

镁含量和热处理对 $Zn_{1-x}Mg_xO$ 薄膜结构 和发光性能的影响

周 军[†] 方庆清[‡] 王保明 刘艳美 李 貌 闫方亮 王胜男

(安徽大学物理与材料科学学院, 光电信息获取与控制教育部重点实验室, 合肥 230039)

(2008 年 1 月 19 日收到, 2008 年 3 月 30 日收到修改稿)

采用溶胶-凝胶工艺在玻璃衬底上制备了 $Zn_{1-x}Mg_xO$ ($x = 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.6, 0.7$) 薄膜. X 射线衍射谱 (XRD) 测试结果发现, 在 $0.1 < x < 0.3$ 范围内, 薄膜仍然保持氧化锌六角纤锌矿结构 (002) 面衍射峰位向大角度方向移动, 超过 0.3 时出现氧化镁立方相. 对镁含量为 0.1, 0.2, 0.3 薄膜的光致发光谱研究表明, 紫外发光峰随镁含量的增加向短波方向移动. 对于 $Zn_{0.9}Mg_{0.1}O$ 薄膜, 在 5.5 和 6 °C/min 的升温速率下, 升温速率越快结晶程度越好. 在相同升温速率下, 随着退火温度从 500 °C 升高到 560 °C, 样品的结晶程度变好, 当退火温度达到 590 °C 时, 结晶质量下降.

关键词: 氧化锌, 结构, 禁带宽度, 光致发光谱

PACC: 7855, 7850, 7850G

1. 引 言

氧化锌是一种重要的直接带隙的宽禁带半导体材料, 已被广泛用到表面声波谐振器件^[1], 压电器件^[2], 太阳能电池^[3]和光发射等领域. 室温下带隙宽度约为 3.4 eV, 激子束缚能高达 60 meV^[4], 具有纤锌矿结构, 属六方晶系. ZnO 化学稳定性好、材料来源丰富、价格低廉, 通过掺杂具有很好的磁、光、电性能^[5-7], 是光电器件极具潜力的材料. 目前 $Mg_xZn_{1-x}O$ 薄膜作为一种新兴的光电材料, 引起了人们的浓厚兴趣. 通过改变 Mg 的含量可使禁带宽度从 3.3—7.8 eV^[6] 连续可调, 从而可以制得覆盖从蓝光到紫外光谱区域的半导体激光器. 带隙连续可调, 可以用来作为 $ZnO/Mg_xZn_{1-x}O$ 半导体量子阱及超晶格等结构的势垒层. 因此, 对 Mg 掺杂 ZnO 薄膜制备和性质的研究是一项很有意义的课题. 制备 $ZnMgO$ 薄膜的方法很多, 有射频溅射法, 分子束外延法 (MBE), 脉冲激光沉积法 (PLD), 化学气相沉积法 (CVD), 金属有机化学气相沉积法 (MOCVD)^[3, 8-10], 溶胶-凝胶 (sol-gel) 法^[5], 水热法^[7], 电子束蒸发法, 锌膜氧化法等. 溶胶-凝胶法工艺简单, 适合大面积制备. 本文采

用溶胶凝胶法, 制备出不同 Mg 含量掺杂的 ZnO 薄膜, 研究了不同 Mg 含量、不同退火处理对 ZnO 薄膜的微结构及光学性能的影响.

