

Ti 缓冲层及退火处理对 Si(111) 基片上生长的 ZnO 薄膜结构和发光特性的影响^{*}

魏 玮 刘 明 曲盛薇 张庆瑜[†]

(大连理工大学三束材料改性国家重点实验室 大连 116024)

(2008 年 11 月 13 日收到 2009 年 1 月 13 日收到修改稿)

采用反应磁控溅射法在 Si(111) 基片上制备了带有 Ti 缓冲层的高 *c* 轴取向 ZnO 薄膜. 通过 X 射线衍射分析和光致荧光光谱测量, 研究了 Ti 缓冲层厚度和退火处理对 ZnO 薄膜结晶质量和光致荧光特性的影响. 研究结果表明, Ti 缓冲层的引入可以有效改善 Si 基片上 ZnO 薄膜的发光性能, 但缓冲层存在一个最佳的厚度. 薄膜应力是影响 ZnO 薄膜紫外荧光发射性能的重要因素. 较小的残余应力对 ZnO 薄膜的紫外荧光发射是有利的, 残余应力的存在可以改变 ZnO 薄膜紫外荧光发射能量. 随着退火温度的增加, 薄膜中的张应力增大, 导致带隙宽度减小以及激子复合跃迁峰逐渐向低能方向移动.

关键词: ZnO 薄膜, 缓冲层, 退火处理, 应力分析

PACC: 7360F, 7280E, 7855E

1. 引 言

ZnO 是 II—VI 族宽禁带半导体材料, 具有纤锌矿晶体结构, 室温下禁带宽度为 3.37 eV, 激子束缚能为 60 meV, 可以实现室温下的紫外受激辐射. ZnO 具有优异的光学、电学及压电性能, 在发光二极管、光探测器、透明导电、平面显示等众多领域有着广泛的应用^[1,2]. 近年来, 市场对于紫外光短波长发光器件和激光器大量需求, 又重新掀起了 ZnO 研究的热潮.

目前人们采用不同的基片沉积 ZnO, 如蓝宝石^[3], Si^[4], GaAs^[5] 和 SiO₂^[6] 等. Si 因为具有成熟的集成工艺、低廉的价格等优势, 受到人们的普遍重视. 但是, Si 的氧化物形成焓为 -910.7 kJ/mol, 比 ZnO 的形成焓(-350.52 kJ/mol) 低得多. 因此, 制备 ZnO 的过程中, Si 基片容易被氧化, 使得 ZnO 薄膜与 Si 基片之间难以形成良好的外延关系. 此外, Si(111) 基片与 ZnO(001) 晶面之间的晶格失配约为 15%, 限制了 ZnO 薄膜在 Si(111) 基片上的外延生长. 为了解决这一问题, 人们广泛采用缓冲层技术, 例如利用低

温生长的 ZnO^[7,8], MgO^[9] 和 GaN^[10] 等作为缓冲层, 以达到改善薄膜沉积质量的目的. Ti 属于六角晶系, 与 ZnO 的晶格失配度为 10%, 小于 Si(111) 与 ZnO 之间的晶格失配, 具备作为 Si(111) 与 ZnO 薄膜之间缓冲层的条件. 最近, Li 等^[11] 报道了利用金属有机物化学气相沉积方法在 Si(111) 基片上生长 ZnO 薄膜的研究结果, 发现采用 Ti 作为缓冲层可以有效改善 ZnO 薄膜的结晶质量, 但文献 [11] 并未探讨 Ti 缓冲层厚度对于薄膜结晶质量的影响.

尽管 Ti 缓冲层对薄膜结晶质量有一定的改善作用, 但是还是难以满足光电器件的要求, 而退火可以有效地改善薄膜质量^[12]. 为了进一步提高 ZnO 薄膜的结晶质量和发光性能, 本文在 Ti 缓冲层技术的基础上, 进一步探讨了退火处理对 ZnO 薄膜的结晶质量、应力状态以及光致发光性能的影响. 我们采用反应射频磁控溅射的方法, 在 Si(111) 基片上制备了不同厚度的 Ti 缓冲层, 通过 X 射线衍射(XRD) 和光致荧光(PL) 测量, 研究了 Ti 缓冲层厚度对 ZnO 薄膜结晶质量和发光性能的影响. 在此基础上, 我们选择最佳的 Ti 缓冲层厚度, 研究了退火温度对 ZnO 薄膜的结晶质量、应力状态和 PL 特性的影响. 同时还探

^{*} 国家自然科学基金(批准号: 10605009, 10774018) 和国家重点基础研究发展计划(批准号: 2007CB616902) 资助的课题.

[†] 通讯联系人. E-mail: qy Zhang@dlut.edu.cn

讨论了 ZnO 薄膜的 PL 特性与薄膜的结晶质量和应力状态之间的联系.

