

BaSi₂ domain boundary の最安定構造及び界面特性についての考察 Characterization of BaSi₂ stable structure and properties at domain boundaries

¹筑波大院 数理 ²産総研ユビキタス ³JST-CREST

[○]馬場 正和¹, 香山 正徳², 都甲 薫¹, 末益 崇^{1,3}

¹Univ. Tsukuba, ²AIST, ³JST-CREST,

[○]M. Baba¹, M. Kohyama², K. Toko¹, and T. Suemasu^{1,3}

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

【背景・目的】

BaSi₂は、光吸収係数が $3 \times 10^4 \text{ cm}^{-1}$ @ 1.5 eV と大きく、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]。BaSi₂は Si(111)基板上に *a* 軸配向にエピタキシャル成長し、120°回転した 3 回対称のドメインを有するマルチドメインエピタキシャル膜を形成する[2]。そのドメインサイズは 0.2 μm と微小ながら、9.4 μm の少数キャリア拡散長が得られている[3]。我々はその起源として BaSi₂に含まれる粒界面に着目し研究を行ってきた。ケルビンプローブ原子間力顕微鏡法(KFM)により BaSi₂の grain boundary (GB)は粒内に比べて正の電荷を有しており、*n* 型の undoped BaSi₂の少数キャリアである正孔を捕獲しにくいことを明らかにした[4]。KFMの分解能では domain boundary (DB)までは検出できないため GB を評価した。我々は複数の DB が GB を形成していると推察している。DBは図1に示すように直線状となっており、(011) or (0-11)で形成されていることが透過電子顕微鏡(TEM)によって確認されている[3]。ただし、よりミクロなスケールでの評価を行うには、実験的アプローチでは難しい。そこで、平面 TEM から得られた情報を基に界面モデルを形成し、第一原理計算を用いた理論的観点から DB の特性を検討した。

【実験】

計算には VASP を採用した。計算モデルは図2に示すよう(011)/(011), (011)/(0-11)界面モデルを使用した。界面から 2 原子層分を原子緩和させるとともに、*b'* 軸方向に界面をずらすことでエネルギー的に最安定な構造を決定した。界面の特性は、最安定な構造に対して、各面の総電子密度をプロットすることで、相対的に界面がバルク内に比べて正・負どちらに偏った電荷を帯びているかを判別した。

【結果】

図3に(011)/(011), (011)/(0-11)モデルにおける界面エネルギーを示す。図3のグラフから(011)/(011)界面については半周期ずらした構造が、(011)/(0-11)界面については界面をずらさない構造が最安定であることが分かった。次に、これらの最安定構造について各面の総電子密度を図4に示す。図4から、(011)/(011)界面はバルク内に比べて電子密度が高く、(011)/(0-11)界面ではバルク内と大きな差は見られなかった。これらの結果を踏まえて各界面近傍におけるバンド図を検討すると、(011)/(011)界面では下に凸、(011)/(0-11)界面ではフラットなバンド構造となる。今回得られた結果はいずれも KFM による結果を支持しており、BaSi₂の粒界が少数キャリアを捕獲しないのは界面近傍の電子電荷密度分布によると考えられる。

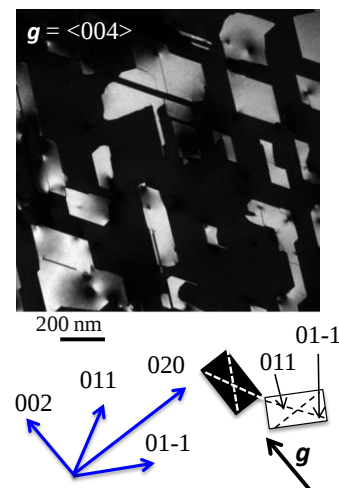


図1. 平面 TEM 暗視野像

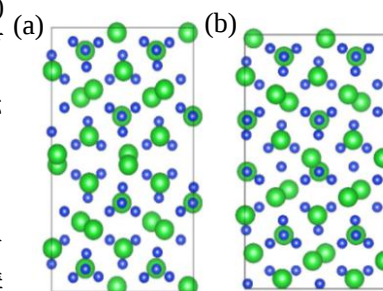


図2. (a) (011)/(011), (b) (011)/(0-11) 界面モデル

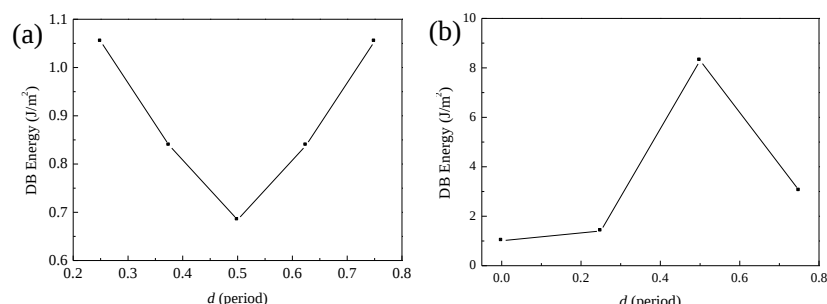


図3. (a) (011)/(011), (b) (011)/(0-11) 界面エネルギー

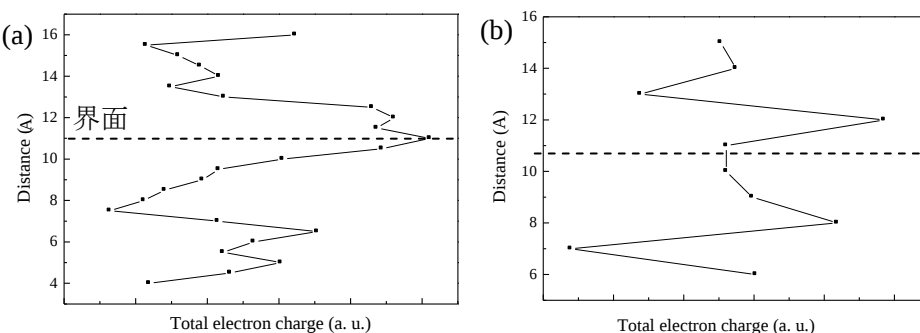


図4. (a) (011)/(011), (b) (011)/(0-11) 界面モデル深さ方向における総電子密度分布

- [1] K. Toh,..., T. Suemasu, Jpn. J. Appl. Phys. **50** (2011) 068001.
[2] Y. Inomata,..., T. Suemasu, Jpn. J. Appl. Phys. **43** (2004) L478.
[3] M. Baba,..., T. Suemasu, J. Cryst. Growth **348** (2012) 75.
[4] M. Baba,..., T. Suemasu, Appl. Phys. Lett. **103** (2013) 142113.