شده است.

در شکل (۱۲) مشاهده می‌شود با افزایش ضخامت لایه نازک طلا، عبور طیف در بازه  $300$  الی  $1100$  نانومتر کاهش پیدا می‌کند، اما این مقدار کاهش یکسان نیست. برای مثال، اگر لایه نازک طلا با ضخامت  $15$  نانومتر در نظر گرفته شود، بیشینه نور عبوری در میانه ناحیه مرئی و در طول موج  $560$  نانومتر رخ می‌دهد. اگرچه درصد عبور نور در طول موج‌های بزرگتر کاهش می‌یابد به گونه‌ای که در طول موج  $1000$  نانومتر، درصد عبور نور مادون قرمز نزدیک، برابر  $20$  درصد است.



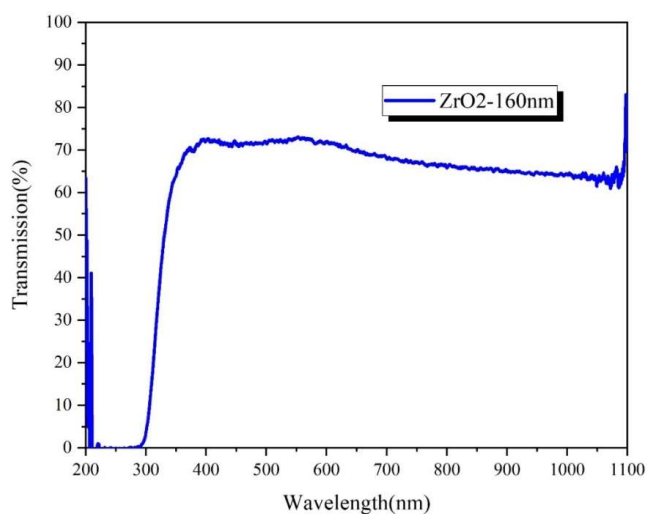
**Fig. 12** Transmission spectra of gold single-layer structures fabricated in the thin film laboratory with different thicknesses from 4 nm to 15 nm.

**شکل ۱۲** طیف عبور ساختارهای تک لایه طلا ساخته شده در آزمایشگاه لایه نازک با ضخامت‌های مختلف از  $4$  تا  $15$  نانومتر.

در ادامه لایه نازک دی‌اکسید زیرکونیوم  $ZrO_2$  نیز بر روی زیرلایه شیشه‌ای به روش باریکه الکترونی پوشش‌دهی شده و طیف عبور این نمونه نیز اندازه‌گیری شده است. پوشش‌دهی با نرخ  $0.17$  نانومتر بر ثانیه برای دی‌اکسید زیرکونیوم انجام شده است. در شکل (۱۳) طیف عبور لایه  $160$  نانومتری دی‌اکسید زیرکونیوم نشان داده شده است.



شکل (۱۳) نشان می‌دهد که لایه نازک دی‌اکسید زیرکونیوم در طول موج ۳۵۰ الی ۱۰۰۰ نانومتر شفاف است و عبوری با بیشینه حدود ۷۴ درصد دارد. در بخش تجربی، دو لایه اکسیدی مورد استفاده در ساختارهای دی‌الکتریک / فلز / دی‌الکتریک افزون بر نقش اپتیکی خود، به عنوان لایه محافظ و بستر چسبنده نیز ایفای نقش می‌کنند. لایه نازک فلزات بازتاب‌کننده مادون قرمز مانند طلا، نقره و مس پایداری شیمیایی و فیزیکی یا مکانیکی بسیار کمی دارند. برای مثال، لایه نازک فلزات نقره و مس در مجاورت هوای محیط به سرعت اکسید شده و ویژگی‌های نوری و بازتاب‌کنندگی خود را از دست می‌دهند. به همین دلیل در این پژوهش لایه فلزی از طلا انتخاب شده است که دارای مقاومت شیمیایی بالایی است و ویژگی‌های اپتیکی آن در مجاورت هوای محیط دستخوش تغییر نمی‌شود. دومین دلیل انتخاب لایه نازک طلا به عنوان لایه بازتاب‌کننده وجود بیشینه عبور در مرکز محدود طول موج مرئی طول موج ۵۵۰ نانومتر است. این ویژگی در نقره مشاهده نمی‌شود و بیشینه عبور نور در طیف لایه نازک نقره در محدود فرابنفش و آبی رخ می‌دهد. همچنین چسبندگی لایه فلزی سه عنصر یاد شده به سطح شیشه بسیار پایین است، به صورتی که با کمترین خراشیدگی، لایه فلزی به آسانی ممکن است از بین برود. به همین دلیل، از یک لایه اکسید فلزی برای افزایش چسبندگی و از لایه دیگر برای محافظت در برابر واکنش‌های شیمیایی و تنش‌های فیزیکی نیز استفاده می‌شود [۸].



