

行政院原子能委員會  
委託研究計畫研究報告

含微氮 1eV 用於多接面太陽電池之子電池開發

Development of 1eV dilute nitride subcells for multijunction solar cells

計畫編號：1022001INER019

受委託機關(構)：國立台灣大學電子工程所

計畫主持人：林浩雄教授

聯絡電話：02-33663670

E-mail address：hhlin@ntu.edu.tw

核研所聯絡人員：楊智超

報告日期：102 年 11 月 27 日

## 目 錄

目 錄 .....	1
中文摘要 .....	2
英文摘要 .....	3
壹、計畫緣起與目的 .....	4
貳、研究方法與過程 .....	5
一、氣態源分子束磊晶成長 .....	5
二、氮原子鄰近原子結構分析 .....	5
三、元件製作與特性量測 .....	6
參、主要發現與結論 .....	6
一、成長電漿源分析 .....	6
二、氮原子鄰近原子結構之分析 .....	7
三、元件熱退火電性分析 .....	10
肆、參考文獻 .....	13

## 中文摘要:

本計畫以具有氮電漿源的氣態源分子束磊晶法成長含微氮的 GaAsSbN 材料，並於 GaAs 基板上製作 GaAsSbN/GaAs 單接面太陽能電池。在材料成長方面，我們利用光譜儀量測並藉以調控電漿成分研究氮嵌入行為、同時也利用 X 光吸收邊緣譜來了解 GaAsSbN 氮原子的短距鄰近原子結構、並分析 p-i-n 元件結構開路電壓、短路電流密度與退火條件的關係。

**關鍵詞：**分子束磊晶法、GaAsSbN、太陽能電池

**英文摘要:**

We report on the growth and characterization of GaAsSbN dilute nitrides and p-i-n devices. We have used the emission spectrum to probe the composition of N radicals in N plasma for the growth. X-ray absorption near edge spectroscopy has been used to investigate the short range atomic configuration of N atoms in the dilute nitride. Effect of thermal annealing on the open-circuited voltage and short-circuited current of the p-i-n devices is also presented.

**Key words:** MBE 、 GaAsSbN 、 solar cell

## 壹、計畫緣起與目的:

聚光型多接面太陽能電池是當今最高效率的太陽能電池[1]；然而在 GaAs 與 Ge 之間一直缺乏一個能夠達到晶格匹配且能隙為 1-eV 的理想子電池材料。目前有兩種做法：一是使用與 Ge 或 GaAs 晶格匹配的含微氮(dilute nitride)材料來製作子電池[2]，另一種做法是使用變晶(metamorphic)技術來突破晶格匹配(lattice match)的限制，使用與基板晶格不匹配的 InGaAs 材料來作子電池[3]。含微氮材料能作為高效率多接面太陽能電池子電池的原理如下：當傳統的半導體材料被摻入少量的氮而構成含微氮材料時，由於氮原子具有較大的負電度(electronegativity)，價電子會氮原子抓取而形成局部能階(local state)；此能階的能量位置與氮的鄰接環境；即以氮原子為中心的短距原子結構有關。此一局部能階會與原來母體半導體的導電能帶(conduction band)發生能階互斥作用，使原來的導電能帶分裂成兩個新能帶，其中之一能帶的最低點的能量會比原來的能帶最低點更低；因而會使能隙縮小[4]。同時將氮原子摻入半導體材料也可使材料的晶格常數變小。若母體半導體的晶格常數大於基板晶格常數，適當地摻入氮原子除了如前所述可以使能隙降低之外，也同時可以使晶格常數縮小而達到與 GaAs 或 Ge 晶格匹配的條件。然而氮原子的加入需要較低的成長溫度以避免出現相分離的現象，同時較低的溫度容易出現缺陷使材料的光學特性劣化。因此需要退火的處理。退火處理雖可改善材料光學特性，但會改變氮原子附近的鄰近原子結構，造成能隙的上升，對元件的使用造成困擾。對於這些成長與退火特殊物理現象，目前的了解尚未完全。對於其成因的了解，有助於改善製程調控的方法，並因以獲致更符合需求的材料品質。

## 貳、研究方法與過程:

### 一、氣態源分子束磊晶:

我們使用 VG-V80H 氣態源分子束磊晶機台進行 GaAsSbN 含微氮塊材樣品的成長。用於測試材料特性的含微氮 dilute nitride 材料成長於半絕緣(100)無偏角度 GaAs 基板上；而太陽電池元件成長於 P 型(100)無偏角度 GaAs 基板上。Ga 分子束源是由努森加熱管提供；銻源是將固態銻金屬於 1050°C 加熱裂解得到；As<sub>2</sub> 分子束由固定流量為 2.79 SCCM 的 AsH<sub>3</sub> 氣體並於 1000°C 加熱裂解提供；氮源是使用 13.56 MHz 的射頻電漿產生器裂解高純氮氣所產生，藉由控制通入氮氣流量、RF power、以及擋板的開關可產生不同種類之活性的氮根。在我們的成長中，能夠參與成長作用的主要氮根為激發態的分子氮與基態的原子氮。我們利用光譜儀以及質譜儀分析氮電漿源主要組成與控制流量、電漿瓦數的關係。

### 二、氮原子鄰近原子結構分析

其次我們利用 X 光吸收邊緣譜(XANES)研究 GaAsSbN 中氮原子的鄰近原子結構，以了解退火所造成的變化與能隙的關係。我們利用同步輻射中心 (NSRRC) 光束線 20A，量測 GaAsSbN 中氮的 K-edge XANES。光束線的 X 光把氮原子 1s 軌道的電子激發到連續的能階，在此能階中被激發電子的物質波會與鄰接的原子產生交互作用，造成吸收邊緣譜的變化。我們建立具有不同短距原子結構的晶體模型，再使用 Valence forced field (VFF) model 計算原子位置的伸展與偏折。然後再使用 FEFF9 軟體模擬晶體模型的 XANES 譜型，並與實驗的結果相比對其特徵峰值的能量位置與相對高度。藉此來研究氮原子環境的短距原子結構，從而了解成長與退火對能隙的影響。

響機制。

### 三、元件製作與特性量測

最後我們以電壓電流特性和太陽光模擬器測量轉換效率量測以標準製程製作的 GaAs/GaAsSbN/GaAs p-i-n 元件以探討其特性。元件特性量測的項目包含 (一)電壓電流量測；使用 HP4156 探針測試平台進行電壓電流測試、(二)轉換效率；使用 AM1.5G，1 SUN 之太陽光模擬器照射太陽電池，取其電壓電流關係，得開路電壓短路電流和轉換效率等特性。

## 參、主要發現與結論

### 一、電漿源之分析

透過電漿源之放光頻譜和質譜分析，可推知在特定操作條件（氮氣流量和電漿源功率）所產生之氮源種類[5-7]。圖一為本實驗室所測得的電漿譜[8]。如圖所示，位於波長位置 746(A1)、822(A2)和 869(A3) nm 譜形尖銳之放光光譜為氮原子放光之特徵光譜[9]。另外許多強度較弱而寬胖的譜線為氮分子之放光光譜，其對應到 1<sup>st</sup> positive series， $A^3\Sigma_u^+$  和  $B^3\Pi_g$  兩個能態之間之躍遷，數個波包為不同振動量子數差所致[10]。取標號 A1(746nm)之放光強度和 M2(575~ 615nm)之積分強度分別代表受激之氮分子與氮原子的濃度，我們可以用來比對個成長條件下的激態氮分子與氮原子的變化，如圖二所示。實際成長時，我們使用擋板(shutter)來控制這兩種氮源。若使用擋板放在電漿源的開口處造成氮源的反射，能夠到達基板氮源將因多次反射從激態鬆弛回基態。因為基態氮分子並不能參與成長反應，所以在這種使用