2. 实验方法

Ti 缓冲层和 ZnO 薄膜的制备均是在超高真空磁控溅射设备上完成的. 实验所用的 Ti 靶直径为 60 mm, 厚度为 3 mm, 纯度优于 99.99%. Ti 缓冲层的沉积是在纯度为 99.99% 的 Ar 气氛下进行的, 表观质量流量为 $20 \text{ cm}^3/\text{min}$, 工作气压为 0.5 Pa, 溅射靶的射频输入功率为 80 W, 沉积时间 t 分别为 20, 40, 60, 240 和 360 s, 沉积温度为室温. ZnO 薄膜的制备采用反应磁控溅射方法, 溅射靶是金属 Zn 靶, 直径为 60 mm, 厚度为 3 mm, 纯度优于 99.99%; 溅射气体为 Ar 和 O_2 的混合气体, 纯度均为 99.99%. 沉积薄膜前, 真空室经涡轮分子泵抽至本底真空度 4.0×10^{-4} Pa. Ar 和 O_2 的表观质量流量均为 $20 \text{ cm}^3/\text{min}$, 工作气压为 0.5 Pa, 溅射靶的射频输入功率为 80 W, 基片温度为 $750 \text{ }^\circ\text{C}$, 沉积时间为 3 h. Si 基片与溅射靶之间的距离为 70 mm, 在溅射过程中, 样品台以 $4.8^\circ/\text{s}$ 的速度自转以保证沉积薄膜的均匀性.

实验所用的基片为 n 型 Si(111) 单晶片, 厚度为 $420 \mu\text{m}$, 电阻率为 $2\text{--}4 \Omega\text{cm}$. Si 基片处理的方法如下: 依次将 Si 片放入丙酮、乙醇和去离子水中分别用超声波清洗 5 min, 再在体积比为 3:1 的 $\text{H}_2\text{SO}_4 + \text{H}_3\text{PO}_4$ 的溶液中浸泡 20 h, 去除 Si 基片表面的油污及其他污染物; 用 5% 的 HF 酸刻蚀 2 min, 最后, 经去离子水冲洗, 用干燥 N_2 气吹干后, 快速放入真空室. 沉积的 ZnO 薄膜在 47900 型高温马弗炉内空气中进行退火, 退火温度从 400 到 $1000 \text{ }^\circ\text{C}$, 间隔为 $100 \text{ }^\circ\text{C}$, 退火时间为 1 h, 退火后的样品自然冷却至室温.

ZnO 薄膜的结构分析是在 Bruker-D8 型薄膜 XRD 仪上进行的, X 射线源为 $\text{Cu K}\alpha$ 辐射, 波长为 $\lambda = 0.15418 \text{ nm}$. 薄膜的室温和低温 PL 光谱测量采用 He-Cd 激光器作为激发源, 激光波长为 325 nm , 波长扫描范围为 $350\text{--}750 \text{ nm}$. 低温 PL 光谱的测量是在美国 ARS 公司生产的 CS202 型制冷机上进行的, 测量温度从 20 K 到室温. ZnO 薄膜的应力测量采用经典的 $\sin^2 \psi$ 方法^[13]. 对于由单轴 ZnO 晶粒构成的具有双轴旋转对称的织构薄膜, 其应力公式为^[14]

$$\epsilon_\psi = [(s_{11}^* + s_{12}^* + s_{13}^*) \sin^2 \psi + 2s_{13}^*] \sigma_0, \quad (1)$$

式中 s_{ij}^* 是弹性柔顺系数, ϵ_ψ 是样品倾角为 ψ 时的

晶格应变.

3. 结果与分析

3.1. Ti 缓冲层对 ZnO 薄膜质量和发光性能的影响

XRD 分析表明, 无论是直接生长的 ZnO 薄膜还是在 Ti 缓冲层上生长的 ZnO 薄膜, 均只有 ZnO 的 (002) 衍射峰, 具有高 c 轴取向, 说明 Ti 缓冲层的引入并没有明显改变 ZnO 薄膜的生长特征. 但是, 随着 Ti 缓冲层沉积时间的改变, ZnO 的 (002) 衍射峰的峰位和半峰宽 (FWHM) 都有一定的改变, 如图 1 所示, 但影响不大. 为了进一步了解 Ti 缓冲层对薄膜结晶质量的影响, 我们对 ZnO (002) 衍射峰进行了摇摆曲线 (rocking curve) 分析, 如图 1(b) 所示. 从图 1(b) 可以看出, 随着 Ti 缓冲层厚度增加, FWHM 逐渐变大; 在沉积时间 $t \leq 240 \text{ s}$ 时, 变化相对较小, 但当沉积时间为 360 s 时, FWHM 明显增大. 这一结果说明 Ti 缓冲层的引入并没有改善 ZnO 薄膜的结晶质量, 反而导致薄膜结晶质量下降, 与 Li 等^[11] 的结论不同. 这说明 Ti 缓冲层是否可以改善薄膜的结晶质量, 可能与具体的制备技术有关, 也可能与 Ti 缓冲层的生长条件有关.