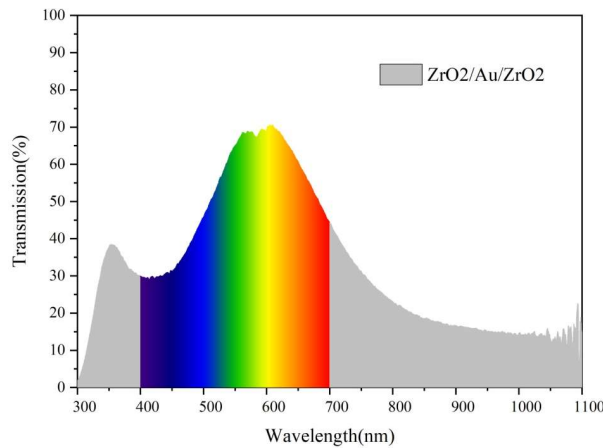
**Fig. 13** Transmission spectrum of the zirconium oxide ( $ZrO_2$ ) thin layer fabricated in the thin-film laboratory with a thickness of 160 nanometers.

شکل ۱۳ طیف عبور لایه نازک اکسید زیرکونیوم  $ZrO_2$  ساخته شده در آزمایشگاه لایه نازک به ضخامت ۱۶۰ نانومتر.



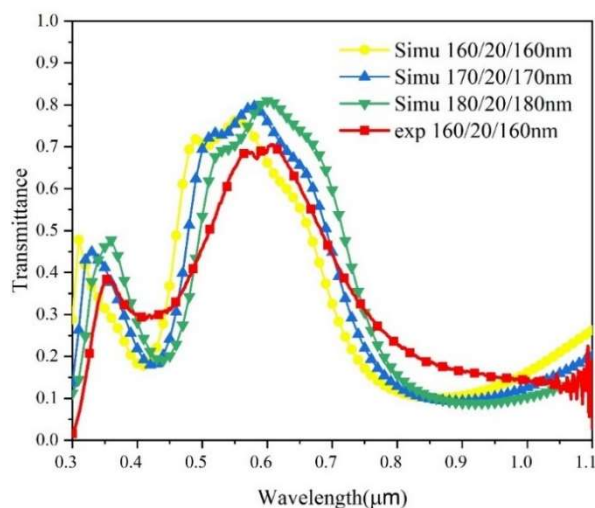
در مرحله بعد، پس از ایجاد ساختارهای منفرد و ارزیابی و مشخصه‌یابی منفرد آن‌ها، ساختار سه لایه دی‌اکسید زیرکونیوم / طلا / دی‌اکسید زیرکونیوم ساخته شد که در آن مطابق با نتایج بهینه بدست آمده از شبیه‌سازی‌های پژوهش، ضخامت دولایه دی‌الکتریک دی‌اکسید زیرکونیوم ۱۶۰ نانومتر و ضخامت لایه فلزی طلا، حدود ۲۰ نانومتر بر روی شیشه پوشش‌دهی شد و ساختار سه‌لایه ساخته شد. پس از انجام لایه‌نشانی، از نمونه تولید شده طیف عبور UV-Vis-NIR تهیه شده است که در شکل (۱۴) دیده می‌شود.