擋板條件下的反應物只剩下基態原子氮。反之若要使用激態氮分子源，我們必須打開擋板，並使用較富含氮分子的條件。圖中我們標示出激態分子氮源與基態原子氮源的條件與界限。使用原子氮成長，可以較容易的控制磊晶層的氮成分。在我們過去的研究中發現，磊晶層的氮成分與銻分子束通量、基板成長溫度的關係都不大。這都是以氮原子進行成長的特徵。圖三為  $\text{AsH}_3$  流量與 N 和 Sb 成分的關係；其成長條件為  $\text{N}_2$  流量為 0.58SCCM 瓦數固定為 200W。發現增加  $\text{AsH}_3$  流量會同時降低 N 和 Sb 成分並呈線性遞減關係，其原因為大多數的  $\text{As}_2$  撞擊其成長表面並且 desorbed，導致 N 和 Sb 將被表面釋出。發現一個有趣的現象，在  $\text{AsH}_3$  流量為 0.29 ~ 1.27 SCCM 中計算 Sb 和 N 成分比皆維持在 6 倍左右，依據 Vegard's law 這將使晶格常數不變，有利於晶格匹配度的調控。

## 二、氮原子鄰近原子結構的分析

氮原子鄰近原子結構對於氮原子的局部能階有重要的影響，這個局部能階的位置是控制含微氮材料能隙的關鍵。在我們過去的研究中推測含微氮材料在成長時形成了氮原子對 NN1 的結構；也就是兩個氮原子佔在次鄰近原子的位置，中間隔了一個最鄰近的三族原子 Ga。這種 NN1 氮原子對有較低的局部能階，導致材料有較小的能隙。然而，在退火的過程中，我們推測氮原子對受熱分解，形成了單獨的氮原子。單獨氮原子的局部能階能量較高，因而使能隙變大。過去的研究只能由光吸收譜、光激螢光譜的結果作間接的推測。在此我們使用同步輻射中心的 20A 光束線進行氮原子 K-edge 的 XANES 譜量測。光束線的 X 光把氮原子 1s 軌道的電子激發到連續的能階，在此能階中被激發電子的物質波會與鄰接的原子產生交互作用，造

成吸收邊緣譜的變化。為了解析這個吸收譜，我們建立了幾種具有不同中心氮原子局部結構的晶體模型。主要結構為氮原子對 NN1 結構以及單獨 N 原子兩種模型，如圖四所示。NN1 結構中，兩個氮原子與同一個鎵原子鍵結，因而互相成為次鄰接原子。而在單獨 N 原子結構中，兩個氮原子間隔很遠。過去的研究認為成長完的含微氮材料內部含有 NN1 原子對[11]。熱退火會使之分解成單獨的 N 原子，如圖五所示。由於 NN1 原子對具有較低的電子局部能階。此分解現象會造成材料能隙的藍移[12]。

為了進一步研究，我們使用 Martin 簡化 VFF 模型方程式來計算 Zincblend 晶格結構，圖五為 Zinblende 晶格結構示意圖，其中每個鍵兩端分別為一個三族及一個五族原子，圖中分別建構了以三族原子為中心和五族原子為中心的單位晶胞，而每個鍵會與六個鍵相鄰，其中三個為共同分享三族原子的鍵結，另外三個為共享五族原子。除此之外，我們以 GaAsSbN 建立 1000 顆原子，以吸收氮原子為中心的 zincblende 結構模型，利用 VFF 法計算結構最低的扭曲能量  $U$ [13]，其 VFF 模型機變能方程式計算如公式 3-1，其中  $s=1、2$  分別表示三族和五族為中心的正四面體單位晶胞。 $\vec{r}_m(l,s)$  表示編號為  $l$  的單位晶胞內，由中央原子往周圍編號  $m$  原子的向量。 $d_m$  是其未扭曲的等效鍵長，而  $\alpha_m$  和  $\beta_{mn}$  分別是鍵結的伸縮(stretching)和彎曲(bending)力常數，並由計算可得到每顆原子的位置及鍵長，詳如表一所列。

$$U = \sum_{l=1}^{256} \sum_{m=1}^4 \frac{3}{8d_m^2} \alpha_m \left[ \vec{r}_m(l,s=1) \cdot \vec{r}_m(l,s=1) - d_m^2 \right]^2 + \sum_{s=1}^2 \sum_{l=1}^{256} \sum_{m=1}^3 \sum_{n=m+1}^4 \frac{3}{8d_m d_n} \beta_{mn} \left[ \vec{r}_m(l,s) \cdot \vec{r}_n(l,s) + \frac{d_m d_n}{3} \right]^2 \quad 3-1$$

接著選取 381 顆原子進行 FEFF9 模擬 X 光吸收邊緣圖譜，如圖六所示。圖中顯示了不同中心氮結構模擬出來的圖形，這些結構包括中心為單獨 N 原子，而 Sb 原子隨機散布在超晶格中、以及中心為 N 原子對而 Sb 原子聚集在次鄰近的位置、或隨機散布、或部分聚集部分隨機散布等不同狀況。圖六顯示最接近 as grown 量測譜形是中心為 NN1 原子對且在次鄰近圈中有八顆 Sb 原子的結構。由這個比對結果，我們可以推測銻原子傾向聚集在氮原子的周圍，此聚集現象能降低 N-Ga 鍵長，並伸長 Ga-Sb 在材料中的鍵長，使其更趨近於 binary 中的鍵長[14]，詳如表二，P1 為圖六吸收邊緣譜形左數第一個 peak，而 peak 位置與第一鄰近原子相關，為三族鎵(Ga)原子，而 P2 為次鄰近原子為五族原子(As、Sb)原子相關。其餘退火後含微氮材料 XANES 譜則仍在分析比對之中。

此外，為了瞭解其 GaAsSbN 材料經過熱退火前與熱退火後之晶格常數與以及內部晶格結構是否含有應變(strain)，我們也量測了高解析 XRD 的倒置晶格圖譜(Reciprocal Space Mapping, RSM)。圖八(a)、(b)為我們量測 as grown GaAsSbN 的(004)與(115) RSM，垂直軸為[001]方向；而水平軸為[110]方向。左邊(115) RSM 中的黑色虛斜線為代表正立方體晶格的線。圖中磊晶層水平晶格常數( $a_{xy}$ )為  $5.63095\text{\AA}$ 、垂直晶格常數為  $5.64653\text{\AA}$ ，而磊晶層與基板之水平晶格差( $\Delta a_{xy}$ )為  $1.54 \times 10^{-3}\text{\AA}$ 、垂直晶格差( $\Delta a_z$ )  $1 \times 10^{-4}\text{\AA}$ 。熱退火  $800^\circ\text{C}$ 後樣品的 RSM 圖示於圖九。由圖九的(115)RSM，磊晶層的水平晶格常數( $a_{xy}$ )為  $5.62471\text{\AA}$ 、垂直晶格常數為  $5.65291\text{\AA}$ ，而磊晶層與基板之水平晶格差( $\Delta a_{xy}$ )為  $1.71 \times 10^{-3}\text{\AA}$ 、垂直晶格差( $\Delta a_z$ )  $6.38 \times 10^{-4}\text{\AA}$ 。熱退火  $850^\circ\text{C}$ 後樣品的 RSM 圖示於圖十。磊晶層水平晶格常數( $a_{xy}$ )為  $5.62896\text{\AA}$ 、垂直晶格常數為  $5.64909\text{\AA}$ ，而磊晶層與基板之水平晶格