PL 光谱测量显示, 沉积的 ZnO 薄膜均具有明显的紫外 PL 发射. 图 2 是 ZnO 薄膜的室温紫外 PL 发射随 Ti 缓冲层沉积时间的变化. 从图 2 可以看出, 随着 Ti 缓冲层沉积时间的增加, ZnO 薄膜的室温紫外 PL 发射强度逐渐增强, 在 $t = 240 \text{ s}$ 时达到最大. 与未沉积 Ti 缓冲层的 ZnO 薄膜相比, 强度提高了约一个数量级. ZnO 薄膜的室温紫外 PL 发射 FWHM 随 Ti 缓冲层沉积时间的变化趋势与 PL 强度相反. 没有沉积 Ti 缓冲层的紫外 PL 发射 FWHM 约为 28 nm (约 223 meV); Ti 缓冲层的引入, 显著地改善了 ZnO 薄膜的 PL 特性, 在 Ti 缓冲层沉积时间为 $t = 240 \text{ s}$ 时达到最小, 约为 10 nm (约 80 meV), 是未沉积 Ti 缓冲层时的 $1/3$, 甚至小于 Li 等^[11] 采用化学气相沉积方法所制备的 ZnO 薄膜的荧光 FWHM (106 meV).

尽管薄膜的荧光干涉效应会在一定程度上影响荧光强度和 FWHM, 但是在我们的实验中所有的 ZnO 薄膜都是同时沉积的, 不同 Ti 缓冲层上的 ZnO 薄膜之间的厚度差异非常小, 而且我们所观察到的紫外 PL 发射随 Ti 缓冲层沉积时间的变化幅度远大于荧光干涉效应的影响. 因此, 可以确认 ZnO 薄膜

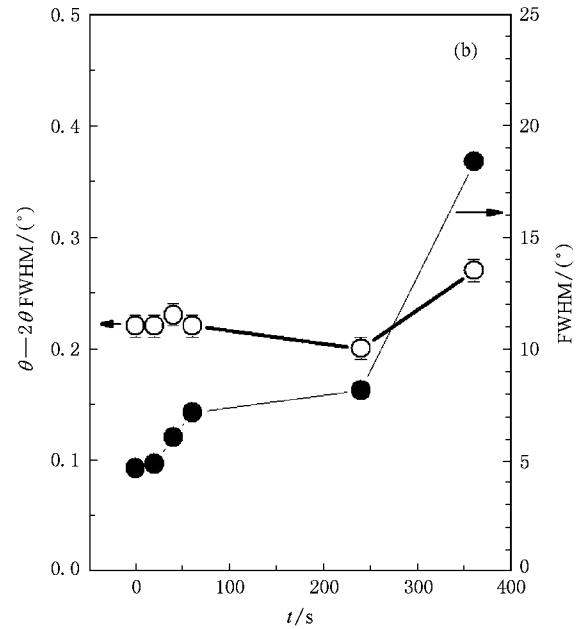
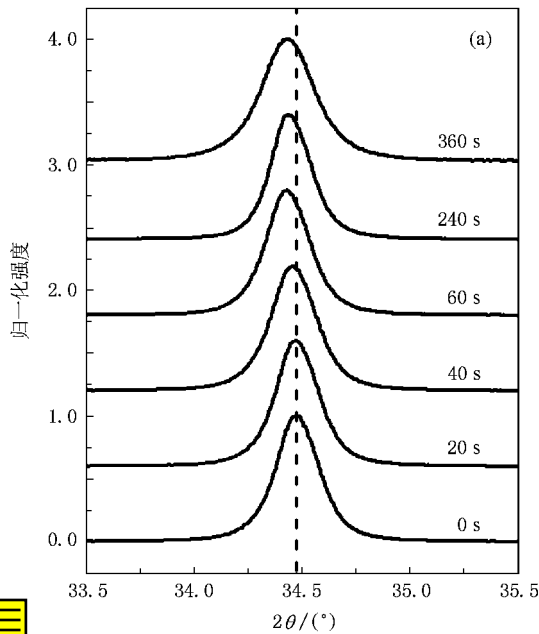


图1 ZnO薄膜(002)衍射峰随Ti缓冲层沉积时间的变化 (a)衍射峰及峰位 (b)衍射峰 FWHM

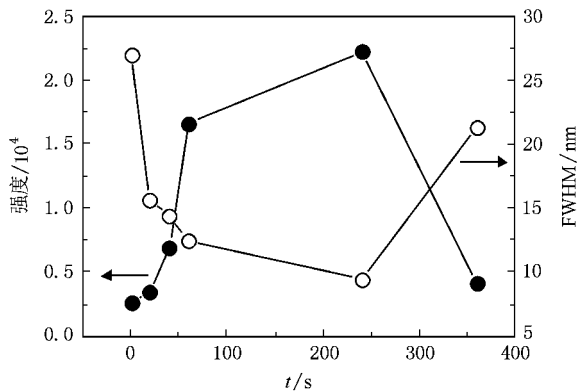


图2 ZnO薄膜的室温紫外 PL 发射峰强度和 FWHM 随 Ti 缓冲层沉积时间的变化

紫外 PL 发射的改善是 Ti 缓冲层对薄膜质量改善的结果.同时,我们的研究表明,ZnO 薄膜的荧光特性不仅仅取决于薄膜的结晶质量,可能还与其他因素(如薄膜应力)有关.在我们的实验条件下,当 Ti 缓冲层沉积时间为 240 s 时,ZnO 薄膜的发光性能最佳.X 射线反射分析表明,此时 Ti 缓冲层的厚度约为 21 nm.