پس از تولید نمونه سه‌لایه‌ای دی‌اکسید زیرکونیوم / طلا / دی‌اکسید زیرکونیوم با ضخامت ۱۶۰/۲۰/۱۶۰ نانومتر، ساخته شده به روش باریکه الکترونی و اندازه‌گیری شفافیت یا عبور در بازه ۳۰۰ تا ۱۱۰۰ نانومتر مطابق شکل (۱۴)، طیف عبور نمونه تولید شده سه‌لایه در آزمایشگاه بر سطح شیشه، با شبیه‌سازی‌های انجام شده برای همین نمونه سه‌لایه، در شکل (۱۵) به زیبایی مقایسه شده‌اند. همانطور که از مقایسه نمونه‌های شبیه‌سازی‌ها در سه ضخامت ۱۶۰/۲۰/۱۶۰ و ۱۷۰/۲۰/۱۷۰ و ۱۸۰/۲۰/۱۸۰ نانومتر با نمونه تجربی ۱۶۰/۲۰/۱۶۰ نانومتر ساخته شده ملاحظه می‌شود، تطابق مناسبی برای نمونه دارای ضخامت‌های شبیه‌سازی شده ۱۷۰/۲۰/۱۷۰ با نمونه تجربی ۱۶۰/۲۰/۱۶۰ نانومتر وجود دارد.



**Fig. 14** Transmission spectrum of a zirconium dioxide / gold / zirconium dioxide three-layer structure with a thickness of 160/20/160 nm, fabricated by the electron beam deposition method.

**شکل ۱۴** طیف عبور ساختار سه‌لایه دی‌اکسید زیرکونیوم / طلا / دی‌اکسید زیرکونیوم با ضخامت ۱۶۰/۲۰/۱۶۰ نانومتر، ساخته شده به روش باریکه الکترونی.

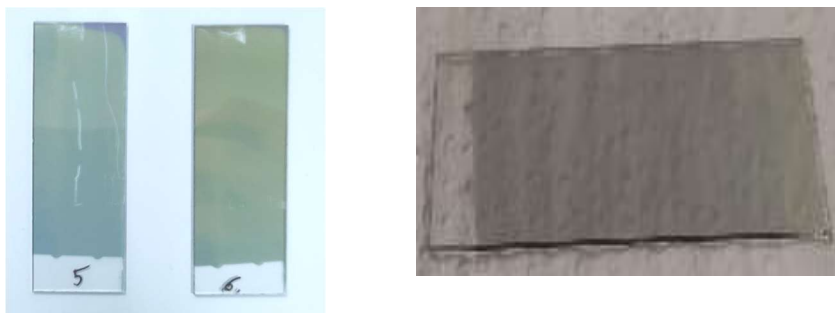


**Fig. 15** Comparison of the simulated spectra with the experimental sample fabricated in the laboratory.

**شکل ۱۵** مقایسه طیف شبیه‌سازی‌های انجام شده با نمونه ساخته شده در آزمایشگاه.

اختلاف مشاهده شده می‌تواند از عواملی چون کالیبراسیون و دقت اندازه‌گیری ضخامت‌سنج دستگاه لایه‌نشانی، خلوص مواد آزمایشگاهی، اختلاف در ویژگی‌های اپتیکی مواد مورد استفاده در شبیه‌سازی و نمونه تجربی اعم از زیر لایه شیشه‌ای و لایه‌های پوششی، و سایر منابع خطای انسانی و ابزاری در مقایسه با فرض‌ها و تقریب‌های به کار گرفته شده در مباحث نظری و شبیه‌سازی باشد. با وجود اختلاف حدود ده درصدی در نقاط بیشینه یا کمینه دو نمونه واقعی و شبیه‌سازی شده و وجود چهار نقطه تقاطع بین این دو نمودار، اما الگوی طیف عبور به خوبی حفظ شده است. افزون بر این، شبیه‌سازی اولیه، کمک شایانی نمود تا به جای ساخت نمونه‌های مکرر سه لایه‌ای برای رسیدن به یک شیشه هوشمند دارای عبور مناسب مرئی و بازتاب زیاد مادون قرمز، مستقیماً بر ساخت نمونه بهینه دارای ضخامت، نوع ماده و ترکیب و چگونگی لایه‌ها تمرکز نماییم. نمونه ساخته شده در این پژوهش در مقایسه با مقالات و پژوهش‌های انجام شده از بازتاب فروسرخ بالاتری برخوردار است. بنابراین ساختار با ترکیب  $ZrO_2/Au/ZrO_2$  به ضخامت حدود  $160/20/160$  نانومتر به عنوان یک شیشه هوشمند با ساختار انتخابگر طیفی مناسب معرفی می‌گردد.





