# MBE 法でエピタキシャル成長した BaSi<sub>2</sub> 膜粒径の成長膜厚依存性 Thickness dependence of grain size of BaSi<sub>2</sub> films on Si(111) substrates by MBE <sup>1</sup>筑波大学院 数理物質科学研究科,<sup>2</sup>JST-CREST

<sup>O</sup>塚原 大地<sup>1</sup>, 馬場 正和<sup>1</sup>, 都甲 薫<sup>1</sup>, 末益 祟<sup>1,2</sup>

Univ. Tsukuba<sup>1</sup>, JST-CREST<sup>3</sup>

<sup>o</sup>Daichi Tsukahara<sup>1</sup>, Masakazu Baba<sup>1</sup>, Kaoru Toko<sup>1</sup>, Takashi Suemasu<sup>1,2</sup> E-mail: bk201011062@s.bk.tsukuba.ac.jp

## [背景]

BaSi2 の禁制帯幅(1.3 eV)は太陽電池に適し ており、また、1.5 eV のフォトンに対して 3× 10<sup>4</sup> cm<sup>-1</sup> の高い光吸収係数を持つことから、 我々は高効率薄膜太陽電池材料として BaSi2 に 注目している<sup>1,2</sup>。BaSi<sub>2</sub>はSi(111)基板上にa軸 配向でエピタキシャル成長するが、互いに120 度回転した3つのドメインが存在するため、多 くの粒界が存在することが分かっている。これ まで、BaSi2の粒径及び粒界付近のポテンシャ ル測定など、粒界に関する評価が多数行われ、 様々な物性が明らかとなっている<sup>3-5</sup>。しかし、 これらの評価は主に厚さ数百 nm の BaSi2 膜に 対して行われており、1 µm を超える厚膜に対 する評価はあまり行われていない。今後デバイ ス作製を考える際には、厚膜 BaSi2の知見が必 要不可欠である。そこで、本実験では成長膜厚 を変えた BaSi2 膜を Si(111)基板上にエピタキ シャル成長し、原子間力顕微鏡(AFM)を用いて 粒径の変化を評価した。

#### [実験]

熱反応堆積法(RDE 法)及び分子線エピタキ シー法を用いて、580 ℃ に加熱した n-Si(111)基 板上に厚さ 240 nm(sample A)および 1500 nm(sample B)の BaSi₂膜をエピタキシャル成長 した。結晶性の評価には反射高速電子線回折 (RHEED)、θ-2θX線回折を用い、a 軸配向した BaSi₂ 膜が成長したことを確認した。これらの 試料表面を AFM 法を用いて評価した。

### [結果・考察]

Figure 1(a), 1(b)にそれぞれ AFM 測定により得 られた sample A 及び sample B の 10 µm 四方の トポロジー像を示す。これらの図から sample A の粒径はおよそ 200 nm であり、sample B の粒 径は2µm程度であることが見て取れる。この ことから、BaSi2 膜厚が増加することで、結晶 粒径が大きくなったといえる。さらに、Fig.2(a) に AFM 測定により得られた sample B の 1 µm 四方のトポロジー像を示す。この像においては、 BaSi2の3回対称のドメインに対応していると 考えられる特徴的な六角形の粒が観測された。 また、この粒の中心から外側に向かって破線 AB に沿うラインスキャンを行った結果を Fig. 2(b)に示す。このプロファイルにおいてはステ ップテラス構造が観測され、それぞれのステッ プの高さはおよそ0.5 nm であった。この値は、

BaSi<sub>2</sub>の a 軸(0.892 nm)の半分に近い。この結果 は、大阪大学グループの研究結果と一致してお り。、表面においては BaSi<sub>2</sub>(002)面が露出して いると考えられる。膜厚を増やすことで粒径が 拡大した原因として、Fig. 1(b)において周囲よ りも小さな BaSi<sub>2</sub>粒も存在していることから、 Fig. 3 に示す断面の模式図のように、小さな結 晶粒が融合して大きな結晶粒になったと考え られる。今後は EBSD や TEM 観察などを用い てより詳細な評価を行っていく予定である。



Fig. 1 AFM topographic images of (a) sample A (240 nm) and (b) sample B (1500 nm).



Fig. 2 (a) AFM topographic image of sample B and (b) its cross sectional profile along the broken line.



Fig. 3 Schematic image of BaSi2 cross section on a Si(111) substrate.

#### [参考文献]

- [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. Baba et al., J. Crystal Growth 348 (2012) 75.
- [4] M. Baba et al., Appl. Phys. lett. 103 (2013) 142113.
- [5] D. Tsukahara et al., J. Appl. Phys. 116 (2014) 123709.
- [6] S. Okasaka et al., Surf. Sci. 635 (2015) 115