差( $\Delta a_{xy}$ )為 $1.57 \times 10^{-3} \text{Å}$ 、垂直晶格差( $\Delta a_z$ )  $3.67 \times 10^{-4} \text{Å}$ 。其中我們可以發現熱退火在水平晶格差異影響，由退火溫度  $800^\circ\text{C}$  升到  $850^\circ\text{C}$  後，差值變小約回到 as ground 的水平晶格差值，詳如表三所列。由於含微氮 GaAsSbN 材料中，N 與 Sb 的含量並不高，我們推測這個材料的熱膨脹係數與 GaAs 基板的熱膨脹係數的差異不大。因而在室溫所量得的晶格常數比例應該與成長或退火溫度下的比例差異不大。由 As grown 樣品的結果，可以猜測磊晶層已經有部分的鬆弛，但是內部還是含有壓縮性的應變。未能完全鬆弛可能與內部的氮、銻原子的局部應變有關。由於 As-grown 樣品的成長是磊晶逐層成長，我們猜測 NN1 原子對可能是沿著[001]軸形成。也就是原先已經嵌入 N 的位置，容易再嵌入第二個 N 原子。這樣的排列方向性，可以降低  $a_z/a_{xy}$  的比值。之後在退火的過程中，NN1 原子對因熱分解擴散開，不再具有排列的方向性，因而使  $a_z/a_{xy}$  的比值提高。另外也有文獻提及，退火會造成 Sb 原子往表面擴散[15]，這樣會使基板附近的磊晶層晶格縮小。因為這個區域磊晶層的水平面晶格在降溫過程中會被基板鎖定，所以我們猜測退火後的降溫過程中，整個磊晶層的晶格逐漸對應底部的晶格，形成同調(coherent)。因為水平晶格的縮小，垂直晶格也相對應的提高，所以整體的  $a_z/a_{xy}$  的比值也提高。水平、垂直晶格常數與基板晶格常數差異，詳如表四所列。

### 三、元件熱退火電性分析

在(001)P 型砷化鎵基板上成長異質接面太陽能電池結構，並且在  $\text{P}^+$ -GaAs 緩衝層上成長 p-GaAsSbN 之吸收層。之後再成長不同厚度的 i-GaAsSbN 層，厚度分別為 2000nm、1000nm、500nm、250nm。樣品完成磊晶成長之後直接在分子束磊晶機中，利用砷壓保護進行  $600^\circ\text{C}$  不同熱退火時間處理。

在先前的研究可以得知低溫且長時間下的熱退火為最佳熱退火條件，因此我們選擇四種砷壓保護下之不同熱退火時間，為未退火、退火 30 分鐘、60 分鐘與 300 分鐘的四種不同厚度樣品，其共 16 片樣品做成元件量測其電壓電流特性進行比較，元件結構如圖十一所示。由於 i-GaAsSbN 層為低溫成長，因此材料內會有缺陷破壞光電特性，其在未退火的情況下如圖十二，可以發現 I-V 特性隨著 i-GaAsSbN 厚度增加而大幅度下降。對樣品進行 30 分鐘的熱退火後 I-V 特性的衰減較沒有熱退火的樣品減緩許多，如圖十三所示。圖十三、十四、十五為不同厚度對熱退火時間的 I-V 特性，根據 CV 量測我們得知各厚度在不同熱退火時間下的空乏區皆為 250 nm，因此在 i-GaAsSbN 厚度為 250 nm 時，整個吸收層已全變為空乏區，在空乏區中有內建電場幫助傳導使 I-V 特性受材料缺陷影響較小，因此對於熱退火改善缺現對期 I-V 特性影響較小。在吸收層厚度為 500 nm 下，隨著熱退火時間增長，其短路電流有顯著的改善。而在吸收層厚度為 1000 nm 與 2000 nm 的樣品，其 I-V 特性雖有改善但其效率仍不及其他兩組厚度，顯示吸收層厚度有一定的限制，根據其他四元銻氮結構記載在中性區其載子的擴散長度約為 250 nm，因此當吸收層厚度大於空乏區加上中性區載子擴散長度，在我們的結構上約為 500 nm 左右，其效率反而會降低。

## 結論:

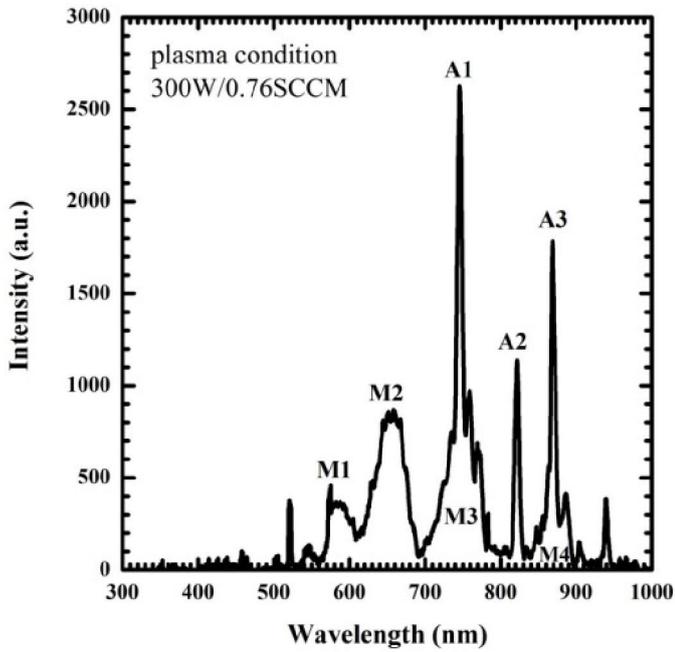
我們使用射頻電漿源分子束磊晶法在砷化鎵基板上成長 GaAsSbN 材料，且透過電漿光譜分析特定條件下的電漿源之氮源主要成分。另一方面，將樣品做同步輻射量測以及 FEFF9 模擬擬合，發現中心氮原子在 381 顆原子時，以 NN1pair 加上次鄰近 8 顆銻原子模型，最符合 20A 光束線量測出的譜形，分析認為銻原子傾向聚集(Cluster)在中心氮原子外次鄰近的位子，我們使用 RSM 探討熱退火過後材料內部晶格常數與基板差異，發現水平晶格常數會因退火而縮小，並使得磊晶層的  $a_z/a_{xy}$  的比值變大；亦即內部的壓縮性應變變大。我們推測原始成長的材料內部 NN1 原子對可能具有垂直的排列方向性，退火後分解散開造成垂直晶格變大。另外銻原子朝向表面擴散可能也是造成水平晶格常數縮小的原因。在 GaAsSbN/GaAs p-i-n 元件方面，我們發現在 600°C 熱退火處理後，p-i-n 元件的短路電流密度與開路電壓均可獲得改善。

