

# 溅射法制备 a-GaN 薄膜的光学性质

贾璐 谢二庆<sup>†</sup> 潘孝军 张振兴

(兰州大学物理科学与技术学院, 兰州 730000)

**摘要:** 利用直流磁控溅射方法制备了非晶氮化镓(a-GaN)薄膜. X 射线衍射分析以及傅里叶变换红外吸收谱表明薄膜是非晶结构. 通过紫外-可见光谱测量得到, 样品随着衬底温度的升高而变厚, 光学带隙随着衬底温度的升高而变小, Ar 对薄膜的光学带隙和表面粗糙程度有很大的影响.

**关键词:** 直流溅射; a-GaN 薄膜; 光学带隙; 吸收系数

**PACC:** 7280N; 7820P; 7840G

**中图分类号:** O472      **文献标识码:** A      **文章编号:** 0253-4177(2006)S0-0109-04

## 1 引言

GaN 是一种宽带隙的直接禁带( $E_g = 3.39\text{eV}$ ) 半导体材料, 具有发光效率高、电子漂移饱和速度高、热导率高、介电常数小和化学性质稳定等优良特点. 因此, 近年来, 在高亮度的紫外-可见发光二极管(LED)、激光二极管(LD)和紫外探测器等光电子器件领域中, GaN 材料有着巨大的潜力和广阔的市场<sup>[1,2]</sup>. 过去, 人们主要研究如何制备完美的 GaN 单晶, 对非晶 GaN(a-GaN)的研究较少. 理论计算出, a-GaN 具有更大的禁带, 在禁带中基本没有缺陷能级<sup>[3-5]</sup>. 非晶薄膜还具有成本低, 能大面积成膜的优点, 因此近年来, a-GaN 的制备和性质引起人们的兴趣<sup>[5]</sup>. 利用金属 Ga 反应溅射制备 a-GaN 早有报道<sup>[6,7]</sup>. 20 世纪 90 年代后期, 人们采用反应溅射和离子束溅射等方法制备了 a-GaN 薄膜<sup>[8]</sup>. 本文采用直流(DC)反应溅射的方法在玻璃和硅衬底上制备了 a-GaN 薄膜, 并对其结构和光学性质进行了研究.

## 2 实验

实验中以高纯镓靶(99.999%)作为溅射物质, 靶与衬底的距离为 5cm; 通入氩气(Ar, 99.999%)和氮气( $\text{N}_2$ , 99.999%)溅射, 实验过程中氩气和氮气的总流量一定(30sccm). 实验的本底真空度为  $3 \times 10^{-3}\text{Pa}$ , 溅射压强为 4Pa, 溅射功率为 40W, 溅射时间约为 1h.

样品的 X 射线衍射(XRD)由 Philips X'Pert

型( $\text{CuK}\alpha$  源,  $\lambda = 0.154056\text{nm}$ ) X 射线衍射仪测量完成. 傅里叶变换红外吸收谱(FTIR)由 Nicolet NEXUS 670 谱仪测得, 紫外-可见光谱是利用谱析 TU-1901 型紫外可见分光光度计测得的.

## 3 结果与讨论

图 1 所示为在硅衬底上沉积的 GaN 样品的 XRD 谱. 我们可以观察到  $2\theta = 34^\circ$  和  $60^\circ$  处的两个衍射包, 它们可能来源于 GaN 薄膜, 也可能来源于 Si 衬底(200)和(400)峰的展宽. 图中, 我们没有观察到尖锐的 GaN 衍射峰, 表明样品是非晶结构<sup>[5]</sup>. 也没有观察到  $\text{Ga}_2\text{O}_3$  的衍射峰.

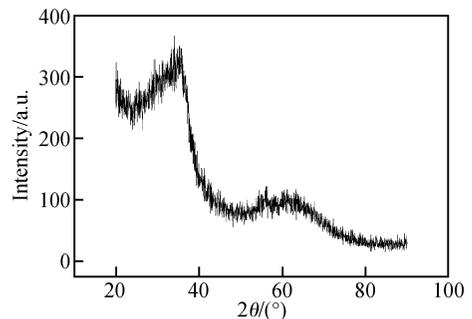


图 1 GaN 薄膜的 XRD 谱  
Fig.1 XRD of GaN film

图 2 所示为 a-GaN 的 FTIR 谱,  $560.6\text{cm}^{-1}$  的吸收峰来自于 Ga—N 键的伸缩振动模<sup>[9]</sup>,  $605.5\text{cm}^{-1}$  处的吸收峰来自于衬底 Si 的 C 污染<sup>[10]</sup>,  $1107\text{cm}^{-1}$  处的吸收峰来自于 Si—O 键的振动. 图中没有观察到 Ga—O 键的吸收峰.