3.2. 退火对 ZnO 薄膜结构和应力的影响

退火可以有效地改善 ZnO 薄膜的结晶质量和发光性能^[5].为此,对 Ti 缓冲层沉积时间为 240 s 的样品在 400—1000 °C 下进行了退火处理.XRD 分析

表明,退火几乎不改变 ZnO 薄膜的高 *c* 轴取向特征.当退火温度 $T < 800$ °C 时,XRD 谱中只有 ZnO (002)衍射峰;当退火温度 $T > 800$ °C 以后,除了 ZnO (002)的衍射峰以外,出现了微弱的 Zn_2SiO_4 的 (113) (223)和(042)衍射峰,说明在 ZnO 薄膜和 Si 基体之间发生了界面反应,但没有发现与 Ti 化合物相关的相,可能是 Ti 总体含量较少的缘故.图 3 显示了不同温度退火处理后归一化的 ZnO (002)衍射峰以及衍射峰峰位和 FWHM 随退火温度的变化.从图 3 可以看到,随着退火温度的升高,ZnO 薄膜的 (002)衍射峰逐渐向高角偏移,且 FWHM 有所减小,在 $T = 800$ °C 时达到最小,说明退火处理确实可以改善薄膜的结晶质量.但过高的退火温度反而导致薄膜结晶质量下降,这可能与膜基界面反应有关.

为了更准确地了解退火对薄膜应力的影响,采用 XRD 的 $\sin^2 \psi$ 方法对不同退火温度处理的薄膜进行了残余应力测量.图 4 给出了 900 °C 退火处理样品的测量结果以及应变 ϵ_ψ 随 $\sin^2 \psi$ 的变化.通过线性拟合得到斜率,根据(1)式可以计算出薄膜的应力 $\sigma = 2.37 \pm 0.18$ GPa.图 5 是利用 XRD 的 $\sin^2 \psi$ 方法测得的 ZnO 薄膜应力 σ 随退火温度的变化.从图 5 可以看出,未退火样品呈现压应力状态,退火处理使得薄膜应力从压应力转变为张应力.在 400 °C 退火处理的样品中薄膜应力最小,随着退火温度的增加,薄膜应力逐渐增加.薄膜应力随退火温度的变

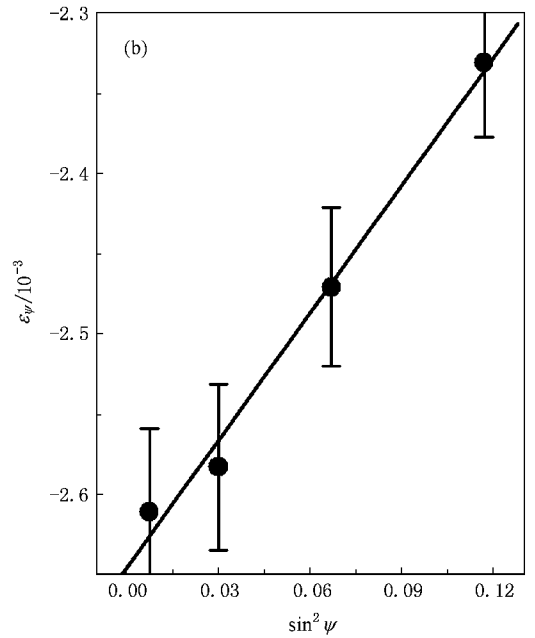
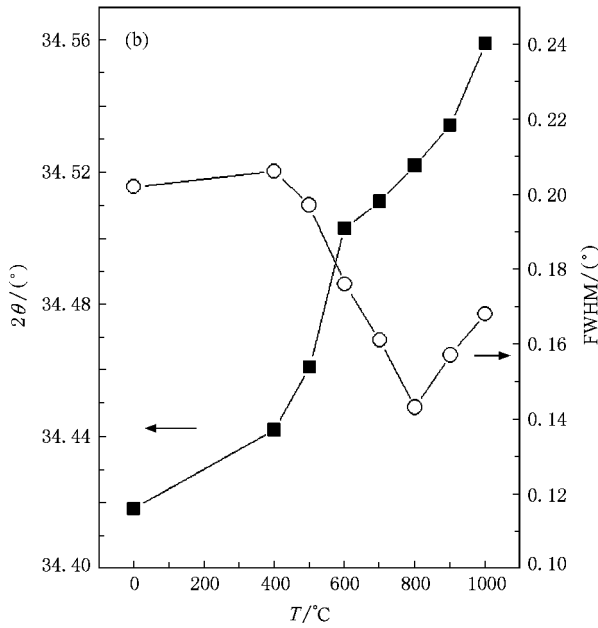
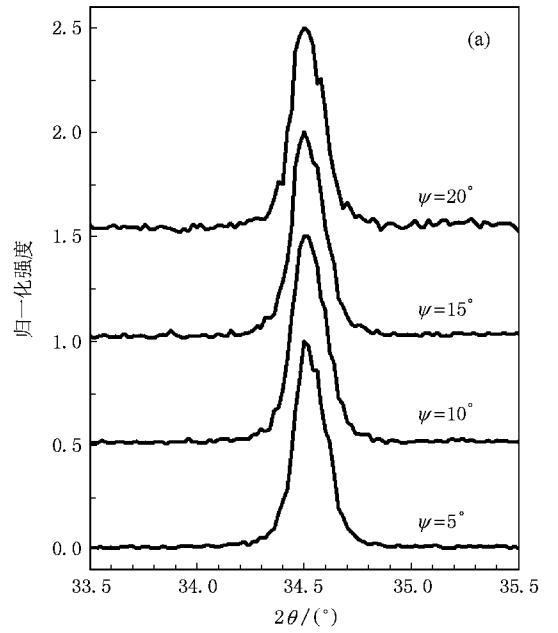
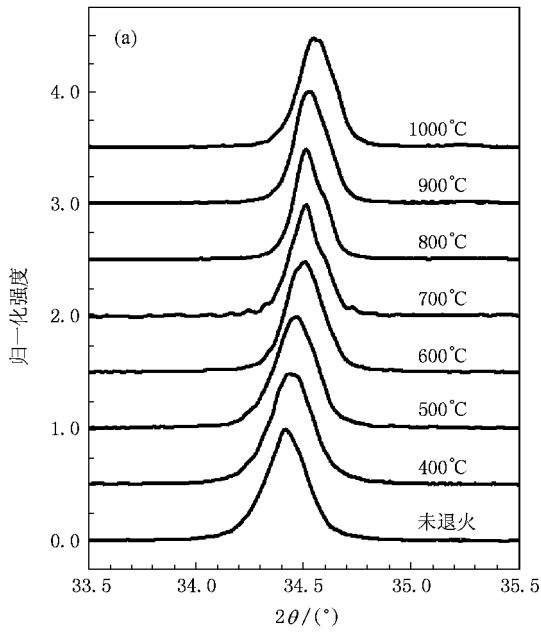