2. 实 验

本实验所使用的主要原料有二水合乙酸铕 $Zn(CH_3COO)_2 \cdot 2H_2O$, 分析纯, 四水合乙酸镁 $[Mg(CH_3COO)_2 \cdot 4H_2O]$, 分析纯, 聚乙烯醇 (PVA) 等, 衬底为玻璃片. $Zn_{1-x}Mg_xO$ 薄膜的制备过程如下: 将一定量的 PVA 粉末溶于 80 °C 的去离子水中, 配制成 6% 的 PVA 胶体, 加入摩尔比为 $(1-x):x$ 的分析纯醋酸铕 ($Zn(CH_3COO)_2 \cdot 2H_2O$) 与分析纯醋酸镁 ($Mg(CH_3COO)_2 \cdot 4H_2O$), 金属离子的总浓度为 0.3 mol/L, 充分搅拌, 直到溶液形成透明溶胶. 将溶胶滴加到清洗过的玻璃衬底上, 利用甩胶机 (1000—2500 r/min) 将溶胶均匀涂覆, 在 150 °C 的烘箱中放置 5 min, 以上过程重复数次, 达到所需要的厚度. 最后将样品在不同的退火工艺下处理. 为了分析镁含量和热处理对 $Zn_{1-x}Mg_xO$ 薄膜结构和发光性能的影响, 制备了不同镁含量和不同热处理的 $Zn_{1-x}Mg_xO$ 薄膜.

[†] E-mail: fzz886@163.com

[‡] 通讯联系人. E-mail: physfangqq@126.com

3. 结果与讨论

3.1. Mg^{2+} 含量和热处理对 $Zn_{1-x}Mg_xO$ 薄膜结构的影响

图 1 和图 2 分别给出了 Mg 含量为 0.1、0.2、0.3 的 $Zn_{1-x}Mg_xO$ 薄膜和 Mg 含量分别为 0.3、0.4、0.5、0.6 的 $Zn_{1-x}Mg_xO$ 薄膜的 X 射线衍射谱 (Mac Science 公司的 MXP18AHF 转靶 X 射线衍射仪, 测试条件为 $CuK\alpha$ 靶, 波长为 0.154056 nm, 管压为 40 kV, 管流为 100 mA). 薄膜厚度均为 15 层. 样品热处理时的升温速率为 5.5 $^{\circ}C/min$, 退火温度为 500 $^{\circ}C$. 可以看出, Mg 含量为 0.1、0.2、0.3 的 $Zn_{1-x}Mg_xO$ 薄膜样品的衍射峰都对应着纤锌矿 ZnO 多晶结构. 这意味着 Mg^{2+} 进入了 ZnO 薄膜的晶格中, 仍然保持 ZnO 纤锌矿结构. 当 Mg 含量超过 0.3 时, 除了 ZnO 的纤锌矿结构衍射峰之外, 还出现了 MgO 立方相的 (100) 衍射峰 (峰位在 43°). 随着 Mg 含量的增加, (100) 峰强度逐渐增大, 这是因为过量的 Mg^{2+} 离子易与空气中的 O_2 结合形成 MgO . 这与 Ohtomo, Kawasaki 和 Zhang 等人^[10,11]的研究是一致的. Ohtomo 和 Kawasaki 等人认为当 $x > 0.36$ 时 MgO 相开始分离. Zhang 等人利用金属有机化学气相沉积方法 (MOCVD) 制备出 $Zn_{1-x}Mg_xO$ 薄膜, 发现 $Zn_{1-x}Mg_xO$ 薄膜在 $0 \leq x \leq 0.39$ 时仍然保持 ZnO 纤锌矿结构. 同时我们可以看到随着 Mg 含量增加到 0.6, (002) 面择优取向被削弱, 这可能是由于 Mg 的掺入以及第二相的出现增加了薄膜的内应力.

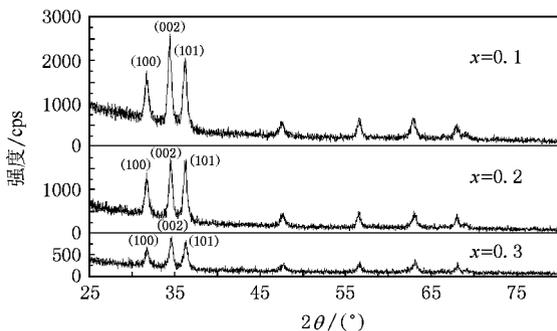


图 1 $Zn_{1-x}Mg_xO$ 薄膜的 XRD 谱 (x 分别 0.1、0.2、0.3)

