BaSi₂ エピタキシャル膜における P の拡散係数評価 Evaluation of diffusion coefficients of P in MBE-grown BaSi₂ epilayers ¹筑波大院 電子・物理工学専攻, ²JST-CREST [°]章 寧¹,馬場 正和¹, W. Du¹,小池 信太郎¹,高部 涼太¹, 都甲 薫¹,末益 祟^{1,2} ¹Inst. of Appl. Phys., Univ. of Tsukuba, ²CREST JST [°]N. Zhang¹, M. Baba¹, W.Du¹, S. Koike¹, R. Takabe¹,

K. Znang¹, M. Baba¹, W.Du¹, S. Koike¹, K. Takabe¹, K. Toko¹, T. Suemasu^{1, 2} E-mail: <u>bk200913016@s.bk.tsukuba.ac.jp</u>

【背景・目的】

BaSi₂は 1.5 eV の光に対し 3×10⁴ cm⁻¹吸収係数を 持ち、禁制帯幅が太陽電池の最適幅に近い 1.3 eV で ある。また、Si 基板上にエピタキシャル成長ができ るため、高効率薄膜太陽電池の新材料として期待さ れている^{1,2)}。太陽電池の基本構造である pn 接合を 作製するため、不純物による伝導型、キャリア密度 の制御が必要である。特に、急峻な pn 接合を形成 するために拡散係数の小さいドーパントを見出す 必要がある。我々は、これまで BaSi₂膜中の III 族ド ーパントである B と Al の拡散係数を ³⁾、また、V 族ドーパントの Sb と As の拡散係数を測定してきた。 本研究では V 族ドーパントである P を取り上げ、格 子拡散と粒界拡散の視点で拡散係数を評価した。

【実験】

Si(111) 基板上に、RDE 法で形成した BaSi₂ テンプ レート層上に、厚さ 300 nm のアンドープ BaSi₂ 膜を 基板温度 580 ℃ で MBE 成長した。その後、真空チ ャンバー内で、GaP を 700 ℃ に加熱し、P 原子を BaSi₂ 膜に照射しながら試料をアニールし、P を BaSi₂ 膜中に拡散した。アニール条件は 400 ℃ 30 min であ る。拡散後の不純物の深さ方向分布を Cs⁺イオンを 用いた SIMS で評価した。

【結果・考察】

Fig.1 に試料の RHEED 像と 20/∞XRD パターン を示す。RHEED パターンはストリークパターンで あり、XRD の回折ピークは a 軸配向した BaSi₂から の回折ピークが支配的である。このため、BaSi₂ が エピタキシャル成長したといえる。また Si(111)基板 上に成長した BaSi₂のエピタキシャル膜は 3 つのド メインを持つため、格子拡散だけでなく、ドメイン 境界における粒界拡散も考慮しなければいけない。 Fig.2 は BaSi₂膜中における P の深さ方向プロファイ ルに対しフィッティングを行った結果である。格子 拡散及び粒界拡散の実験値はフィッティング線と よく一致している。フィッティングにより、400 ℃ における P の格子拡散係数と粒界拡散係数を算出 した。格子拡散係数は 1.5×10⁻¹⁶ cm²/s あり、同温 度における As の格子拡散係数と同程度である。粒 界拡散係数は 2.4×10⁻¹² cm²/s と、同温度における As の粒界拡散係数より 2 桁大きい。



Fig. 1 (a) RHEED pattern observed along Si[11-2] and (b) $2\theta/\omega$ XRD pattern of undoped BaSi₂



Fig. 2 Measured and simulated SIMS profiles of P in the undoped BaSi₂ film after annealing at 400 °C for 30 min.

- 1) K. Morita et al., Thin Solid Films 508 (2006) 363.
- 2) K. Toh *et al.*, Jpn. J. Appl. Phys **50** (2011) 068001.
- 3) K. Nakamura et al., J. Appl. Phys. 113 (2013) 05311.