BaSi,エピタキシャル薄膜の粒界性格の評価

Investigation of grain boundary character in BaSi₂ epitaxial thin-films

¹筑波大院 数理物質科学研究科 ²熊本大学 ³東北大学 ⁴JST-CREST

°馬場 正和¹,中村 航太郎¹, Du Weijie¹, M. Ajmal Khan¹,都甲 薫¹, 連川 貞弘², 原 康介 3,宇佐美 徳隆 3,4, 末益 崇 1,4

¹Univ. Tsukuba, ²Univ. Kumamoto, ³Univ. Tohoku, ⁴JST-CREST,

^oM. Baba¹, K. Nakamura¹, Du Weijie¹, M. Ajmal Khan¹, K. Toko¹, S. Tsurekawa²,

K. O. Hara³, N. Usami^{3,4}, T. Suemasu^{1,4}

E-mail:bk200711114@s.bk.tsukuba.ac.jp

【背景・目的】

BaSi₂は地殻埋蔵量の多い Baと Si から構成されており、光吸収係数が 1.5 eV のフォトン に対して 3×104 cm⁻¹, 禁制帯幅が 1.3 eV であることから、薄膜太陽電池材料として着目さ れている[1,2]。BaSi2は Si(111)上に a 軸配向で面内に 3 回対称で結晶成長することが分かっ ており、その結晶粒径は最大で約 4.0 μm が得られている[3, 4]。しかし、少数キャリアに対 する結晶粒界の性格は分かっていない。本研究では、ケルビンプローブ原子間力顕微鏡法 (KFM 法)を用いて BaSi, 膜中のポテンシャルエネルギーの分布を調べた。

【実験】

BaSi2の結晶成長には高真空チャンバー内で、熱反応堆積法(RDE法)で BaSi2 テンプレー ト層を形成し、その上に分子線エピタキシー(MBE法)の2段階結晶成長を行った[5]。Si(111) 上への BaSi2の RDE 成長条件は幾つか報告されているが、[4] KFM 測定には平坦な表面形 状が好ましいことから、最も平坦化できた T_{sub.} = 600°C, R_{Ba} = 0.25 nm/min, t_{RDE} = 120 min の 条件を採用した。MBE 成長は、R_{Ba} = 3.0 nm, R_{Si} = 1.0 nm/min として、T_{sub.} = 580°C で 1 時間 行った。結晶性は、反射高速電子線回折(RHEED)、θ-2θ X 線回折を用いて評価を行い、表 面ポテンシャルの評価に KFM 法を用いた。

【結果】

Fig. 1(a), (b) はそれぞれ同一箇所における BaSi2の AFM 像と KFM 像である。これらの像 における AB 間の断面プロファイルを Fig. 2 に示す。Fig. 2(a)から、結晶粒径は約1 µm であ り、また、Fig. 2(b)から、結晶粒界では周囲よりも約 50 meV ポテンシャルが高いといえる。 このことより、n型の undoped BaSi2の少数キャリアであるホールに対して粒界は再結合中 心として働くことが推察される。今後、EBSD で粒界位置を定め、その場所のポテンシャル を KFM で評価する。

[1] K. Morita,..., T. Suemasu, Thin Solid Films **508** (2006) 363.

[2] K. Toh,..., T. Suemasu, Jpn. J. Appl. Phys. 50 (2011) 068001.

- [3] Y. Inomata,..., T. Suemasu, Jpn. J. Appl. Phys. 43 (2004) L478.
- [4] M. Baba,..., T. Suemasu, Jpn. J. Appl. Phys. 51 (2012) 098003. (a)

[5] M. Baba,..., T. Suemasu, J.Cryst. Growth 348 (2012) 75.



Fig.1 (a) AFM and (b) KFM images in the same region of the BaSi₂ surface.



Fig.2 (a) surface topography and (b) potential profile along A-B in Fig. 1.