

行政院國家科學委員會專題研究計畫 期中進度報告

深紫外光電材料及奈米低維結構之摻雜活化機制的 X 光吸收  
光譜研究(1/2)

計畫類別：個別型計畫

計畫編號：NSC91-2112-M-009-033-

執行期間：91 年 08 月 01 日至 92 年 07 月 31 日

執行單位：國立交通大學電子物理學系

計畫主持人：陳文雄

共同主持人：李明知，陳衛國

報告類型：精簡報告

處理方式：本計畫可公開查詢

中 華 民 國 92 年 5 月 30 日

行政院國家科學委員會補助專題研究計畫成果  
報告

※※※※※※※※※※※※※※※※※※※※※※※※※※※※※※

※

※

※

※深紫外光電材料及奈米低維結構之摻雜活化機制的

※

※X 光吸收光譜研究(1/2)

※

※※※※※※※※※※※※※※※※※※※※※※※※※※※※※※

※

計畫類別：個別型計畫      整合型計畫

計畫編號：NSC 91-2112-M-009-033-

執行期間： 91 年 08 月 01 日至 92 年 07 月 31 日

計畫主持人：陳文雄

本成果報告包括以下應繳交之附件：

- 赴國外出差或研習心得報告一份
- 赴大陸地區出差或研習心得報告一份
- 出席國際學術會議心得報告及發表之論文各一份
- 國際合作研究計畫國外研究報告書一份

執行單位：國立交通大學電子物理學系

中 華 民 國 92 年 05 月 28 日

# 行政院國家科學委員會專題研究計畫成果報告

## 深紫外光電材料及奈米低維結構之摻雜活化機制的 X 光吸收光譜研究(1/2)

計畫編號：NSC 91-2112-M-009-033

執行期限：91 年 08 月 01 日至 92 年 07 月 31 日

主持人：陳文雄 國立交通大學電子物理學系

### 一、中文摘要

我們對摻雜鎂的氮化鎵薄膜進行鎵的 x 光吸收光譜進行熱退火研究，發現隨著退火時間的增加，近邊緣 x 光吸收光譜的極化相關性會隨之增加，顯示在六方晶相中有六方晶相的增加。由延伸邊緣的 x 光吸收光譜研究的分析，我們發現摻雜相關的缺陷，在樣品中是以非等方向性的方式形成的，隨著熱退火時間的增加，由於六方晶相的產生，以及原子排列整齊度的提昇，以至於德拜溫度隨之回升以及吸收振幅函數的非建設性干涉隨之減少，造成配位數隨著退火的增加而大幅回升的結果。

**關鍵詞：**x 光吸收光譜、氮化鎵、鎂摻雜、熱退火

### Abstract

Ga *K*-edge x-ray absorption measurements were employed to investigate thermal annealing effects on Mg-doped GaN films. Influences of thermal annealing on Mg-doped GaN are found to be anisotropic, and the influences are enhanced along the normal direction of the epilayers' surface. Our analysis revealed the shifting of structural mixing ratio and the increasing of Debye temperature. All the observed facts pointed to the increasing of the more stable wurzite configuration and the achievement of more orderliness of atomic arrangement.

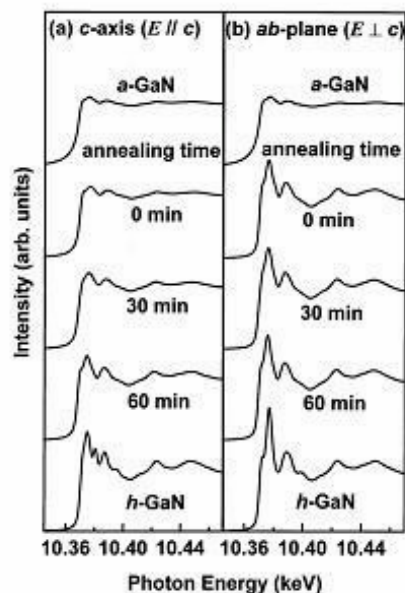
**Keywords:** x-ray absorption spectroscopy, GaN, Mg, doping, thermal annealing