<sup>†</sup> 通信作者. Email: xiceeq@lzu.edu.cn  
2005-10-30 收到

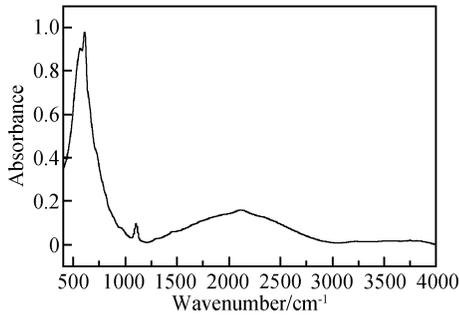


图 2 a-GaN 薄膜的红外吸收谱  
Fig.2 FTIR of a-GaN film

图 3 所示为玻璃衬底上 a-GaN 薄膜的透射谱. 随着 Ar 增多, 薄膜在可见光区的平均透过率逐渐减小. 原因是随着 Ar 分压增大, 薄膜中的 Ga 成分增多, 而金属在可见光区是不透明的. 由于干涉条件:  $2d\sqrt{n_2^2 - n_1^2 \sin^2 \theta_i} = k\lambda$  (增强) 或  $(k - 1/2)\lambda$  (减弱) 得到, 衬底温度 ( $T_s$ ) 为室温时, 薄膜平均厚度 ( $d$ ) 为 742.3nm;  $T_s$  为 420°C 时,  $d$  为 2062.4nm;  $T_s$  为 600°C 时,  $d$  为 2664.8nm.

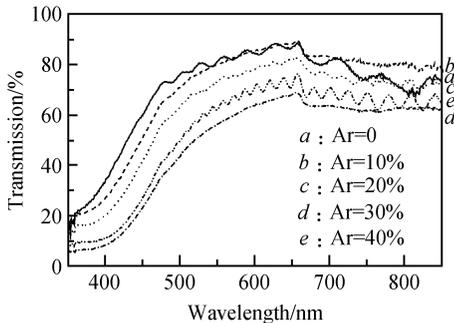


图 3 玻璃衬底上 a-GaN 的透射谱  
Fig.3 Transmission spectra of a-GaN films on glass

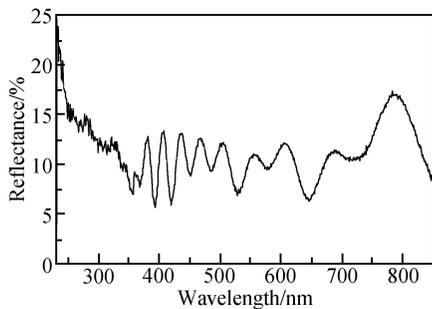


图 4 玻璃衬底上 a-GaN 薄膜的反射谱  
Fig.4 Reflectance spectrum of a-GaN films on glass

我们得到室温下(300K)薄膜的吸收系数(见图 5), 并由 Tauc 公式<sup>[11]</sup>:  $(\hbar\omega\alpha)^n \propto (\hbar\omega - E_g)$  得到薄膜的光学带隙  $E_g$  (见图 6). 式中,  $n = 2$ ,  $\alpha$  是薄膜的吸收系数,  $\hbar\omega$  为入射光子的能量. 如图 7 所示,  $T_s$  为室温时,  $E_g = 3.91 \sim 2.34\text{eV}$ . 随着 Ar 的增加,  $E_g$