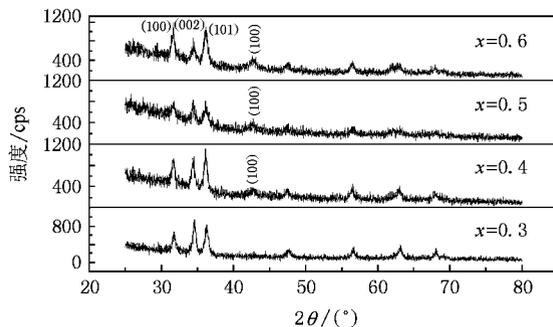


图 2 $Zn_{1-x}Mg_xO$ 薄膜的 XRD 谱 (x 分别 0.3、0.4、0.5、0.6)

Mg 含量为 0.1、0.2、0.3 的 $Zn_{1-x}Mg_xO$ 薄膜晶体结构常数计算公式如下:

$$2d \sin \theta = \lambda, \quad (1)$$

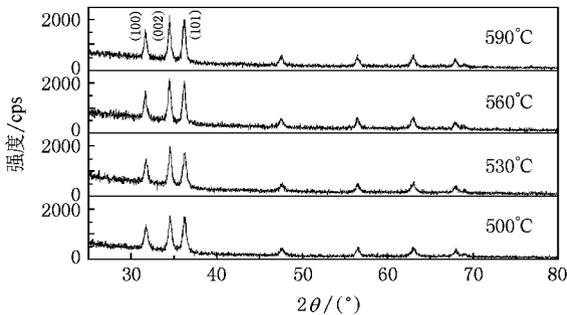
$$a = d_{hkl} \sqrt{\frac{4}{3}(h^2 + hk + k^2) + l^2(a/c)^2}. \quad (2)$$

(1) 式中 λ 是 X 射线源波长, $\lambda = 0.154056$ nm, d 为晶面间距, θ 为衍射角. (2) 式中 h, k, l 为密勒指数, a, b, c 为晶格常数. 具体的微结构计算数据如表 1 所示. 从表 1 可以看出, 随 Mg 含量的增加, $Zn_{1-x}Mg_xO$ 薄膜三个主衍射峰均向大角度方向移动, 这是因为 Mg^{2+} 半径 (0.057 nm) 比 Zn^{2+} 半径 (0.060 nm) 略小, Mg^{2+} 取代 Zn^{2+} 后引起晶格常数变小所致. 从表 1 中可以看到 x 值从 0.1 变化到 0.3, 样品 (002) 衍射峰的半高宽有微弱增加, 这说明随 Mg 掺入量的增加, 样品结晶质量下降.

表 1 不同含量的 $Zn_{1-x}Mg_xO$ 薄膜的微结构参数

| 结构常数 | $Zn_{0.9}Mg_{0.1}O$ | $Zn_{0.8}Mg_{0.2}O$ | $Zn_{0.7}Mg_{0.3}O$ |
|--------------------------|---------------------|---------------------|---------------------|
| $2\theta(100)(^{\circ})$ | 31.68 | 31.70 | 31.76 |
| $2\theta(002)(^{\circ})$ | 34.44 | 34.48 | 34.60 |
| $2\theta(101)(^{\circ})$ | 36.24 | 36.32 | 36.34 |
| $d(100)/nm$ | 0.2822 | 0.2820 | 0.2815 |
| $d(002)/nm$ | 0.2602 | 0.2599 | 0.2590 |
| $d(101)/nm$ | 0.2477 | 0.2471 | 0.2470 |
| $B/\text{rad}(002)$ | 0.0069 | 0.0071 | 0.0076 |
| a/nm | 0.3259 | 0.3257 | 0.3251 |
| c/nm | 0.5204 | 0.5198 | 0.5180 |

图 3 是相同实验条件、工艺下制备出的 $Zn_{0.8}Mg_{0.2}O$ 薄膜, 在 5.5 $^{\circ}C/min$ 的升温速率下, 经过 500、530、560 和 590 $^{\circ}C$ 四个不同退火温度保温 1 h 后的 XRD 谱. 从表 2 中, 我们可以看出, 随着退火温度从 500 $^{\circ}C$ 升高到 560 $^{\circ}C$, 样品 (002) 衍射峰的半高