图 3 不同温度退火处理后 ZnO 薄膜的衍射结果 (a) 归一化的 (002) 衍射峰, (b) 衍射峰峰位和 FWHM 随退火温度的变化

图 4 900 °C 退火处理样品在不同 ψ 角下的衍射结果 (a) 归一化的 (002) 衍射峰, (b) 应变变量随 sin² ψ 的变化的拟合曲线

化存在两个不同的阶段,在室温至 700 °C 的范围内,薄膜应力随退火温度的增加基本上呈单调增长,但增长速率相对较小;当退火温度 $T > 800$ °C 以后,薄膜应力随退火温度的增加显著增长,说明膜基界面反应对薄膜应力的影响较大。

3.3. 退火对 ZnO 薄膜室温 PL 特性的影响

图 6 是经不同温度退火处理后 ZnO 薄膜的室温 PL 光谱以及紫外荧光发射强度和 FWHM 随退火温

度的变化.从图 6 可以看出,退火对 ZnO 薄膜的紫外 PL 发射和可见 PL 发射均有非常重要的影响.在 $T < 700$ °C 时,薄膜的紫外 PL 占主导地位,在可见光波段内的所谓缺陷荧光相对较弱.当 $T \geq 700$ °C 时,缺陷荧光强度随退火温度的升高迅速增加,远远超过紫外 PL 发射,这与我们在未沉积 Ti 缓冲层的 ZnO 薄膜退火行为研究^[16]中所观察到的现象相似.从图 6(b) 的紫外 PL 发射强度和 FWHM 随退火温度

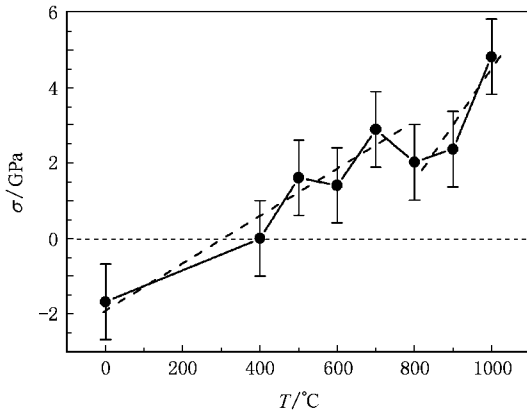


图5 ZnO 薄膜应力随退火温度的变化

的变化中可以看出,当退火温度为 400 和 500 °C 时,紫外 PL 发射具有比较大的强度和最小的 FWHM. 尽管退火温度在 1000 °C 时紫外 PL 强度有一个显著的增加,但是此时的薄膜由于无法承受较大的薄膜应力已经发生严重的局域剥落. 因此,结合荧光测量结果可以认为,当退火温度为 400 和 500 °C 时,薄膜的紫外 PL 发射特性较好. 这一结果说明,尽管更高温度的退火处理可以有效地改善薄膜的结晶质量,但由于薄膜应力的增加反而导致紫外 PL 发射性能下降,说明薄膜的残余应力对薄膜的紫外 PL 发射具有非常重要的影响.