**Fig. 16** (right) The 160 nm zirconium dioxide thin film on glass substrate, and (left) The gold layer with thicknesses of 5 and 10 nm.

**شکل ۱۶** (سمت راست) تصویر سطح لایه نازک ۱۶۰ نانومتری دی اکسید زیرکونیوم و (سمت چپ) لایه طلا با ضخامت‌های ۵ و ۱۰ نانومتر.

#### ۴. نتیجه گیری

در این پژوهش ساختار دی اکسید زیرکونیوم / طلا / دی اکسید زیرکونیوم به عنوان یک نمونه از دسته ساختارهای دی الکتریک / فلز / دی الکتریک برای ساخت شیشه هوشمند از نوع انتخابگر طیفی مورد بررسی، شبیه سازی و سپس ساخت، قرار گرفته است. این ساختار با هدف عبوردهی نور مرئی و بازتاب کنندگی یا جذب تابش مادون قرمز بکار گرفته شده است. شبیه سازی لایه نازک طلا از ضخامت ۴ تا ۲۵ نانومتر و سپس بهینه سازی ضخامت با گام‌های ۱ نانومتری افزایشی در ضخامت، برای بازه طیفی ۳۰۰ تا ۱۱۰۰ نانومتر، نشان از ضخامت بهینه ۲۰ نانومتر برای طلا دارد. شبیه سازی برای ضخامت  $ZrO_2$  از ۵۰ نانومتر تا ۲۰۰ نانومتر به صورت دو لایه متقارن و یافتن بهینه آن با شبیه سازی، نشان از کمینه ضخامت مناسب ۱۵۰ نانومتر داشته که نوک قله عبور مرئی در طول موج ۵۵۰ نانومتر را داشته باشد. سپس، شبیه سازی ساختار سه لایه شامل دو لایه متقارن  $ZrO_2$  از ۱۵۰ نانومتر تا ۲۰۰ نانومتر با یک لایه ثابت ۲۰ نانومتری طلا وسط آن، نشان داد که ترکیب با ضخامت‌های ۱۶۰/۲۰/۱۶۰ نانومتر برای  $ZrO_2/Au/ZrO_2$  می تواند برای بازه ۵۰۰ تا ۷۰۰ نانومتر مرئی بیش از ۷۰٪ عبوردهی داشته باشد و در عین حال در مادون قرمز نزدیک از حدود ۷۵۰ تا ۱۱۰۰ نانومتر، فقط ۱۰٪ تا ۲۰٪ عبوردهی داشته باشد. این به معنای بازتاب و جذب تابش حرارتی مادون قرمز بیش از ۸۰ درصد بوده است و از این رو، ترکیب و مواد با این ضخامت می تواند به عنوان بهینه انتخاب شود.

