29p-G7-1

$BaSi_2$エピタキシャル膜における不純物拡散係数の評価

Evaluation of diffusion coefficients of impurities in MBE-grown $BaSi_2$ epitaxial layers

[1]筑波大院　電子・物理工学専攻，[2]東北大金研，[3]JST-CREST
°中村 航太郎[1]，馬場 正和[1]，M. Ajmal. Khan[1]，W. Du[1]，宇佐美 徳隆[2]，原 康祐[2]
都甲　薫[1]，末益 崇[1,3]
[1]Inst. of Appl. Phys., Univ. of Tsukuba, [2]IMR, Univ. of Tohoku, [3]CREST JST
°K. Nakamura[1], M. Baba[1], M. Ajmal Khan[1], W. Du[1], N. Usami[2], K.O. Hara[2], K. Toko[1], T. Suemasu[1,3]
E-mail: bk200711102@s.bk.tsukuba.ac.jp

【背景・目的】

$BaSi_2$は禁制帯幅約 1.3 eVの間接遷移型半導体であるが[1)]、光吸収係数は 1.5 eVで 3×10^4 cm^{-1}と結晶Siの約 30 倍も大きい[2)]。さらに、Si基板上にエピタキシャル成長が可能であり、新しい太陽電池材料として期待される。われわれは、電子密度 5×10^{15} cm^{-3}のアンドープn-$BaSi_2$上に高品質なp-$BaSi_2$をエピタキシャル成長することで、pn接合を形成する計画である。$BaSi_2$はBのドーピングにより正孔密度を 10^{17}-10^{20} cm^{-3}の範囲で制御できている[3)]。しかし、$BaSi_2$中の不純物の拡散係数ついては報告例がない。本研究では、Bの拡散係数と拡散深さを、格子拡散および粒界拡散の視点で評価した。

【実験】

Si(111)基板上に、RDE法で形成した$BaSi_2$テンプレート層上に、アンドープ$BaSi_2$膜を基板温度 600 ºC でMBE成長した。MBE成長後、超高真空中で 850 ºC、10 分間のポストアニールを施した。その後、室温でBを 100-200 nm程度EB蒸着した。作製した試料をへき開し、超高真空中で 775 ºC、800 ºC、825 ºC でRTAを行い、Bをアンドープ$BaSi_2$膜へ拡散した。拡散後のBの深さ分布をO_2^+イオンを用いたSIMSで評価し、$BaSi_2$膜中のBの格子拡散係数および粒界拡散係数を算出した。算出した拡散係数に基づき、アンドープ$BaSi_2$膜中へ拡散するBの深さを評価した。

【結果・考察】

$BaSi_2$膜中のBのSIMSプロファイルをフィッティングすることで、$BaSi_2$膜中のBの拡散係数を求めた。フィッティングは格子拡散と粒界拡散の 2 つの拡散機構を含めて行った。粒界拡散は、Si(111)基板上の$BaSi_2$エピタキシャル膜が等価な 3 つのエピタキシャルドメインをもつため、ドメイン境界に粒界が存在することに起因する。Fig.1 に$BaSi_2$膜中のBの格子拡散係数$D_{Lattice}$および粒界偏析係数、粒界幅、粒界拡散係数の積$s\delta D_{GB}$のアレニウスプロットを示す。両者を比較するため、粒界幅はδ=0.5 nmとした。また、Siやシリサイド中の様々な不純物原子の格子、粒界拡散係数もFig.1 に示す[4-11)]。$BaSi_2$膜中のBの拡散係数は、格子、粒界拡散ともに他の材料中の不純物拡散係数に比較的近い。アレニウスプロットの傾きから、ポストアニールを施した$BaSi_2$膜中のBの格子拡散および粒界拡散の活性化エネルギーの大きさは、それぞれ 4.6 eV、4.4 eVであった。Fig.2 に、Bの格子、粒界拡散係数から算出した 800 ºCにおけるアンドープ$BaSi_2$膜中のBの拡散深さを示す。拡散深さは、B濃度が拡散源の 10^{-4}になる深さとした。800 ºCで 5 分間拡散させた場合の$BaSi_2$膜中のBの格子、粒界拡散深さはそれぞれ 40 nm、520 nmであり、光吸収層の厚さよりも十分に小さいといえる。

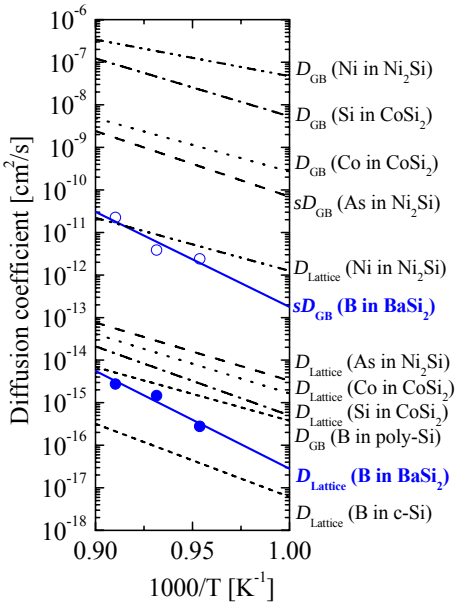

Fig.1　Arrhenius plots of $D_{Lattice}$ and sD_{GB} of B in $BaSi_2$ and those of some atoms in Si and silicide materials[4-11)].

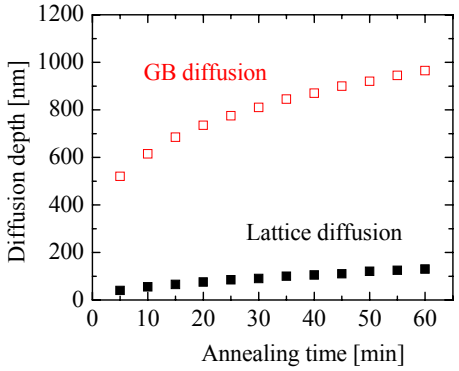

Fig.2　Lattice and GB diffusion depths of B in $BaSi_2$.

1) K. Morita *et al.*, Thin Solid Films **508** (2006) 363.
2) K. Toh *et al.*, Jpn. J. Appl. Phys **50** (2011) 068001.
3) M. Ajmal Khan *et al.*, MBE2012, WeA-1-2, Nara, Japan, Sept.26, 2012
4) T. Barge *et al.*, Appl. Surf. Sci. **53** (1991) 180.
5) T. Barge, Thesis, Universite Aix-Marseille III (1993).
6) O. Thomas *et al.*, J. Appl. Phys. **64** (1988) 2973.
7) T. Barge *et al.*, J. Mater. Res. **10** (1995).
8) I. Blum *et al.*, Microelectronic Engineering **87** (2010) 263.
9) J. C. Ciccariello *et al.*, J. Appl. Phys. **67** (1990) 1.
10) J. C. M. Hwang *et al.*, J. Appl. Phys. **51**, 1576 (1980).
11) S. Horiuchi *et al.*, Solid State Electron. **18**, 529 (1975).

© 2013 年　応用物理学会