## 參考文獻:

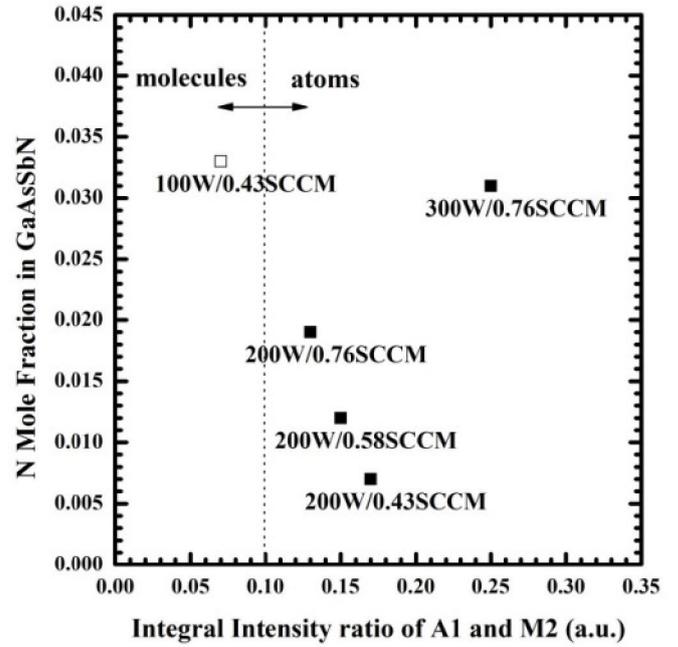
- [1] J. Allen, V.Sabnis, M.Wiemer, H. Yuen, “44%-Efficiency Triple-Junction Solar Cells”9th International Conference on Concentrator Photovoltaic Systems, Miyazaki, Japan, 2013.
- [2] H. Yuen, “Advanced Cell Technologies for Concentrated Photovoltaics, ” International Solar Energy Technology Conference, Santa Clara ,2011.
- [3] W. Guter, J. Schone, S. P. Philipps, M. Steiner, G. Siefer, A. Wekkeli, E. Welsler, E. Oliva, A. W. Bett, and F. Dimroth,”Current-matched triple-junction solar cell reaching 41.1% conversion efficiency under concentrated sunlight”Appl. Phys. Lett. 94(2009) 223504.
- [4] W. Shan, W. Walukiewicz, J. W. Ager, III, E. E. Haller, J. F. Geisz, J. Friedman, J. M. Olson, and S. R. Kurtz, “Bandanticrossing in GaInNAs alloys ”, Phys. Rev. Lett. 82, (1999) 1221.
- [5] A. J. Ptak, M. R. Millecchia, T. H. Myers, K. S. Ziemer, and C. D. Stinespring, “The relation of active nitrogen species to high-temperature limitations for (0001) GaN growth by radio-frequency-plasma-assisted molecular beam epitaxy”, Appl. Phys. Lett. 74, 3836 (1999).
- [6] M. M. Oye, T. J. Mattord, G. A. Hallock, S. R. Bank, M. A. Wistey, J. M. Reifsnider, A. J. Ptak, H. B. Yuen, J. S. Harris, Jr., and A. L. Holmes, Jr.,”Effects of different plasma species (atomic N, metastable N 2 \* , and ions) on theoptical properties of dilute nitride materials grown by plasma-assisted molecular-beamepitaxy ”, Appl. Phys. Lett. 91, 191903 (2007).

- [7] J. M. Reifsnider, S. Govindaraju, A. L. Holmes Jr., "Use of optical emission intensity to characterize an RF plasma source for MBE growth of GaAsN", *J. Cryst. Growth* 243, 396 (2002).
- [8] T. C. Ma, Y. T. Lin, H. H. Lin, "Effects of plasma species on the N incorporation of GaAsSbN grown by plasma-assisted gas-source molecular-beam epitaxy", *J. Cryst. Growth* 363/366, 318 (2011).
- [9] R. P. Vaudo, Z. Yu, J. W. Cook, Jr., and J. F. Schetzina, "Atomic-nitrogen production in a radio-frequency plasma source", *Opt. Lett.* 18, 1843 (1993).
- [10] D. Voulot, R. W. McCullough, W. R. Thompson, D. Burns, J. Geddes, G. J. Cosimini, E. Nelson, P. P. Chow, and J. Klaassen, "Characterisation of an RF atomic nitrogen plasma source", *J. Cryst. Growth* 201/202, 399 (1999).
- [11] Y. T. Lin, T. C. Ma, H. H. Lin, J. D. Wu, Y. S. Huang, "Effect of thermal annealing on the blueshift of energy gap and nitrogen rearrangement in GaAsSbN", *Appl. Phys. Lett.* 96, 011903 (2010).
- [12] L. Grenouillet, C. Bru-Chevallier, G. Guillot, P. Gilet, P. Duvaut, G. Rolland, and A. Million, "Rapid thermal annealing in GaN x As 1x / GaAs structures: Effect of nitrogen reorganization on optical properties", *J. Appl. Phys.* 91, 5902 (2002)
- [13] R. M. Martin, "Elastic Properties of ZnS Structure Semiconductors", *Phys. Rev. B*, vol. 1, pp. 4005-4011, 1970
- [14] H. H. Lin, C. L. Chiou, Y. T. Lin, T. C. Ma, J. S. Wu, and Z. C. Feng, "Short range structure of dilute nitride GaAsSbN", Nova Science Publishers, Inc. 218 (2012)
- [15] S. Bharatan, S. Iyer, K. Nunna, W. J. Collis, K. Matney, J. Reppert and A. M. Rao, P. R. C. Kent, "The effects of annealing on the structural, optical, and vibrational properties of lattice-matched

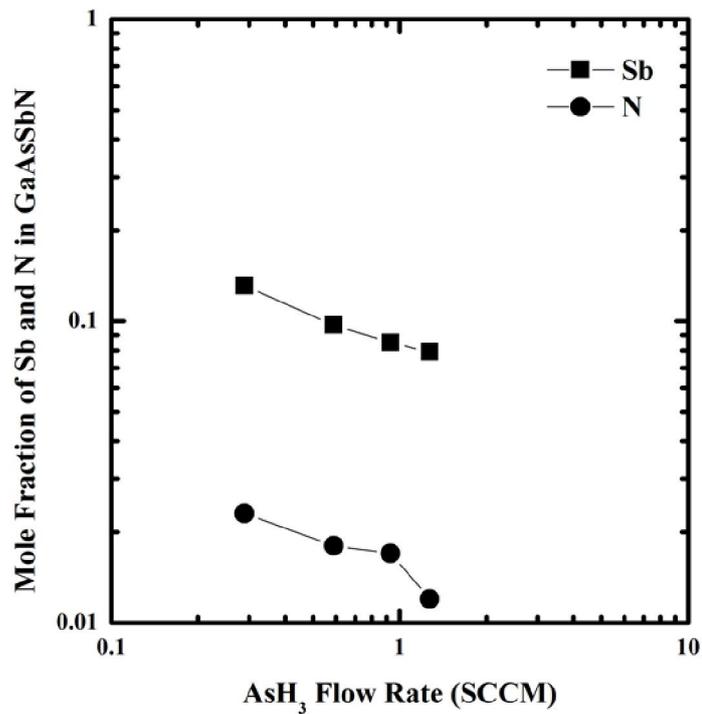
GaAsSbN/GaAs grown by molecularbeam epitaxy”, Appl. Phys. Lett. 102, 023503 (2007).



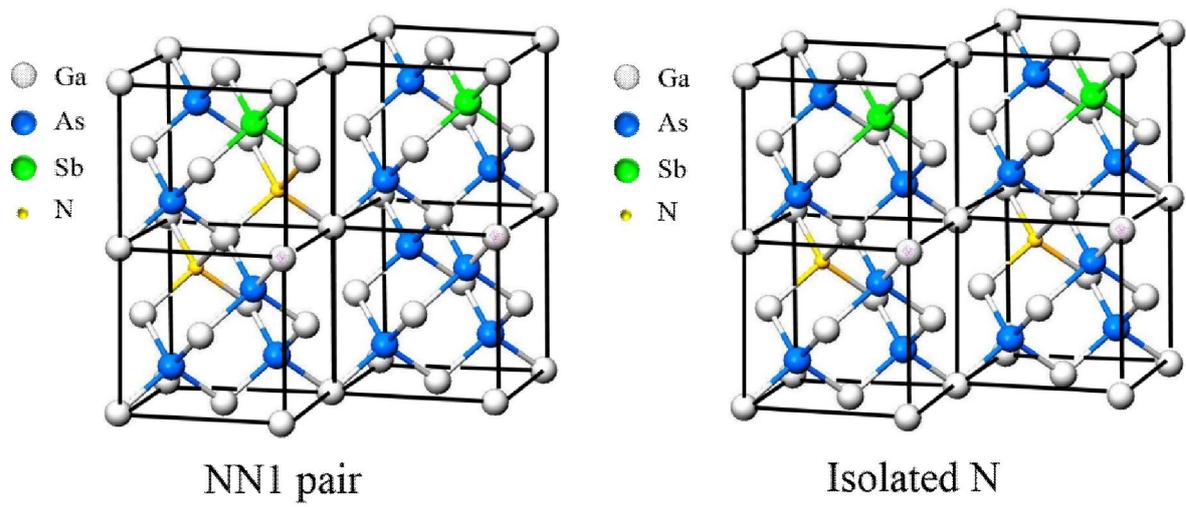
圖一、氮電漿源操作在 300W/0.76 SCCM 之下的放光光譜，標示 Mx 和 Ax 分別為氮分子和氮原子放光訊號[8]