سپس در مرحله ساخت نمونه تجربی در آزمایشگاه، ابتدا پوشش طلای نمونه واقعی از ۴ تا ۱۵ نانومتر بر زیر لایه شیشه ساخته شد و رفتار آن در مقایسه با شبیه سازی بررسی شد که نشان از ۵ تا ۷ درصد

عبور کمتر نسبت به شبیه‌سازی‌ها نشان داد و مناسب به نظر می‌رسد. سپس لایه نازک  $ZrO_2$  به ضخامت ۱۶۰ نانومتر به بستر شیشه ساخته شد و عبور آن اندازه‌گیری شد که در تمام ناحیه طیفی ۳۵۰ تا ۱۱۰۰ نانومتر، عبور بیش از ۶۰ درصد بود. در نهایت ساختار سه‌لایه واقعی با ضخامت‌های ۱۶۰/۲۰/۱۶۰ نانومتر برای  $ZrO_2/Au/ZrO_2$  ساخته شد که به خوبی در ناحیه مرئی ۵۰۰ تا ۷۰۰ نانومتر، بیش از ۵۰ درصد عبوردهی داشته و در قله نیز تا ۷۰ درصد عبوردهی را نشان می‌دهد و در ناحیه مادون قرمز نزدیک از ۷۵۰ تا ۱۱۰۰ نانومتر، کمتر از ۲۰ درصد عبوردهی داشته است. مقایسه بین نمونه‌های شبیه‌سازی با نمونه واقعی ساخته شده به روش باریکه الکترونی در آزمایشگاه و بررسی نتایج طیف‌سنجی عبوری در محدوده مرئی - مادون قرمز نزدیک، شباهت زیادی برای نمونه واقعی با ضخامت ۱۶۰/۲۰/۱۶۰ نانومتر با نمونه شبیه‌سازی شده ۱۷۰/۲۰/۱۷۰ نانومتر را نشان داد. هرچند وجود منابع خطا در روش تجربی و آزمایشگاهی در کنار فرضیات شبیه‌سازی، اختلافی در حد ۱۰ نانومتر برای لایه دی‌الکتریک را نشان می‌دهد. در مجموع، با توجه به این نتایج، ترکیب  $ZrO_2/Au/ZrO_2$  با ضخامت‌های بهینه ۱۶۰/۲۰/۱۶۰ می‌تواند به عنوان یک شیشه هوشمند بسیار مناسب، دارای عبور کم حرارتی، به عنوان شیشه انتخابگر طیفی در پنجره‌های هوشمند برای مقاصد خنک‌سازی تابشی مورد استفاده قرار گیرد.

## ۵. تقدیر و تشکر

بدینوسیله از مرکز پژوهش‌های پسیو خورشیدی که ما را در انجام این تحقیق یاری کردند، صمیمانه تشکر می‌نمایم

## منابع

- [1] Guillén, C. and Herrero, "SnOx/Ag/SnOx heat-reflector coatings prepared by DC sputtering", *SN Applied Sciences* 2(10), 1717, 2020. <https://doi.org/10.1007/s42452-020-03508-1>
- [2] Javed, F., Javed, S., Mujahid, M., ul Inam, F. and Bhatti, A.S., "Modified optical characteristics of TiO<sub>2</sub>/Au/TiO<sub>2</sub> thin composite films", *Ceramics International* 45(17), 22336-22343, 2019. <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2019.07.262>
- [3] Dalapati, G.K., Masudy-Panah, S., Chua, S.T., Sharma, M., Wong, T.I., Tan, H.R. and Chi, D., "Color tunable low cost transparent heat reflector using copper and titanium oxide for energy saving application", *Scientific reports* 6(1), 20182, 2016. <https://doi.org/10.1038/srep20182>
- [4] Leftheriotis, G., Yianoulis, P. and Patrikios, D., "Deposition and optical properties of optimised ZnS/Ag/ZnS thin films for energy saving applications", *Thin solid films* 306(1), 92-99, 1997. [https://doi.org/10.1016/S0040-6090\(97\)00250-2](https://doi.org/10.1016/S0040-6090(97)00250-2)
- [5] Hassan, M.F., Sagor, R.H., Tathif, I., Rashid, K.S. and Radoan, M., "An optimized dielectric-metal-dielectric refractive index nanosensor", *IEEE Sensors Journal* 21(2), 1461-1469, 2020. <http://doi.org/10.1109/JSEN.2020.3016570>



