

20a-D3-4

KFM 法による B 添加 *p* 型 BaSi₂ エピタキシャル薄膜表面のポテンシャル分布Surface potential distribution of B-doped *p*-type BaSi₂ epitaxial thin films on Si(111)

by Kelvin probe force microscopy

¹筑波大院 数理 ²名古屋大学 ³JST-CREST°馬場 正和¹, 塚原 大地¹, Du Weijie¹, 都甲 薫¹, 渡辺 健太郎¹, 原 康介², 宇佐美 徳隆^{2,3}, 末益 崇^{1,3}¹Univ. Tsukuba, ²Univ. Nagoya, ³JST-CREST,°M. Baba¹, D. Tsukahara¹, Weijie Du¹, K. Toko¹, K. Watanabe¹, K. O. Hara², N. Usami^{2,3}, T. Suemasu^{1,3}

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 から構成されている間接遷移半導体で、光吸収係数が 1.5 eV の光子に対して $3 \times 10^4 \text{ cm}^{-1}$ 、禁制帯幅が 1.3 eV であることから、薄膜太陽電池材料への応用が期待できる [1,2]。また、BaSi₂は Si(111), Si(001)上に *a* 軸配向で結晶成長し[3,4]、その粒界特性が基板の面方位によって異なることが示されている[5]。太陽電池を形成するためには *p* 型層、*n* 型層の両方が必要である。*n* 型層として用いる undoped *n*-BaSi₂膜については、粒界の知見を既に得ているが、*p* 型層については未だである。*p* 型 BaSi₂は B 添加により形成することができ[6]、本研究では B 添加による *p* 型 BaSi₂の粒界特性を評価した。

【実験】

BaSi₂膜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)で成膜する 2 段階結晶成長を行った[4]。Ba, B は K-cell で、Si は EB-gun により供給した。また、MBE 成長時における B の添加量を制御することによって B-doped BaSi₂のキャリア密度を制御した。成膜後の試料に対して反射高速電子線回折(RHEED)、 θ -2 θ X 線回折により配向成長を確認した後、ケルビンプローブ原子間力顕微鏡法(KFM 法)を用いて粒界周りにおけるポテンシャル分布を評価した。また、得られたポテンシャル分布から、粒界周りにおけるバンド構造及び粒界の性格を推定した。

【結果】

図 1(a)-(d)は異なるキャリア密度の BaSi₂におけるトポロジー像、図 1(a')-(d')は同一箇所におけるポテンシャル分布である。図 1(a')-(c')において、キャリア密度が高くなるほど表面ポテンシャルが一樣になる傾向が見られた。これは膜全体に B が拡散することにより粒界と粒内でのポテンシャルの差が小さくなったためと考えられる。また、図 1(c')と(d')を比べると、BaSi₂/Si(111)では粒界の、BaSi₂/Si(001)では粒内のポテンシャルがより小さくなる傾向が見られた。B はアクセプタ不純物として存在するため負の電荷を帯びていると考えられる。図 1 のポテンシャル像では負の電荷が暗いコントラスト、正の電荷が明るいコントラストとして表現される。このため、B は BaSi₂/Si(111)では粒界に、BaSi₂/Si(001)では粒内に偏析することが考えられる。

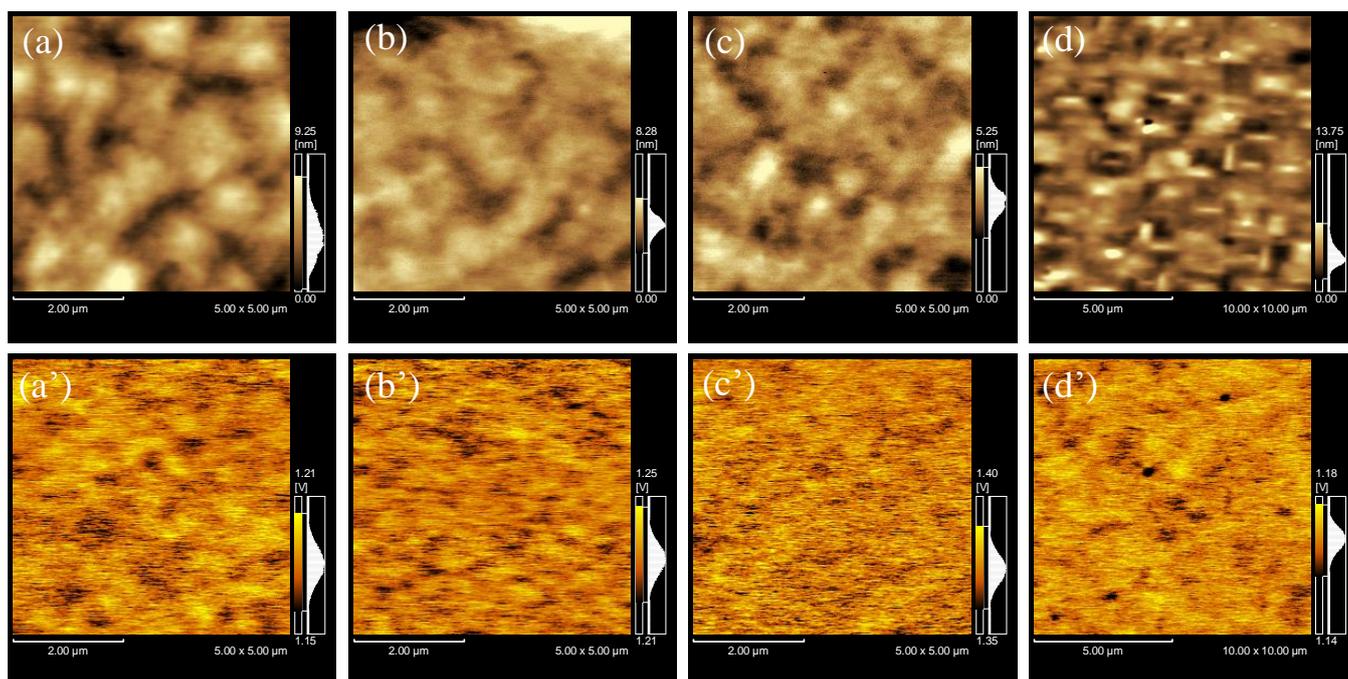
[1] K. Morita, ..., T. Suemasu, Thin Solid Films **508** (2006) 363.[2] K. Toh, ..., T. Suemasu, Jpn. J. Appl. Phys. **50** (2011) 068001.[3] M. Baba, ..., T. Suemasu, J. Cryst. Growth **348** (2012) 75.[4] K. Toh, ..., T. Suemasu, J. Cryst. Growth **345** (2012) 16.[5] M. Baba, ..., T. Suemasu, Appl. Phys. Lett. **103** (2013) 142113.[6] M. Ajmal Khan, ..., T. Suemasu, Appl. Phys. Lett. **102** (2013) 112107.

図 1 (a)-(c) B-doped BaSi₂/Si(111), (d) B-doped BaSi₂/Si(001)のトポロジー像、(a')-(c') B-doped BaSi₂/Si(111), (d) B-doped BaSi₂/Si(001)の表面ポテンシャル像

キャリア密度は(a) $2.7 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, (b) $4.0 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$, (c) $1.2 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$, (d) $1.2 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$.