3.4. 退火对低温 PL 特性和能带结构的影响

为了进一步研究退火对 ZnO 薄膜紫外 PL 发射的影响,对不同温度退火处理的 ZnO 薄膜进行了变温 PL 光谱测量,温度从 20 到 300 K. 图 7(a) 是 20 K 下不同温度退火样品的归一化紫外 PL 光谱,图 7(b) 是 500 °C 退火样品的变温紫外 PL 光谱. 从图 7 可以看到,不同温度退火处理的样品紫外 PL 光谱之间的差异较大. 当 $T \leq 600$ °C 时, ZnO 薄膜的紫外 PL 峰具有明显的激子发射特征,并随着退火温度的增加有一定的红移; 当 $T \geq 700$ °C 时,紫外 PL 峰发生了较明显的变形. 为了揭示导致激子跃迁发射变化的物理本质,我们对 ZnO 薄膜的变温 PL 光谱进行了仔细分析和标定.

如图 7(b) 所示, 20 K 时, ZnO 薄膜的紫外 PL 光谱中出现了两个明显的激子发射峰 1 和 2, 其能量分别为 3.371 和 3.356 eV. 随着测量温度的增加, 1 号峰的强度逐渐增加, 而 2 号峰的强度逐渐减弱, 说明 1 号峰应该是自由激子 (FX) 的跃迁, 2 号峰是束缚激子跃迁. 再根据二者之间的能量差, 可以确认 2

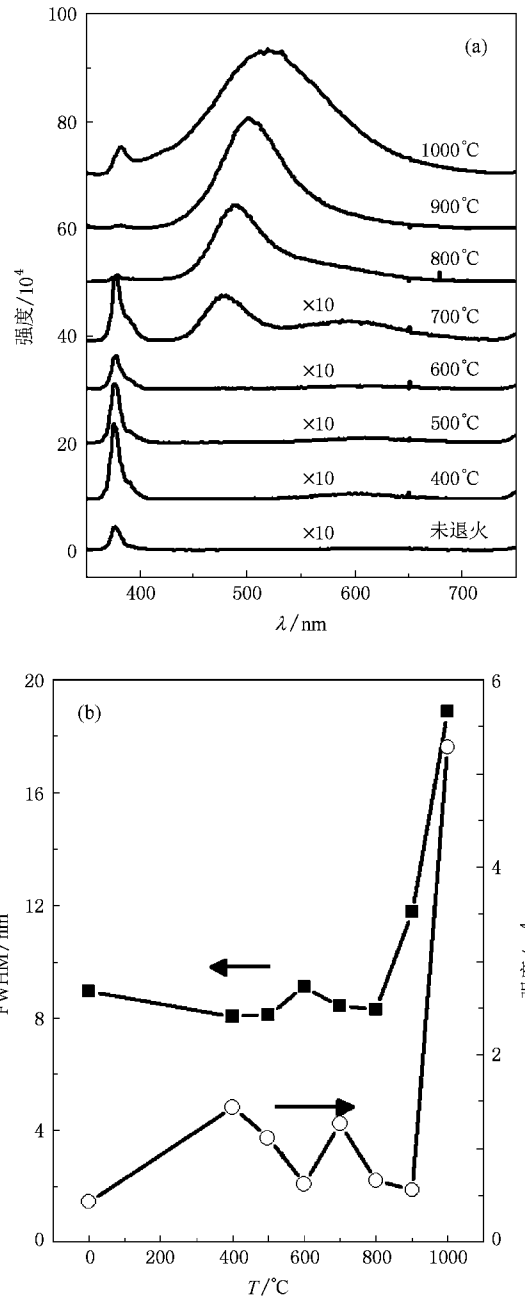


图6 经不同温度退火处理后 ZnO 薄膜的 PL 结果 (a) 室温 PL 光谱, (b) 紫外 PL 发射强度和 FWHM 随退火温度的变化

号峰应该是中性施主束缚激子 (D^0X) 跃迁. 与体 ZnO 的 FX 跃迁 (3.377 eV) 和 D^0X 跃迁 (3.3598, 3.3605 和 3.3618 eV)^[7] 相比, ZnO 薄膜中的 FX 和 D^0X 跃迁能量减小约 5—6 meV, 说明薄膜的带隙宽度发生了变化. 图 7(a) 中的虚线给出的是体 ZnO 的 D^0X 的跃迁能量. 从图 7(a) 可以看到, 随着退火温度的增加, D^0X 跃迁峰逐渐向低能方向移动, 说明带隙宽度逐渐减小. 考虑到退火后的 ZnO 薄膜处于张应变状态, 而且应变随退火的增加而增大, 因此我们认