- [6] Kim, S. and Lee, J.L., "Design of dielectric/metal/dielectric transparent electrodes for flexible electronics", *Journal of Photonics for Energy* 2(1), 021215-021215, 2012. <https://doi.org/10.1117/1.JPE.2.021215>
- [7] Çetinkaya, Ç., Çokduygular, E., Güzelçimen, F. and Kinacı, B., "Functional optical design of thickness-optimized transparent conductive dielectric-metal-dielectric plasmonic structure", *Scientific Reports* 12(1), 8822, 2022. <https://doi.org/10.1038/s41598-022-13038-y>
- [8] Butt, M.A., Fomchenkov, S.A. and Khonina, S.N., "Dielectric-Metal-Dielectric (DMD) infrared (IR) heat reflectors", In *Journal of Physics: Conference Series*, 917(6), 062007. IOP Publishing, 2017. <http://doi.org/10.1088/1742-6596/917/6/062007>
- [9] Ko, M., Lee, G., Kim, C., Lee, Y., Ko, J. and Song, H.J., "Dielectric/metal/dielectric selective reflector for improved energy efficiency of building integrated bifacial c-Si photovoltaic modules", *Current Applied Physics* 21, 101-106, 2021. <https://doi.org/10.1016/j.cap.2020.10.008>
- [10] Nawade, A., Ramya, K., Chakraborty, S., Bamola, P., Sharma, H., Sharma, M., Chakraborty, K., Ramakrishna, S., Biring, S., Wong, T.K.S. and Kumar, A., "Copper based transparent solar heat rejecting film on glass through in-situ nanocrystal engineering of sputtered TiO<sub>2</sub>", *Ceramics International* 48(2), 2482-2491, 2022. <https://doi.org/10.1016/j.ceramint.2021.10.030>
- [11] Xu, K., Du, M., Hao, L., Mi, J., Lin, Y., Li, S., Wang, J. and Deng, X., "Optical optimization and thermal stability of SiN/Ag/SiN based transparent heat reflecting coatings", *Infrared Physics & Technology* 122, 104089, 2022. <https://doi.org/10.1016/j.infrared.2022.104089>
- [12] Nur-E-Alam, M., Vasiliev, M. and Alameh, K., "Dielectric/metal/dielectric (DMD) multilayers: growth and stability of ultra-thin metal layers for transparent heat regulation (THR)", In *Energy Saving Coating Materials*, 83-112. Elsevier, 2020. <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-822103-7.00004-2>
- [13] Martin, P.M., *Handbook of deposition technologies for films and coatings: science, applications and technology*. William Andrew, 2009.
- [14] Howari, H. and Uddin, I., "Variations in optical properties of ZnS/Cu/ZnS nanostructures due to thickness change of ZnS cap layer", *Journal of Modern Materials* 2(1), 25-30, 2016. <https://doi.org/10.21467/jmm.2.1.25-30>
- [15] Pedrotti, F. L., & Pedrotti, L. S., shikh-o-eslami, M (1993). *Introduction to optics*. prentice Hall, iup publications, 4th edition (1388)(in persain) <https://doi.org/10.1017/9781108552493>
- [16] Daneshfar, N., Tabrizi, M., Amini-javid, S., "Study of optical of plasmonic nanoparticles on a dielectric substrate", *Iran applied physics* 8(1), 11-19, 2018. (in persain) <http://doi.org/10.22051/jap.2019.20668.1098>
- [17] Johnson, P.B. and Christy, R.W., "Optical constants of the noble metals", *Physical review B* 6(12), 4370, 1972. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.6.4370>
- [18] Wood, D.L. and Nassau, K., "Refractive index of cubic zirconia stabilized with yttria", *Applied Optics* 21(16), 2978-2981, 1982. <https://doi.org/10.1364/AO.21.002978>



This article is an open-access article distributed under the terms and conditions of the Creative Commons Attribution-Noncommercial 4.0 International (CC BY-NC 4.0 license) (<http://creativecommons.org/licenses/by-nc/4.0/>).