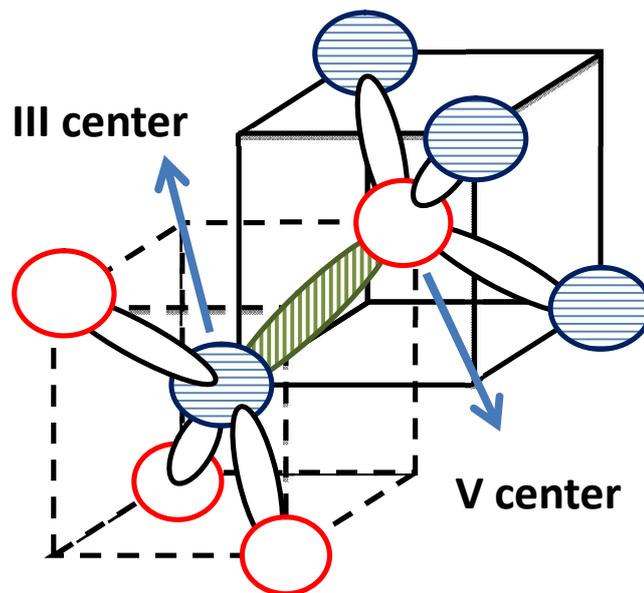
圖二、原子放光強度以及分子積分強度比值與原子流量關係



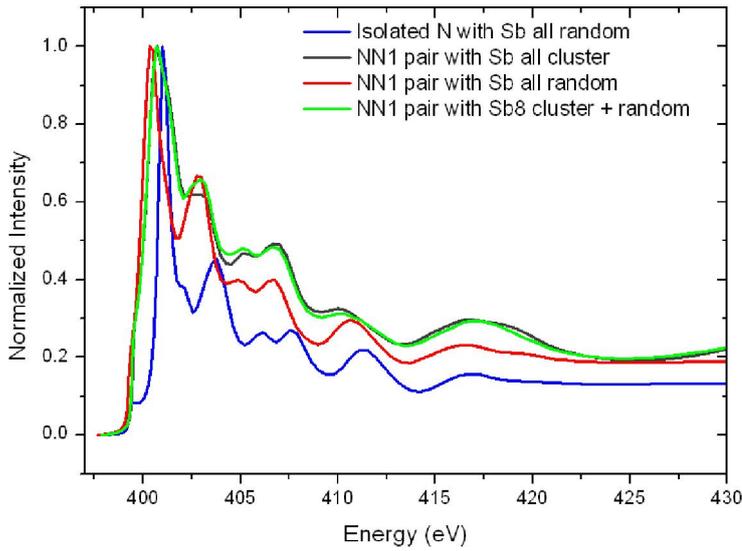
圖三、為 GaAsSbN 中銻和氮成分與  $\text{AsH}_3$  流量比值圖



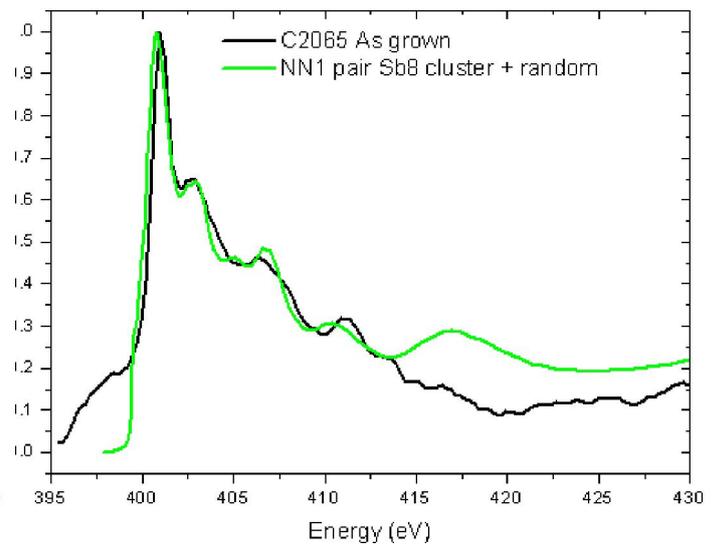
圖四、NN1 原子對模型與獨立 N 原子模型結構。



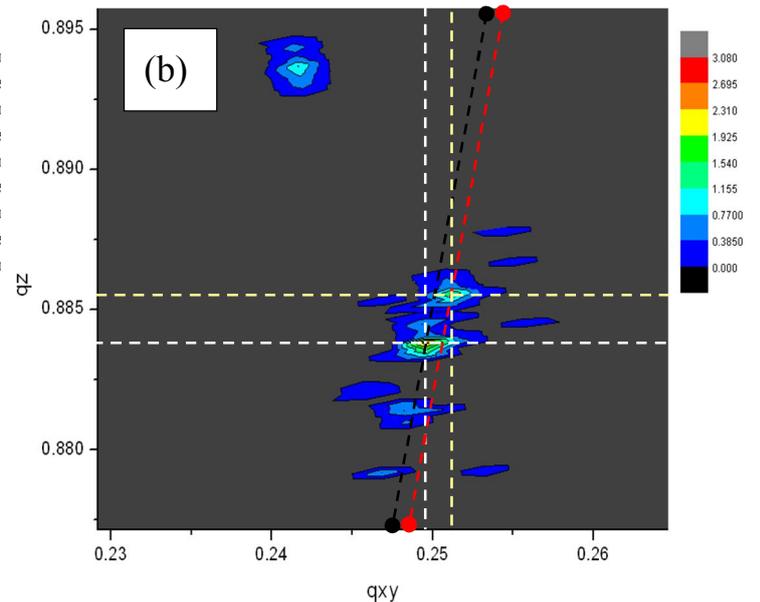
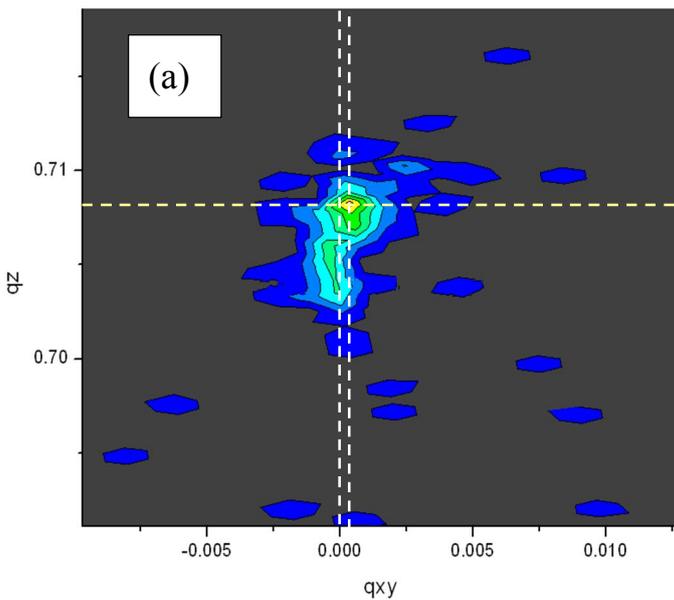
圖五、Zincblende 中三族與五族原子鍵結之架構。



