KFM 法による Sb-doped BaSi2 薄膜表面の粒界ポテンシャル評価 Investigation of potential at grain boundaries in Sb-doped BaSi2 thin-films by Kelvin probe force microscopy

1筑波大院 数理物質科学研究科 2名古屋大学 3JST-CREST

○塚原 大地¹, 馬場 正和¹, 高部 涼太¹, 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, ⁴JST-CREST,

^OD. Tsukahara¹, M. Baba¹, R. Takabe¹, K. Toko¹, K. Watanabe¹, K. Hara²,

N. Usami^{2,3}, T. Suemasu^{1,3}

E-mail:bk201011062@s.bk.tsukuba.ac.jp

【背景・目的】

BaSi₂は地殻埋蔵量の豊富な元素である Ba, Si により構成され、光吸収係数が 1.5 eV の光子に 対して 3×10⁻⁴ cm⁻¹と大きく、禁制帯幅が 1.3 eV と太陽電池に適した値であることから、高効率薄膜 太陽電池材料として期待できる[1,2]。BaSi₂ は Si(111)基板上に 3 回対称のドメインでエピタキシャ ル成長することがわかっており[3]、最大でも粒径が 4 µm であることから[4]、多数の粒界が存在す る。過去の研究により、Si(111)基板上の undoped n-BaSi₂の粒界におけるバンド構造は下に凸であ り、障壁高さも約 30 meV と小さいことから少数キャリア(正孔)は粒界においてトラップされ難いこと が分かっているが[5]、BaSi₂の n 型制御のためのドーパントである Sb を添加した場合の粒界の性 格についてはまだ分かっていない。そこで、Sb-doped BaSi₂の粒界の性格を明らかにするために、 ケルビンプローブ原子間力顕微鏡法(KFM 法)を用いて粒界ポテンシャル評価を行った。 【実験】

超高真空チャンバー内で熱反応堆積法(RDE 法)と分子線エピタキシー法(MBE 法)の2 段階結 晶成長を行い、Sb-doped BaSi₂膜をSi(111)基板上に作製した。RDE 成長時の条件は $T_{sub.}$ = 500°C, R_{Ba} = 1.0 nm/min として5 分間行い、MBE 成長時の条件は T_{sub} =520 °C, R_{Ba} = 3.0 nm/min, R_{Si} = 1.0 nm/min, T_{Sb} =250 °C として3 時間行った。段差計による測定の結果膜厚は 198 nm となり、ホー ル測定の結果キャリア密度は 2.8×10¹⁹ cm⁻³ となった。結晶性の評価には反射高速電子線回折 (RHEED)、 θ -2 θ X線回折を用い、表面ポテンシャル評価には KFM 法を用いた。 【結果】

図 1(a), (b)に試料表面の同一箇所における、3×3 µm 四方の表面トポロジー像と表面ポテンシャル像を示す。また図 2(a), (b)に図 1 の点線部分の断面プロファイルを示す。これらを見ると、凹凸がほぼ対応しており、表面トポロジー像の断面プロファイルにおいて下に凸となっている箇所、すなわち粒界部分においてポテンシャルが低くなっていることが分かる。これより粒界は負に帯電しており、粒界におけるバンド構造は上に凸であることが分かった。これは undoped n-BaSi₂ において観測される粒界におけるバンド構造とは異なっており、不純物である Sb を添加したことで粒内と粒界において相対的なポテンシャル差が生じたためであると考えられる。

(a) A

【結果】

[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.

[5] M. Baba,..., T. Suemasu, Appl. Phys. Lett. 103 (2013) 142113.



 $\begin{array}{c} 6.60 \\ [nm] \\ 0.00 \\ 0.00 \\ \hline \mu m \\ 1.29 \\ [V] \\ 1.24 \\ \hline 0.00 \\ \hline \mu m \\ 0.00 \\ \hline \mu m \\ 3.00 \\ \hline \mu m \\ \hline \mu m \\ 3.00 \\ \hline \mu m \\ \hline \mu$

A'

図 1 Sb-doped BaSi2の同一箇所における 3×3 µm 四方の(a) 表面トポロジー像 (b)表面ポテンシャル像

図 2 (a)表面トポロジー像における断面プロフ アイル (b)表面ポテンシャル像における断面 プロファイル