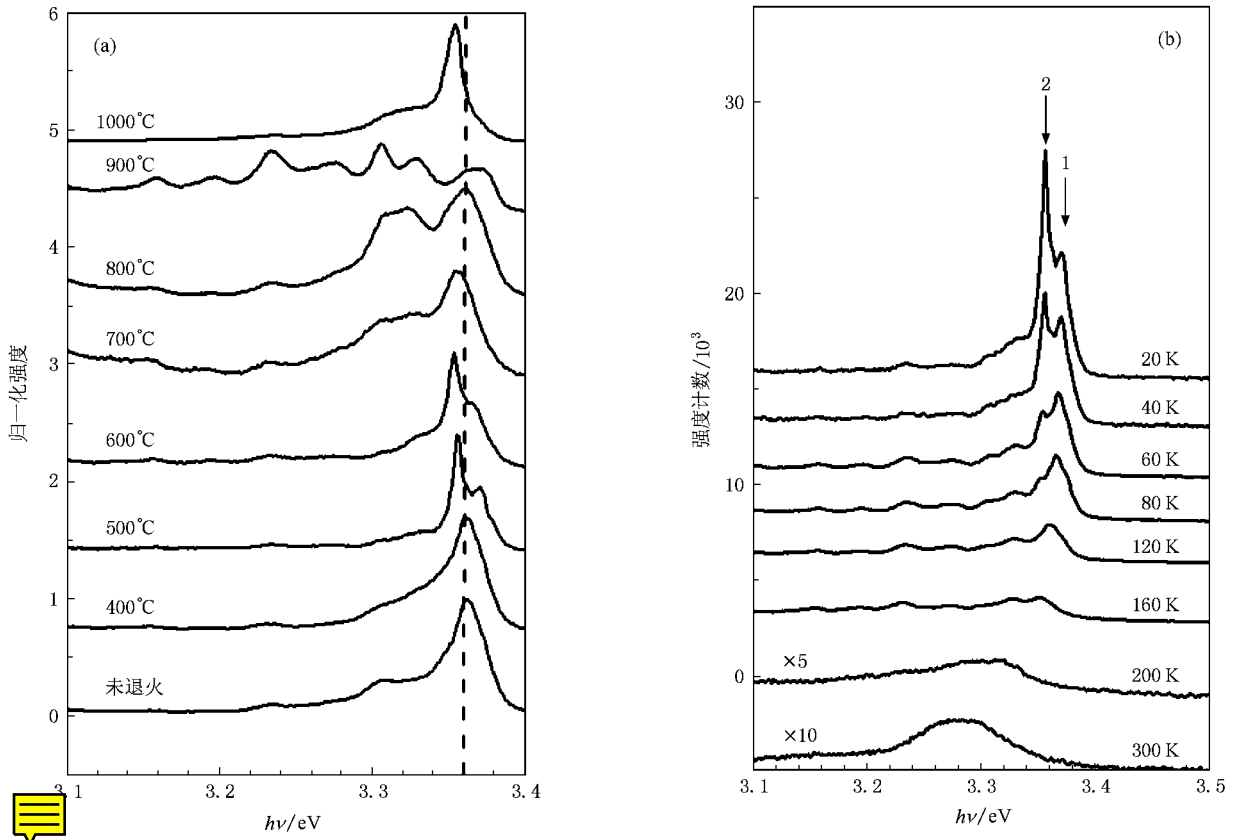


图 7 ZnO 样品的紫外 PL 光谱 (a) 20 K 下不同温度退火样品的归一化紫外 PL 光谱, (b) 500 °C 退火样品的变温紫外 PL 光谱

为是薄膜中的残余应力导致了 ZnO 薄膜带隙宽度的变化,这与唐鑫等^[18]的理论计算结果一致.同时,我们的实验结果也支持了文献[18]的结论.

退火所导致的 ZnO 紫外荧光发射峰形的变化可能与薄膜中的局域应力分布有关.考虑到 ZnO 薄膜是由多晶晶粒组成,在薄膜生长和退火处理过程中,薄膜的局域应力分布可能是不均匀的.因此,同一样品中的不同晶粒产生的应变不是完全一样的,使得晶粒的带隙宽度存在一定的分布.表现在紫外 PL 发射上,也就是荧光峰的展宽和多峰结构的出现.如果 ZnO 薄膜的紫外 PL 发射具有明锐的激子特征,说明此时的薄膜应力分布相对比较均匀,如 500 °C 退火的结果.如果薄膜的紫外 PL 发射峰比较混乱,说明薄膜的应力分布起伏较大,也可能存在其他的非 ZnO 激子跃迁.实验上 XRD 方法一般只能给出薄膜的宏观残余应力,但无法知道薄膜中的应力分

布.而 ZnO 的低温紫外 PL 光谱,可以对了解薄膜中的应力分布提供一定的帮助.研究表明:当退火温度较低时,薄膜中的残余应力较小,应力分布相对均匀;当退火温度较高时,薄膜中的残余应力较大,应力分布也不均匀,从而导致紫外 PL 发射峰比较混乱.

4. 结 论

Ti 缓冲层对 Si 基片上 ZnO 薄膜的结晶质量和紫外 PL 发射性能有显著影响,当 Ti 缓冲层为 21 nm 时,薄膜具有最好的紫外 PL 特性.退火处理可以进一步改善 Si(111)/Ti/ZnO 薄膜的紫外 PL 发射性能.薄膜应力是影响 ZnO 薄膜紫外 PL 发射性能的重要因素,较小的残余应力对 ZnO 薄膜的紫外 PL 发射是有利的.此外,残余应力的存在对带隙宽度有一定的影响,进而改变 ZnO 薄膜的紫外 PL 发射能量.