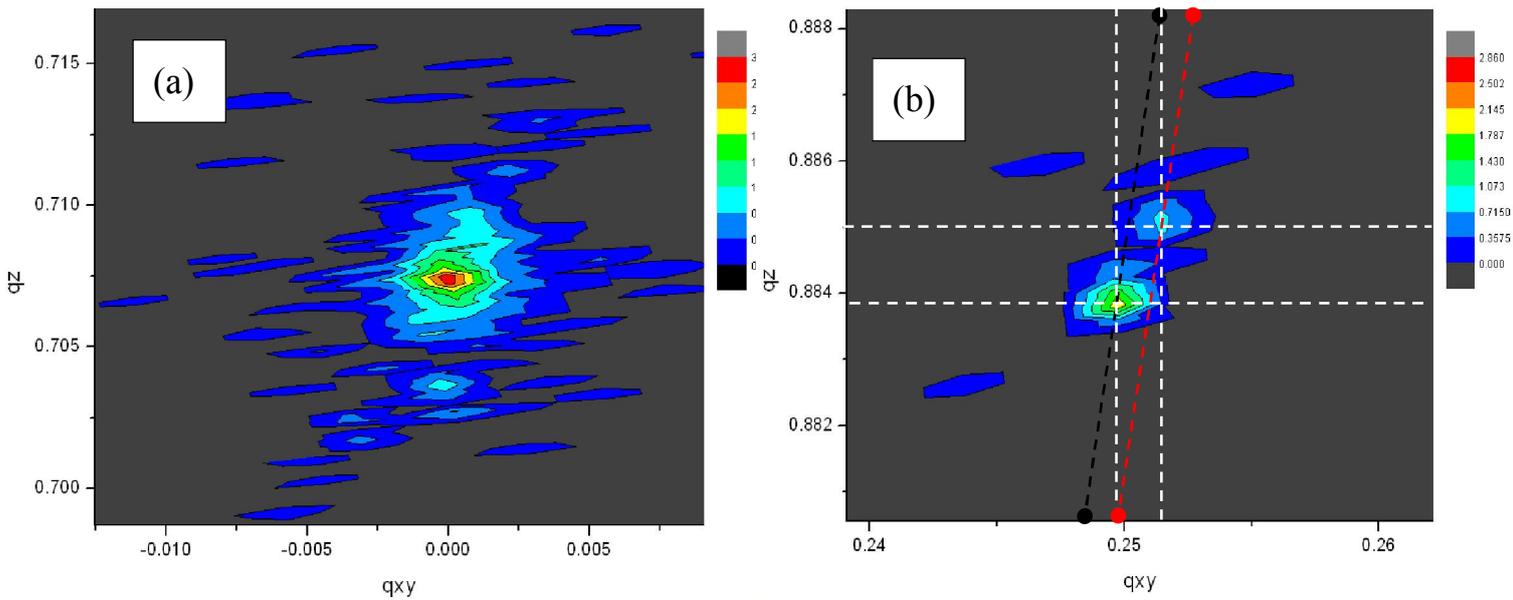
圖六、GaAsSbN XANES 模擬譜。中心原子結構如圖內標示。包括單獨 N 原子、NN1 原子對和 Sb8 顆聚集與全隨機排列等模型。



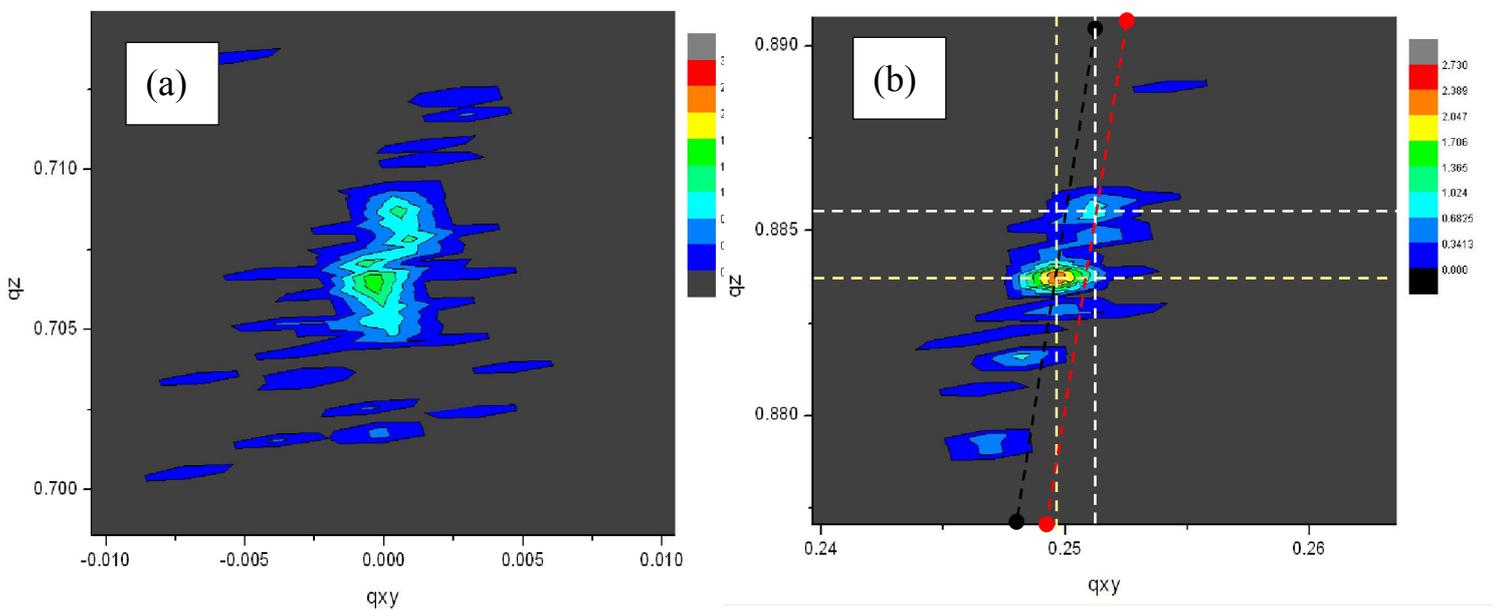
圖七、黑線為 GaAsSbN 中未退火樣品的 XANES 量測譜。綠線為模擬譜，其中心為 NN1pair 和 Sb 聚集與隨機排列模型。



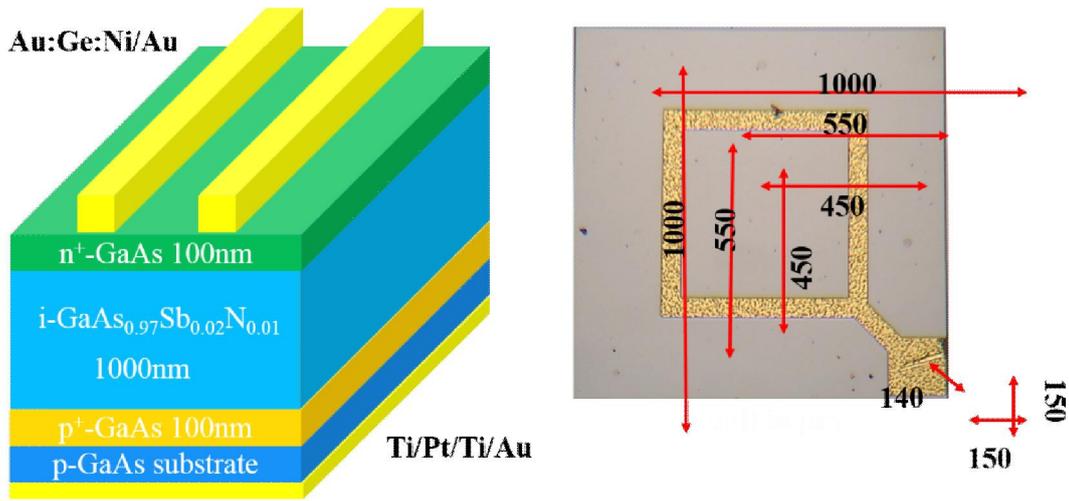
圖八、未退火的樣品之倒置空間 RSM (a)倒置晶格點為(004)、 (b)倒置晶格點為(115)。