图 3 不同退火温度 $Zn_{0.8}Mg_{0.2}O$ 薄膜 XRD 谱

宽减小, 结晶程度变好, 当温度继续升高到 $590\text{ }^{\circ}\text{C}$, 样品的(002)衍射峰的半高宽有所增加. 根据薄膜生长原理, 当退火温度较低时, 衬底上原子的能量就比较低, 很容易就地成核, 所以所制备的薄膜易成为无任何择优取向的多晶薄膜, 晶体质量较差; 当退火温度升高时, 原子可以获得足够的能量以迁移至适合的成核位置, 晶体质量得到改善, 能够促进低能面(002)的择优生长^[12], 退火温度过高时, 可以导致 Zn 元素的挥发, O 元素的吸附, 致使生长的晶体不符合化学计量比, 引入大量的缺陷, 结晶质量变差.

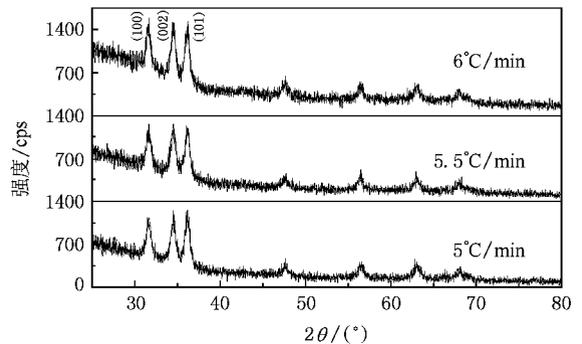
表 2 不同退火温度 $Zn_{0.8}Mg_{0.2}O$ 薄膜半高宽

| 退火温度/ $^{\circ}\text{C}$ | 500 | 530 | 560 | 590 |
|--------------------------|--------|--------|--------|--------|
| $B/\text{rad}(002)$ | 0.0071 | 0.0060 | 0.0058 | 0.0059 |

图 4 是不同升温速率的 $Zn_{0.7}Mg_{0.3}O$ 薄膜 XRD 谱, 升温速率分别为 $5, 5.5, 6\text{ }^{\circ}\text{C}/\text{min}$, 退火温度 $450\text{ }^{\circ}\text{C}$, 薄膜厚度为 6 层. 所有样品的衍射峰都对应着纤锌矿 ZnO 多晶结构. 这意味着 Mg 替代 Zn 进入 ZnO 晶格中. 表 3 列出了不同升温速率 $Zn_{0.7}Mg_{0.3}O$ 薄膜主峰的峰强和峰位以及(002)峰半高宽. 可以看出随着升温速率从 $5\text{ }^{\circ}\text{C}/\text{min}$ 增加到 $6\text{ }^{\circ}\text{C}/\text{min}$, 样品(002)峰半高宽逐渐减小, 结晶程度变好, 而且(100)(002)(101)三个主峰的强度也随之增大. 由此可以看出在一定范围内提高升温速率有利于样品的结晶.