## 二、緣由與目的

氮化鎵及相關三族氮化物已被應用在短波長發光元件、光偵測器、高溫元件以及高功率光電元件，因其具有極寬的直接能隙且有高的熱穩定性。[1]。為了達到元件發展之所需，其元件物理發展上最重要的關鍵步驟之一，就是 p 型氮化鎵電洞活化率的提高，而其中的重要關鍵步驟就是熱退火處理。最近的研究顯示，在元件所需的高濃度摻雜，通常鎂的濃度要到超過每立方公分十的二十次方以上的數量。在這種情形下的情形下，已有研究證實六方晶格會因侷域應力與堆疊錯誤而產生扭曲[2]，我們去年的研究計畫中，也發現在高濃度鎂摻雜的樣品中，發現一些摻雜相關的缺陷[3]。因此在本計畫中，我們運用 x 光吸收細微結構 (XAFS) 量測，對一系列不同濃度鎂摻雜的樣品，在不同退火時間的情形下進行研究。

## 三、結果與討論

圖一是我們對我們為摻雜的純六方晶相 (h-GaN)，純立方晶相 (a-GaN)，以及鎂固態濃度為  $2 \times 10^{20} \text{cm}^{-3}$  (x-GaN) 的氮化鎵樣品，在不同退火時間的條件下，進行 x 光吸收近邊緣結構 (XANES) 的譜圖。退火溫度是  $700^\circ\text{C}$ ，退火時間標示於圖上。第一個參考樣品，純立方晶相的氮化鎵 a-GaN，由於其混晶的特性，顯示出對電場的極化方向的不相關性。相反的，高鎂濃度摻雜的 x-GaN 及純六方晶相的 h-GaN 卻顯示出高度極化相關的特性

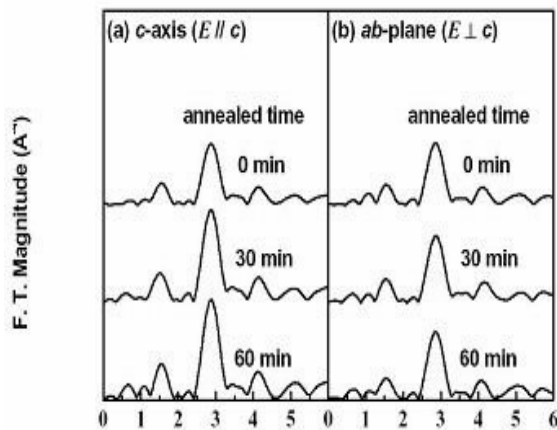


我們由圖一中也可觀察到，隨著退火時間的增加，XANES 譜圖的振盪幅度會隨之增強，顯示導帶的電子密度是隨之增加

的。這個趨勢和在冷激光光譜中所觀測到，近能帶邊緣躍遷的強度隨著退火時間的增加而增加的趨勢是一致的[4]。我們也觀察到，在入射電場平行  $c$  軸方向時，此增強效應較入射電場垂直  $c$  軸方向時要顯著，顯示熱退火對  $c$  軸  $p$ -DOS 的影響，比對  $ab$  軸  $p$ -DOS 的影響要顯著。

圖二是延伸邊緣 XAFS (EXAFS) 量測波數平方加權結果的傅立葉轉換強度對徑向距離的結果。我們也觀察到，在入射電場平行  $c$  軸方向時，傅立葉轉換強度隨退火時間增強的效應，較入射電場垂直  $c$  軸方向時要顯著。對以上結果作分析，我們可以得到第一層鍵長， $R(\text{Ga-N})$ ，第一層的配位數， $N(\text{Ga-N})$ ，第二層鍵長， $R(\text{Ga-Ga})$ ，以及第二層的配位數， $N(\text{Ga-Ga})$ 。

前兩層的配位數  $N(\text{Ga-N})$  和  $N(\text{Ga-Ga})$ ，分別由 0.347 增加到 0.580 以及分別由 1.830 增加到 3.020。而相關的德拜塞勒因子也在退火過程中，分別由 4.25 減少至 2.68 以及由 7.43 減少到 4.66。德拜塞勒因子的減少是由於在退火過程中，原子排列的整齊度增高所致。而前兩層的鍵長， $R(\text{Ga-N})$  及  $R(\text{Ga-Ga})$ ，也分別由 1.943 增加到 1.946 以及 3.188 到 3.1959 埃。根據我們去年的研究結果，我們相信鍵長在退火時間增加中回升，也是由於結構整齊度的提昇所致。在後面我們也