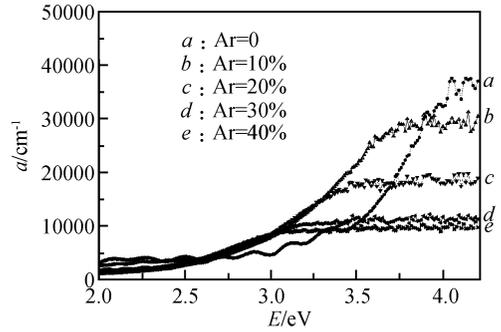


图 5 a-GaN 薄膜的吸收系数  
Fig.5 Absorption coefficient of a-GaN films

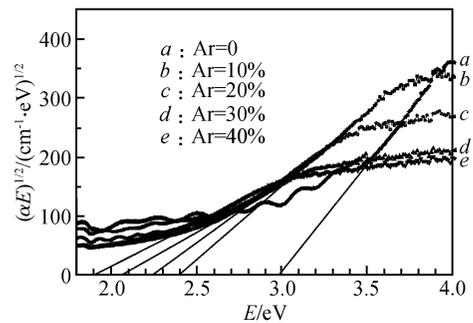


图 6  $(\alpha E)^{1/2}$  随入射光子能量的变化  
Fig.6  $(\alpha E)^{1/2}$  of a-GaN films

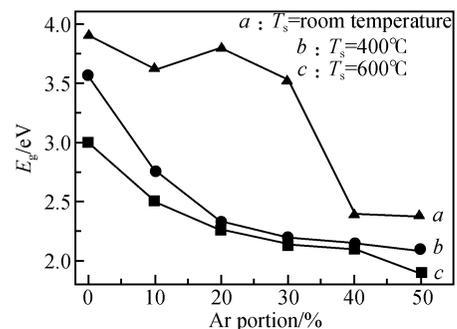


图 7 a-GaN 薄膜的光学带隙  
Fig.7 Optical bandgap of a-GaN films

变小. 在 Ar 分压小于 30% 时,  $E_g$  变化不大, 这是由于溅射出来的 Ga 有足够的 N 与其反应, 薄膜中未成键的 Ga 很少, 从而使溅射对 Ar 气压不敏感. 当 Ar 分量大于 30% 时,  $E_g$  显著减小.  $T_s$  为 420°C 时,  $E_g = 3.56 \sim 2.10\text{eV}$ .  $T_s$  为 600°C 时,  $E_g = 3.00 \sim 1.90\text{eV}$ . 当衬底温度升高时, 晶粒尺寸变大, 由公式:  $E_g = E_b + \frac{\pi\hbar^2}{2R^2} \left( \frac{1}{m_c^*} + \frac{1}{m_h^*} \right) - 0.248E_{\text{Ry}}^*$  [12,13] 可知,  $E_g$  随着晶粒半径 ( $R$ ) 变大而减小, 因此,  $E_g$  随着衬底温度的升高而变小. 在 a-GaN 中, 原子的长程无序性使同一分子中的两个原子之间的距离相对较长. 低温制备的薄膜中, a-GaN 的成分较多, 导电

和价带中的局域态增加,  $E_g$  变大.  $T_s$  较高时 ( $> 400^\circ\text{C}$ ) 薄膜的结晶性越好,  $E_g$  越接近单晶 GaN 的值.

Ar 较多时, 溅射出来的 Ga 较多, 到达衬底来不及弛豫, 又有新来的原子阻碍其继续弛豫, 形成原子团. 从而使薄膜均一性、光滑性较差, 薄膜更加粗糙.

吸收系数在能量较低时增大缓慢, 能量较高时增大较快. 可假定, 光子的吸收是由于电子跃迁, 则吸收系数由初始和最终的占据状态  $n_i$  和  $n_f$  决定:  $\alpha \propto \sum P_{if} n_i n_f$ , 其中,  $P_{if}$  是跃迁矩阵. 由此, 能量较低时的低吸收系数说明了禁带中的带隙态密度小. 因此, 更多 N 进入薄膜中时, 禁带更空. 但是, 不能说明这是 a-GaN 本身的性质还是过量的 N 钝化的结果. 由  $\alpha(E) = 4\pi K(E)/\lambda$  得到折射率 ( $n$ ) 和消光系数 ( $\kappa$ ) 与光子能量之间的关系 (见图 8), a-GaN 具有和单晶 GaN 十分接近的折射率<sup>[14]</sup>.