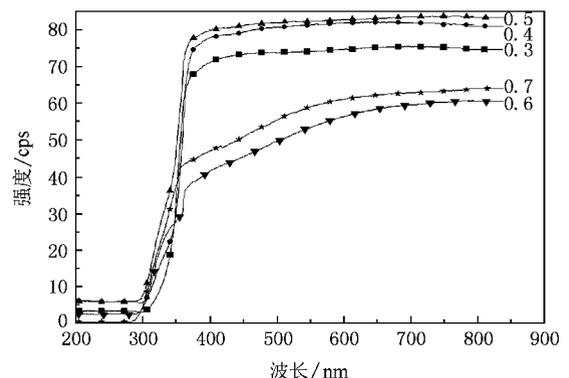
表 3 不同升温速率的 $Zn_{1-x}Mg_xO$ 薄膜的结构参数

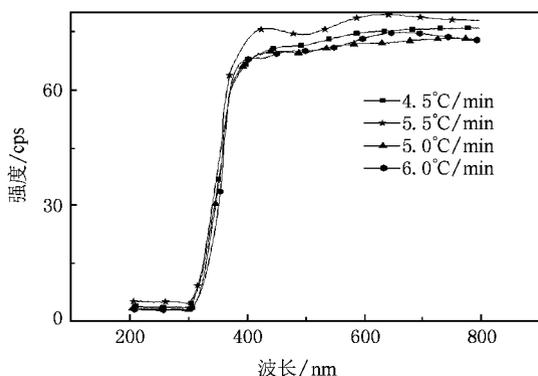
| 升温速率 ($^{\circ}\text{C}/\text{min}$) | $B/\text{rad}(002)$ | (100)峰强 和峰位 | (002)峰强 和峰位 | (101)峰强 和峰位 |
|---|---------------------|----------------|----------------|----------------|
| 5 | 0.0094 | 31.64° 1133 | 34.54° 1186 | 36.18° 1260 |
| 5.5 | 0.0090 | 31.62° 1266 | 34.54° 1266 | 36.16° 1206 |
| 6 | 0.0082 | 31.62° 1586 | 34.52° 1513 | 36.14° 1526 |

图 4 不同升温速率(5, 5.5, 6 $^{\circ}\text{C}/\text{min}$)的 $Zn_{1-x}Mg_xO$ 薄膜 XRD 谱

3.2. Mg^{2+} 含量和热处理对 $Zn_{1-x}Mg_xO$ 薄膜透射光谱的影响

图 5 是镁含量分别为 0.3, 0.4, 0.5, 0.6, 0.7 的 $Zn_{1-x}Mg_xO$ 薄膜透射光谱. 它们是利用 UV-265 紫外可见分光光度仪测量的. 从图中可以看出, 前三个样品在可见区都有很高的透射率, 平均透射率达 80%, 而后两个样品的平均透射率则只有 60% 左右. 这可能是掺入 Mg^{2+} 离子的含量过多, 产生 MgO 立方相所导致的, 这与 XRD 谱相一致. 入射光波长小于 400 nm 后, 透射率急剧下降, 形成吸收边. 图 6 是 $x = 0.3$, 退火温度为 $500\text{ }^{\circ}\text{C}$, 升温速率分别为 $4.5, 5, 5.5$ 和 $6\text{ }^{\circ}\text{C}/\text{min}$ 的四个样品的透射光谱. 从图中我们可以看出, 所有样品薄膜在可见光区都有较高的透射率, 平均透射率达 75%. 另外, 从图中我们可以看出, 升温速率在 4.5 到 $6\text{ }^{\circ}\text{C}/\text{min}$ 之间调节对薄膜的透射率没有太大的影响, 这也说明我们制备的 $Zn_{0.7}Mg_{0.3}O$ 薄膜结构比较单一, 透光性能好.

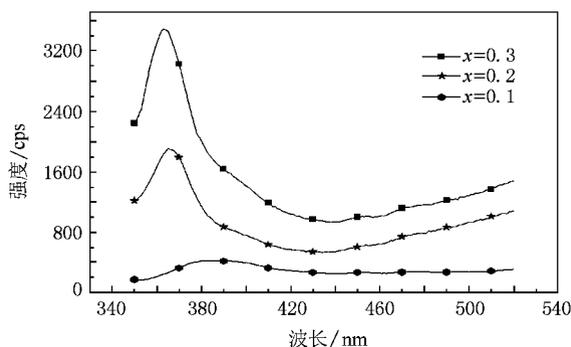
图 5 不同含量的 $Zn_{1-x}Mg_xO$ 薄膜的透射光谱($x = 0.3, 0.4, 0.5, 0.6, 0.7$)