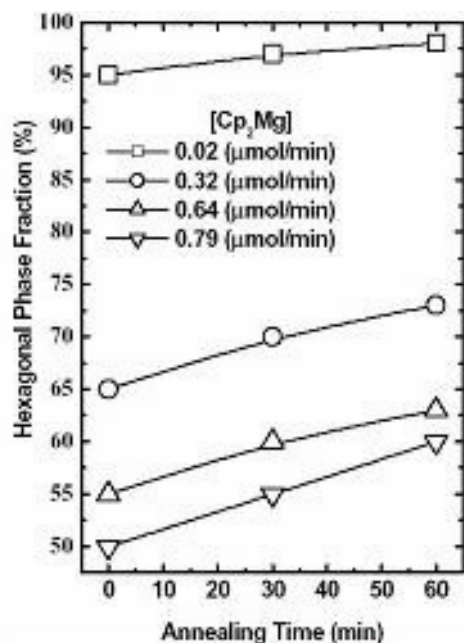
會再說明。

爲了研究熱退火時間對鎂摻雜氮化鎵薄膜的影響，我們運用我們去年所發展的理論模型，將模擬的  $k^3 \chi(k)$  對  $k$  的關係圖與實驗值比較，考路在不同的德拜溫度以及六方及立方晶相百分比，由最適模擬結果我們可以得到，不同退火時間下的六方晶相百分比。

圖三顯示  $x$ -GaN 在剛成長完未退火，退火三十分鐘，以及退火六十分鐘之下，各個不同的鎂摻雜濃度樣品，其六方晶相百分比對退火時間的關係圖。我們可以發現，無論是未退火，或退火三十分鐘，或退火六十分鐘的樣品，隨著摻雜濃度的增加，六方晶相的百分比都會隨之減少。這是由於鎂的摻雜增加，會導致樣品中立方晶相的形成，進而減少樣品中六方晶相的百分比。對每個樣品而言，隨著退火時間的增加，其六方晶相的百分比會隨之增加，這個趨勢表示樣品隨著

退火時間的增加，會趨向更穩定的結構。六方晶相結構的增加，也和樣品 c 軸鍵長增加的趨勢是一致的，因為六方晶相在 c 軸的鍵長，比立方晶相要長的緣故。

圖四顯示 x-GaN 在剛成長完未退火，退火三十分鐘，以及退火六十分鐘之下，各個不同的鎂摻雜濃度樣品，其德拜溫度對退火時間的關係圖。我們可以發現，無論是未退火，或退火三十分鐘，或退火六十分鐘的樣品，隨著摻雜濃度的增加，德



圖三

圖四

拜溫度都會隨之減少。而隨著退火溫度的增加，我們發現無論是哪一個摻雜濃度的 GaN，其德拜溫度都會隨之增加，也同步驗證樣品的原子排列整齊度是隨之增加的。

#### 四、計畫成果自評

透過 x 光吸收光譜以及對譜圖建立模型模擬的方法，我們首次發現鎂摻雜的氮化鎵，會有鍵長增加，整齊度增加以及六方晶相增加，以及最佳德拜溫度增加的現象，相信對摻雜三五族深紫外氮化物之退火效應的物理特性研究，具有深入的影響。

#### 五、參考文獻

- [1] H. Morkoc, S. Strite, G. B. Gao, M. E. Lin, B. Sverdlov, and M. Burns, J. Appl. Phys. **76**, 1363 (1994).
- [2] S. Y. Tsen, D. J. Smith, K. T. Tsen, W. Kim, and H. Morkoc, J. Appl. Phys.

82, 6008 (1997).

[3] Y. C. Pan, S. F. Wang, W. H. Lee, M. C. Lee, W. K. Chen, W. H. Chen, L. Y. Jang, J. F. Lee, C. I. Chang, H. Chang, K. T. Wu, and D. S. Lin, Appl. Phys. Lett. **78**, 31 (2001).

[4] F. Shahedipour and B. W. Wessels, Appl. Phys. Lett. **76**, 3011 (2000).