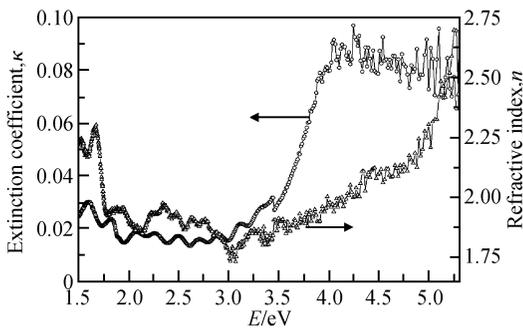


图 8 a-GaN 薄膜的消光系数和折射率

Fig.8 Extinction coefficient and refractive index of a-GaN films

## 4 结论

本文采用直流溅射法在硅和玻璃衬底上制备了 a-GaN 薄膜. XRD 表明, 室温下制备的样品是非晶

结构. UV-VIS 谱测量得到样品厚度为  $742.3 \sim 2664.8 \text{ nm}$ ,  $E_g$  为  $3.90 \sim 1.90 \text{ eV}$ , 得到的折射率和消光系数与单晶 GaN 的十分接近. 衬底温度较高时, 薄膜较厚, 光学带隙较小; 随着 Ar 增多, 薄膜表面越粗糙, 光学带隙越小.

## 参考文献

- [1] Pankove J I, Miller E A, Richman D, et al. GaN and related materials. Amsterdam: Gordon and Breach Science Publisher, 1997
- [2] Pearton S J. GaN-based materials and devices. Singapore: World Scientific Publishing, 2004
- [3] Stumm P, Drabold D A. Can amorphous GaN serve as a useful electronic material. Phys Rev Lett, 1997, 79: 677
- [4] Drabold D A. Density functionals. South Africa: Springer, 1998
- [5] Morigaki K. Physics of amorphous semiconductors. London: Imperial College Press, 1998
- [6] Hovel H J, Cuomo J J. Electrical and optical properties of rf-sputtered GaN and InN. Appl Phys Lett, 1972, 20: 71
- [7] Hariu T, Usuba T, Adachi H, et al. Reactive sputtering of gallium nitride thin films for GaAs MIS structures. Appl Phys Lett, 1978, 32: 252
- [8] Tam H H, Williams J S, Zou J, et al. Annealing of ion implanted gallium nitride. Appl Phys Lett, 1998, 72: 1190
- [9] Zhang Xiong, Hou Yongtian. Infrared reflectance of GaN films grown on Si(001) substrates. J Appl Phys, 2001, 89: 6165
- [10] Sun Yong, Miyasato T, Sonoda N, et al. Outdiffusion of the excess carbon in SiC films into Si substrate during film growth. J Appl Phys, 1998, 84: 6451
- [11] Tauc J. Amorphous and liquid semiconductors. London: Plenum, 1974
- [12] Kayanuma Y. Quantum-size effects of interacting electrons and holes in semiconductor microcrystals with spherical shape. Phys Rev B, 1988, 38: 9797
- [13] Kim K K, Koguchi N, Ok Y W, et al. Fabrication of ZnO quantum dots embedded in an amorphous oxide layer. Appl Phys Lett, 2004, 84: 3810
- [14] Lin M E, Sverdlov B N, Strite S, et al. Refractive indices of wurtzite and zincblende GaN. Electron Lett, 1993, 29: 1759

## Optical Properties of a-GaN Deposited by Sputtering

Jia Lu, Xie Erqing<sup>†</sup>, Pan Xiaojun, and Zhang Zhenxing

(School of Physical Science and Technology, Lanzhou University, Lanzhou 730000, China)

**Abstract:** GaN films are deposited by direct current reactive sputtering. X-ray diffraction (XRD), Fourier infrared absorption spectrum (FTIR), and UV-VIS spectrum are carried out. The XRD patterns indicate that the GaN films deposited at room temperature have amorphous structures. The UV-VIS spectrum indicates that the sample is thicker with increasing substrate temperature, but the optical bandgap is narrower. Ar pressure has a big influence on the bandgap and the roughness of the films.

**Key words:** sputter; a-GaN; optical bandgap; absorption coefficient

**PACC:** 7280N; 7820P; 7840G

**Article ID:** 0253-4177(2006)S0-0109-04

---

<sup>†</sup> Corresponding author. Email: xieeq@lzu.edu.cn

Received 30 October 2005