图6 不同升温速率 $Zn_{0.7}Mg_{0.3}O$ 薄膜的透射光谱

3.3. 不同 Mg 含量对 $Zn_{1-x}Mg_xO$ 薄膜光致发光的影响

图 7 是 $Zn_{1-x}Mg_xO$ ($x = 0.1, 0.2, 0.3$) 薄膜在室温条件下的光致发光 (PL) 谱 (F-4500 荧光分光光度计, Xe 灯激发, 激发波长为 325 nm), 样品的退火温度为 500 °C, 其薄膜的厚度为 15 层, 升温速率为 5.5 °C/min. 由图可知, 在 340 到 520 nm 的范围内, 样品均有较强的紫外发射峰, 以及波长为 403 nm 的弱紫外发射峰. 在可见光波段, 镁含量为 0.2 和 0.3 样品出现了 452 和 473 nm 的两个发光峰. 较强的紫外发射峰应归于 ZnO 薄膜的近带边发射. 其余的对应于薄膜中出现的缺陷或杂质能级所引入的发射峰. 对于 452 nm 附近的发光峰, 普遍认为这是由于氧缺陷引起的. 根据 Sun 等人的计算^[13-15], 锌间隙 (Zn_i) 大约在导带底 0.46 eV 处产生一个浅施主能级, 锌空位在价带顶 0.3 eV 处产生一个浅受主能级. 我们认为 403 nm 的发射峰应为电子从导带底到锌空位 (V_{Zn}) 的能级之间跃迁的结果 (对应能量为 3.06 eV), 而 473 nm (2.627 eV) 的发光峰与电子从锌间隙能级到锌空位能级之间跃迁 (对应能量为 2.60 eV) 较为接近. 从图中我们可以看到, 随着镁含量由 0.1 增加到 0.3, 403 和 473 nm 的发射峰逐渐增强. 由此认为 Mg 掺杂导致更多锌间隙 (Zn_i) 和锌空位 (V_{Zn}) 缺陷的产生.

随着 Mg^{2+} 离子含量在薄膜中的增加, $Zn_{1-x}Mg_xO$ 薄膜的光致发光峰蓝移, 合金的带隙逐渐展宽. 理论计算表明^[16], Zn 4s 态决定导带底的位置, Mg 的替位掺杂导致 Zn 4s 态向高能端偏移导致 ZnO 晶体的禁带宽度增大. 最近黄丹等人^[17]采用第一性原理计算方法, 计算了 $Zn_{1-x}Mg_xO$ 的电子结构, 计算

图7 $Zn_{1-x}Mg_xO$ 薄膜在室温条件下的光致发光谱

结果也表明, Mg 的掺入使 ZnO 的电子结构发生较大的改变, 与 Mg 邻近的 O 原子得到电子的数目明显增大, 进而 O 原子返回部分电子给邻近 Zn 原子, Zn—O 间相互作用减弱, 禁带宽度变大. 这也说明, 在我们所制备的样品中, 镁有效地替代锌进入 ZnO 晶格. 另外, 从图 7 还可以看出随着 Mg^{2+} 离子含量从 0.1 增加到 0.3, 紫外发光峰的强度逐渐增强, 当 $x = 0.3$ 时薄膜样品的发光峰强度最大, 半高宽最小. 从 $x = 0.3$ 的光致发光谱可以计算出 ($E = hc/\lambda$) 发射峰对应的能量为 3.41 eV, 与纯的 ZnO 相比有着明显的增大.

我们对 $x = 0.3$ 的样品做进一步分析. 根据直接带隙半导体材料吸收系数公式:

$$\alpha(h\nu) = A(h\nu - E_g)^2, \quad (3)$$

其中, A 是常数, $h\nu$ 是入射光子的能量, E_g 为室温下 ZnO 的光学带隙. 当 $h\nu = E_g$ 时, $\alpha(h\nu) = 0$. 通过对 $x = 0.3$ 样品的吸收光谱进行拟合, 可以计算出样品的带隙宽度. 如图 8 所示, 从图中拟合直线与 x 轴的交点可以看出, 该样品的禁带宽度约为 3.52 eV. 相对于 ZnO 单晶的 3.4 eV^[4] 有着明显的增加. 这说明 Mg 掺杂可以有效地增加 ZnO 的光学带隙.