圖九、800°C退火的樣品之倒置空間 RSM (a)倒置晶格點為(004)、(b)倒置晶格點為(115)。

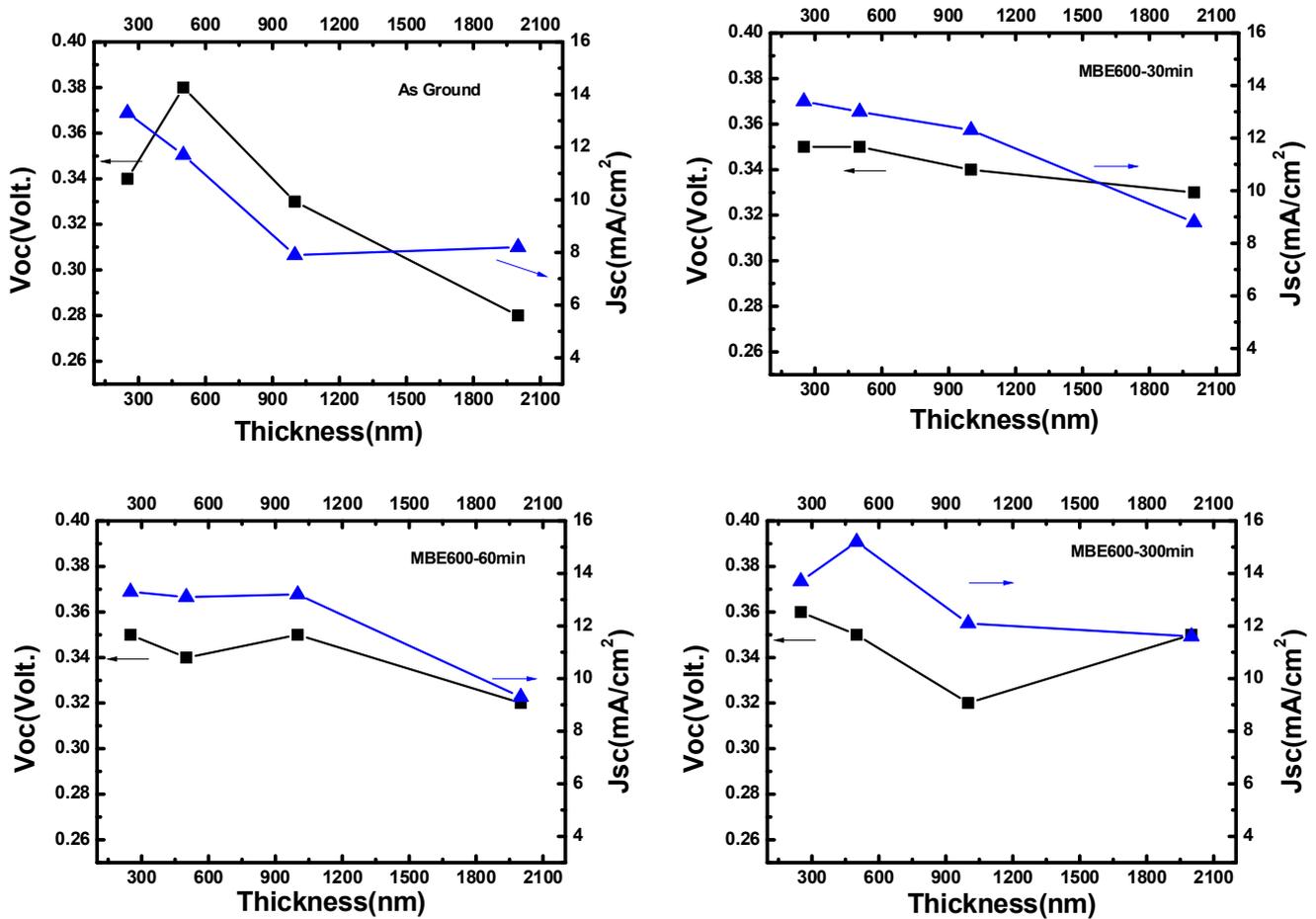


圖十、850°C退火的樣品之倒置空間 RSM (a)倒置晶格點為(004)、(b)倒置晶格點為(115)。

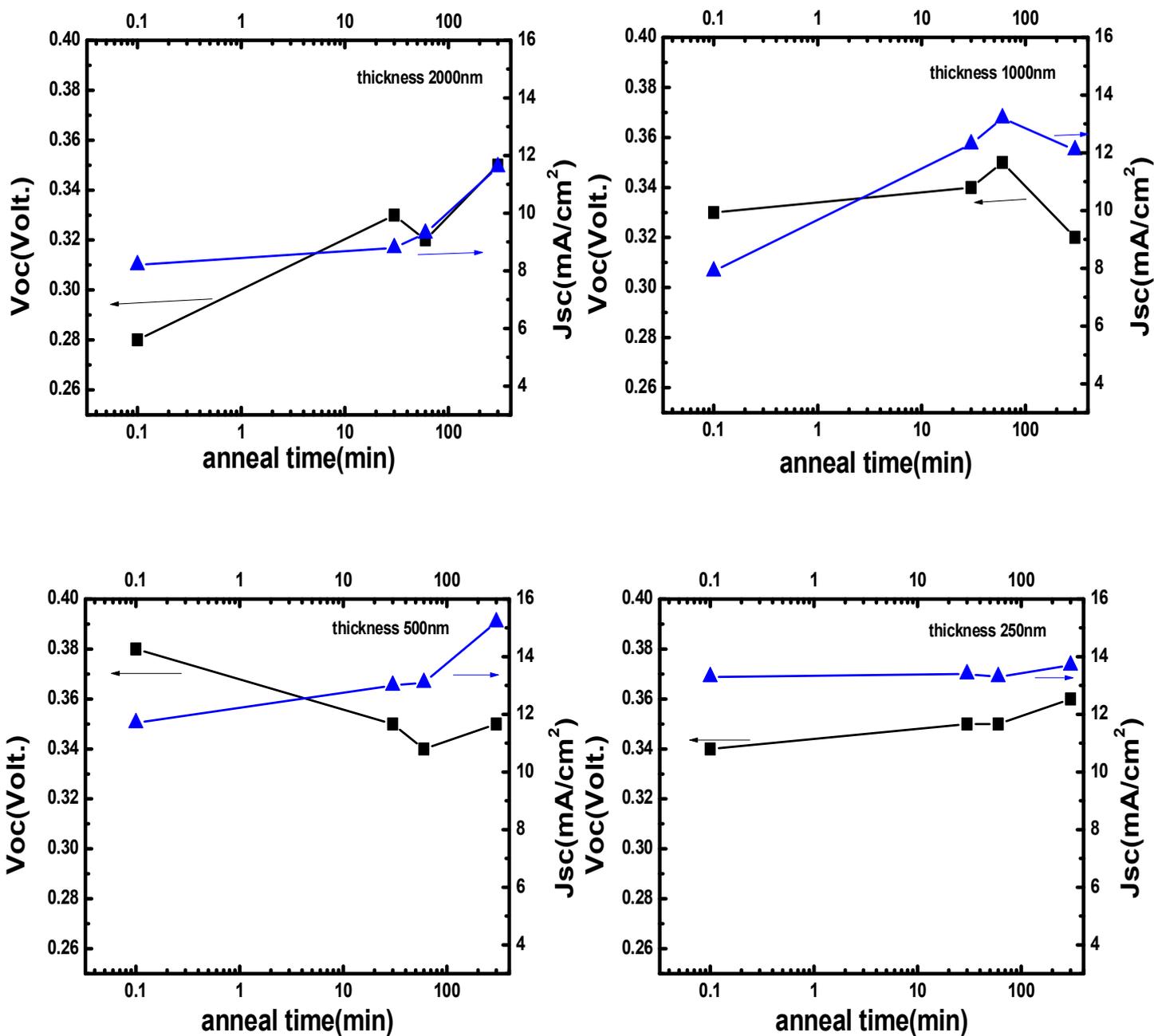


n+GaAs	90 nm	$T_g=590^\circ\text{C}$ , $n: 2 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$
n-GaAs	10 nm cap	$T_g=420^\circ\text{C}$ , $n: 2 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$
undoped GaAs <sub>0.97</sub> Sb <sub>0.02</sub> N <sub>0.01</sub>		$T_g=420^\circ\text{C}$ , $N=200\text{W}/200\text{T}$ , $\text{AsH}_3=900\text{T}$
p+GaAs	100 nm	$T_g=590^\circ\text{C}$ , $p: 2 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$
p-GaAs(100) substrate,		