- [1] Stolt L , Hedström J , Kessler J , Ruckh M , Velthaus K O , Schock H W 1993 *Appl. Phys. Lett.* **62** 597
- [2] Bagnall D M , Chen Y F , Zhu Z , Yao T , Koyama S , Shen M Y , Goto T 1997 *Appl. Phys. Lett.* **70** 2230
- [3] Liu M , Liu Z W , Gu J F , Qin F W , Ma C Y , Zhang Q Y 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 1133 (in Chinese) [刘 明、刘志文、谷建峰、秦福文、马春雨、张庆瑜 2008 物理学报 **57** 1133]
- [4] Sun C W , Liu Z W , Qin F W , Zhang Q Y , Liu K , Wu S F 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 1390 (in Chinese) [孙成伟、刘志文、秦福文、张庆瑜、刘 琨、吴世法 2006 物理学报 **55** 1390]
- [5] Moon T H , Jeong M C , Lee W , Myoung J M 2005 *Appl. Surf. Sci.* **240** 280
- [6] Kim H W , Kim N H 2004 *Mater. Sci. Semicon. Proc.* **7** 1
- [7] Man B Y , Yang C , Zhuang H Z , Liu M , Wei X Q , Zhu H C , Xue C S 2007 *J. Appl. Phys.* **101** 093519
- [8] Ye Z Z , Lu J G , Zhang Y Z , Zeng Y J , Chen L L , Zhuge F , Yuan G D , He H P , Zhu L P , Huang J Y , Zhao B H 2007 *Appl. Phys. Lett.* **91** 113503
- [9] Chen Y F , Ko H J , Hong S K , Yao T 2000 *Appl. Phys. Lett.* **76** 559
- [10] Yoshida S , Li J , Takehara H , Takahiro W 2003 *J. Cryst. Growth* **253** 85
- [11] Li F , Li D M , Dai J N , Su H B , Wang L , Pu Y , Fang W Q , Jiang F Y 2006 *Superlatt. Microstruct.* **40** 56
- [12] Huang J Y , Lu H M , Ye Z Z , Wang L , Zhao B H , He H P 2007 *J. Appl. Phys.* **102** 053521
- [13] Welzel U , Ligtot J , Lamparter P , Vermeulen A C , Mittemeijer 2005 *J. Appl. Cryst.* **38** 1
- [14] Hanabusa T , Tominaga K , Fujiwara H 1992 *Residual Stresses : III Science and Technology Vol. 1* (London : Elsevier Applied Science) p728
- [15] Sun C W , Liu Z W , Zhang Q Y 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 430 (in Chinese) [孙成伟、刘志文、张庆瑜 2006 物理学报 **55** 430]
- [16] Liu Z W , Fu W J , Gu J F , Ma C Y , Zhang Q Y 2007 *J. Chin. Electron. Microsc. Soc.* **26** 541 (in Chinese) [刘志文、付伟佳、刘 明、谷建峰、马春雨、张庆瑜 2007 电子显微学报 **26** 541]
- [17] Özgür Ü , Alivov Y I , Liu C , Teke A , Reshchikov M A , Doğan S , Avrutin V , Cho S J , Morkoc H 2005 *J. Appl. Phys.* **98** 041301
- [18] Tang X , Liu H F , Ma C Y , Zhao J J , Zhang Q Y 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 1066 (in Chinese) [唐 鑫、吕海峰、马春雨、赵纪军、张庆瑜 2008 物理学报 **57** 1066]

Photoluminescence of as-grown and annealed ZnO films on Ti-buffered Si(111) substrates^{*}

Wei Wei Liu Ming Qu Sheng-Wei Zhang Qing-Yu[†]

(*State Key Laboratory of Materials Modification by Laser, Ion and Electron Beams, Dalian University of Technology, Dalian 116024, China*)

(Received 13 November 2008; revised manuscript received 13 January 2009)

Abstract

ZnO thin films with strong *c*-axis preferred orientation have been deposited on Ti buffered Si(111) substrate by reactive radio-frequency magnetron sputtering. With X-ray diffraction analysis and photoluminescence (PL) measurement, the structure, residual stress and PL emission properties of Ti-buffered ZnO films are studied and effects of Ti-layer thickness and annealing temperature are discussed. It is found that the PL properties of the films are improved after the introduction of Ti buffer layer and an optimized thickness of Ti buffer layer is given. Annealing treatment can improve the properties of Si(111)/Ti-buffer/ZnO films further. The residual stress is found to be an important factor influencing the emission properties of ultraviolet light. It is helpful for the emission of ultraviolet light if the films have a small residual stress. The residual stress can also change the transition energy of excitons. With the increase of annealing temperature, the increase of tension strain in films reduces the band gap of ZnO, hence results in the shift of the excitonic peak to lower energy.

Keywords : ZnO films, buffer layer, annealing, residual stress

PACC : 7360F, 7280E, 7855E

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 10605009, 10774018) and the State Key Development Program for Basic Research of China (Grant No. 2007CB616902).

[†] Corresponding author. E-mail : qzhang@dlut.edu.cn