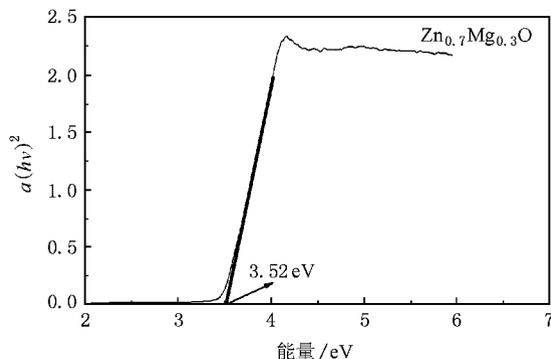


图8 从吸收光谱得到的光学带隙

4. 结 论

采用溶胶-凝胶工艺在玻璃衬底上制备了 $Zn_{1-x}Mg_xO$ ($x = 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.6, 0.7$) 薄膜. XRD 测试结果发现: 在 $0.1 < x < 0.3$ 范围内, 薄膜仍保持六角型纤锌矿结构, 随 x 增加, 三个主衍射峰位向大角度方向移动, 晶格常数变小; $x > 0.3$ 时, 薄膜不再是单一的 ZnO 纤锌矿结构, 出现了 MgO 的立方相. 光致发光谱发现: 在紫外波段, 样品 ($0.1 < x < 0.3$) 均出现近紫外发射峰, 以及波长为 403 nm 的弱紫外发射峰, 其中近紫外发光峰随 Mg 含量的增加向短波方向移动; 在可见光波段, 镁含量

为 0.2 和 0.3 样品还出现了 452 和 473 nm 的两个发光峰. 对不同升温速率、不同退火温度样品的研究发现: 随着升温速率从 4.5 °C/min 增加到 6.0 °C/min, 样品结晶程度变好; 随着退火温度从 500 °C 升高到 560 °C, 样品的结晶性能得到提高, 当退火温度达到 590 °C 时, 结晶质量下降. 对不同升温速率 $Zn_{0.7}Mg_{0.3}O$ 薄膜的透射光谱的研究发现, 升温速率在 4.5—6 °C/min 调节对薄膜的透过率没有太大影响, 这也说明我们制备的薄膜结构比较单一, 没有出现相的分离. 因此, 在确定 Mg 含量之后, 选择恰当的升温速率和退火温度可以在不影响透过率情况下有效地调节光学带隙, 制备出高质量的 $Zn_{1-x}Mg_xO$ 薄膜, 这对于近紫外光器件的研制有着非常重要的意义.