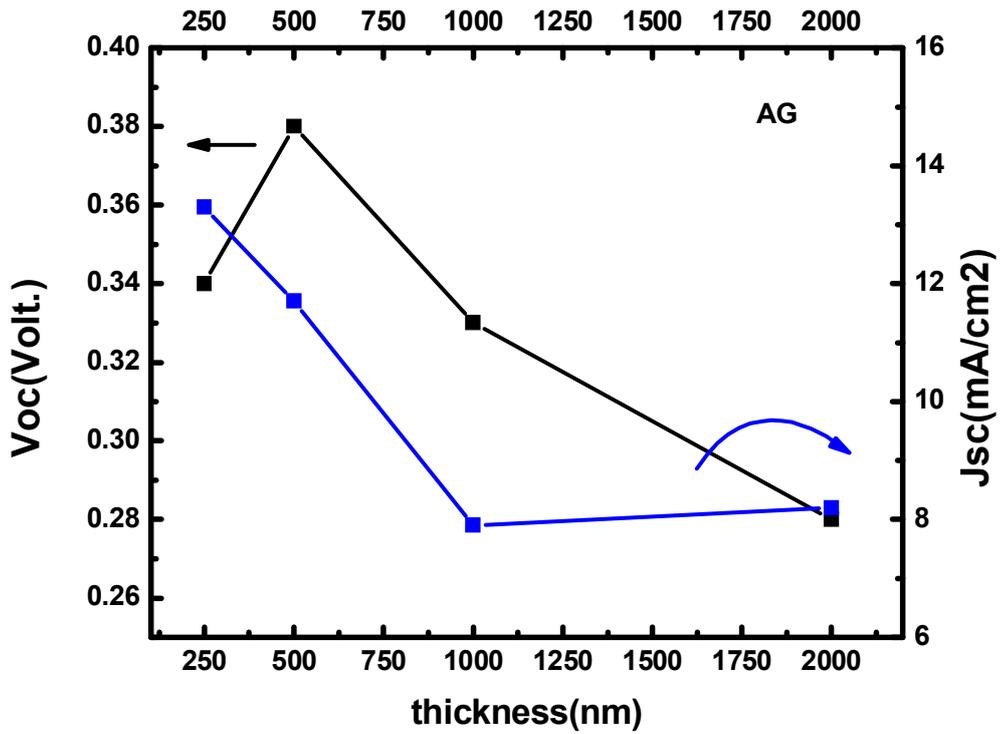
圖十一、GaAsSbN 太陽能電池各層材料結構



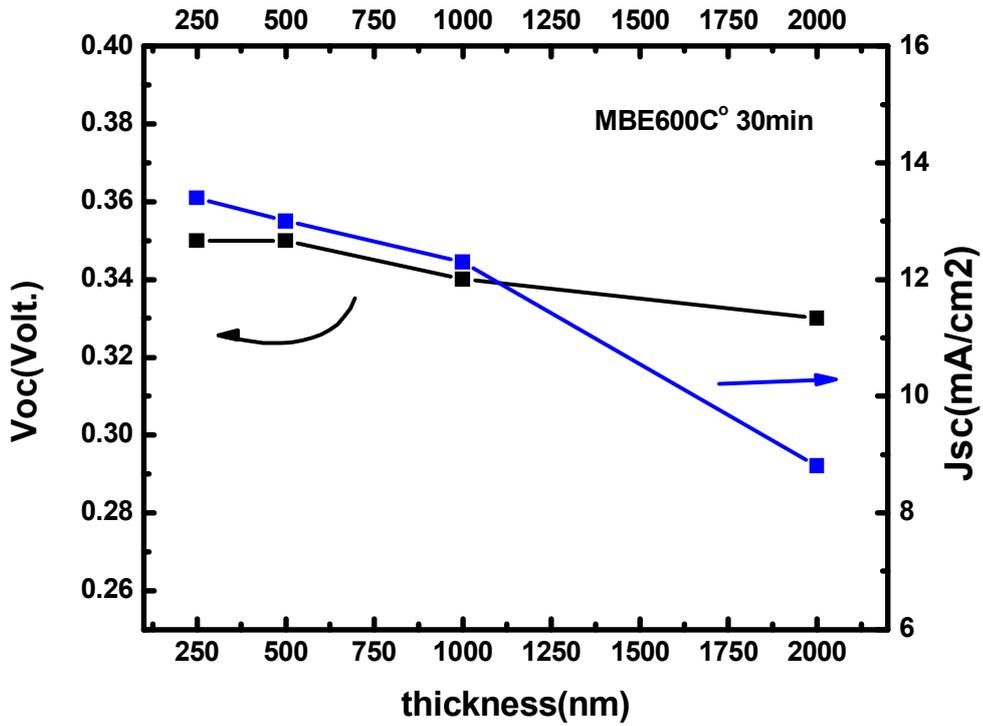
圖十二、不同 GaAsSbN-I region 厚度與熱退火溫度的電壓電流特性關係



圖十三、在熱退火時間 300 度下對應不同時間之電壓電流特性



圖十四、未熱退火的電池電性與 GaAsSbNi-region 厚度關係圖



圖十五、600°C熱退火 30 分鐘的電池電性與 GaAsSbNi-region 厚度關係圖

表一、在 VFF 計算中原子間伸縮力常數、彎曲力常數、原子鍵結長度

<i>Bond</i>	$\alpha$	$\beta$	$d$
<i>GaN</i>	95760dyn/cm	17150dyn/cm	1.9500Å
<i>GaAs</i>	41190dyn/cm	8950dyn/cm	2.4478Å
<i>GaSb</i>	33160dyn/cm	7220dyn/cm	2.6396Å

表二、三種中心氮原子模型及鍵長

Comparison between 3 NN1 cases	P2 intensity	2 <sup>nd</sup> distance (by VFF)
NN1 pair with Sb all random	0.667	3.82054Å
NN1 pair with Sb8 cluster + ranodm	0.658	3.88171Å
NN1 pair with Sb all cluster	0.620	3.90988Å

表三、不同熱退火溫度的垂直與水平晶格常數以及比例

	$a_{x,y}$ (Å)	$a_z$ (Å)	$a_z/a_{x,y}$
<b><i>C2065 AG</i></b>	<b>5.63095</b>	<b>5.64653</b>	<b>1.0027</b>
<b><i>C2065 RTA800</i></b>	<b>5.62471</b>	<b>5.65291</b>	<b>1.0050</b>
<b><i>C2065 RTA850</i></b>	<b>5.62896</b>	<b>5.64909</b>	<b>1.0036</b>

表四、不同熱退火溫度之水平晶格與垂直晶格差

	$\Delta q_{xy}$	$\Delta q_z$
As ground	$3.463 \times 10^{-2}$	$6.38 \times 10^{-3}$
800	$3.849 \times 10^{-2}$	$4.08 \times 10^{-3}$
850	$3.566 \times 10^{-2}$	$2.34 \times 10^{-3}$