- [1] Ono S , Kiyotaka K , Hayakawa S 1977 *Wave Electronics* **3** 35
- [2] Krupanidhi S B , Sayer M 1984 *J. Appl. Phys.* **56** 3308
- [3] Meng F Y , Chiba Y , Yamada A , Konagai M 2007 *Solar Energy Materials Materials & Solar Cells* **91** 1887
- [4] Pearton S J , Norton D P , Ip K , Heo Y W , Steiner T 2003 *Superlattices and Microstructures* **34** 3
- [5] Yang J J , Fang Q Q , Wang B M , Wang C P , Zhou J , Li Y , Liu Y M , Lü Q R 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 1116 [杨景景、方庆清、王保明、王翠平、周 军、李 雁、刘艳美、吕庆荣 2007 物理学报 **56** 1116]
- [6] Yang W , Hullavarad S S , Nagaraj B , Takeuchi I , Sharma R P , Venkatesan CSR T 2003 *Appl. Phys. Lett.* **82** 3424
- [7] Liu Y M , Fang Q Q , Wu M Z , Li Y , Lü Q R , Zhou J , Wang B M 2007 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **40** 4592
- [8] Chen X L , Xue J M , Zhang D K , Sun J , Ren H Z , Zhao Y , Geng X H 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 1563 [陈新亮、薛俊明、张德坤、孙 建、任慧志、赵 颖、耿新华 2007 物理学报 **56** 1563]
- [9] Wang J R , Ye Z Z , Huang J Y , Ma Q B , Gu X Q , He H P , Zhu L P , Lu J G 2007 *Mater. Lett.* **62** 1263
- [10] Zhang Y T , Du G T , Liu D L , Zhu H C , Cui Y G , Dong X , Yang S R 2004 *Journal of Crystal Growth* **268** 140
- [11] Ohtomo A , Kawasaki M , Koida T , Masubuchi K , Koiuma H 1998 *Appl Phys Lett.* **72** 2466
- [12] Liu Y M , Fang Q Q , Li Y , Lü Q R , Zhou J , Wu M Z , Song X P , Sun Z Q 2007 *Journal of Functional Materials* **10** 1580 [刘艳美、方庆清、李 雁、吕庆荣、周 军、吴明在、宋学萍、孙兆奇 2007 功能材料 **10** 1580]
- [13] Sun Y M 2000 *Ph. D. Thesis* (Hefei : University of Science and Technology of China) [in Chinese] 孙玉明 2000 博士论文 (合肥 : 中国科学技术大学)]
- [14] Xu P S , Sun Y M , Shi C S , Xu F Q , Pan H B 2001 *Science in China (Series A)* **44** 1174
- [15] Lin B X , Fu Z X , Jia Y B , Liao G H 2001 *Acta Phys. Sin.* **50** 2208 [in Chinese] 林碧霞、傅竹西、贾云波、廖桂红 2001 物理学报 **50** 2208]
- [16] Jin X L , Lou S Y , Kong D G , Li Y C , Du Z L 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 4809 [in Chinese] 靳锡联、娄世云、孔德国、李蕴才、杜祖亮 2006 物理学报 **55** 4809]
- [17] Huang D , Shao Y Z , Chen D H , Guo J , Li G X 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 1078 [in Chinese] 黄 丹、邵元智、陈弟虎、郭 进、黎光旭 2008 物理学报 **57** 1078]

Effect of annealing and Mg content on the microstructure and optical properties of $Zn_{1-x}Mg_xO$ films

Zhou Jun[†] Fang Qing-Qing[‡] Wang Bao-Ming Liu Yan-Mei Li Mao Yan Fang-Liang Wang Sheng-Nan

(*Key Laboratory of Opto-electronic Information Acquisition and Manipulation, School of Physics and Materials,*

Anhui University, Hefei 230039, China)

(Received 19 January 2008 ; revised manuscript received 30 March 2008)

Abstract

The $Mg_xZn_{1-x}O$ ($x = 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.6$ and 0.7) thin films were prepared on glass substrate by the Sol-Gel method. The X-ray diffraction results show that when the value of x is between 0.1 and 0.3, the thin film has the structure of hexagonal wurtzite while the angle of diffraction peak becomes bigger with increasing x , and the MgO impurity phase segregates at $x = 0.4$. The ultraviolet photoluminescence spectra of the films show ultraviolet emission peak at room temperature, which has an increasing blue shift with the increasing content of Mg. The band gap of ZnO broadens with Mg-doping concentration increasing from 0.1 to 0.3. For the sample with $x = 0.1$ annealed at 500°C , the crystal quality of the films is improved with the increase of the rate of temperature rise from $4.5^\circ\text{C}/\text{min}$ to $6.0^\circ\text{C}/\text{min}$. For the sample with $x = 0.2$, the crystal quality of the films is improved with the increase in annealing temperature from 500°C to 560°C . With the annealing temperature increasing above 590°C the crystal quality of the films degenerates.

Keywords : ZnO films, structure, band gap, photoluminescence

PACC : 7855, 7850, 7850G

[†] E-mail : fzz886@163.com

[‡] Corresponding author. E-mail : physfangqq@126.com