

Si クラスレート薄膜の新しい合成法 : NaSi の溶融による前駆体膜作製

A new synthesis method of Si clathrate film: Precursor film made by melting of NaSi

岐大工[○]上阪 拓, 大橋史隆, 久米徹二, 野々村修一

Gifu Univ.,[○]Taku Kozaka, Humitaka Ohashi, Tetsuji Kume, Shuichi Nonomura

E-mail: u3130016@edu.gifu-u.ac.jp

Si が sp^3 結合のかご状フレームワークを形成する II 型 Si クラスレートは、一般的に前駆体である NaSi から合成される。Si のかごの中には、Na がゲストとして閉じ込められているが、これを除去することが可能である。すべて Na を取り除いた場合、1.9 eV の直接ギャップ型半導体となることから、太陽電池や発光デバイスへの応用が期待されている。しかしながら、応用に向けての物性評価や特に重要な薄膜化技術は十分確立しているとは言えない。Si クラスレートの薄膜は、薄膜 NaSi を作製し、それを真空下で熱処理することにより得られる。これまで、薄膜 NaSi は Si 基板を高温の Na 蒸気と反応させることにより作製してきた[1]。しかしながら、この手法では、不純物の混入や作製が Si 基板に限られるなどの問題点があった。特に、透明基板（絶縁性基板）上の作製は、物性評価に非常に重要である。本研究では、基板の種類によらない、良質な薄膜 Si クラスレートの作製を目的とし、NaSi の溶融による薄膜 NaSi の作製とその熱処理による薄膜 Si クラスレートの合成を試みた。

Na と NaSi の混合ペレット（モル比 Na:Si = 2:1 又は 3:2）を基板（Si(111)、サファイアなど）上に置き、Ar 雰囲気下での熱処理（典型的には 700°C）により Na および NaSi を溶融させ、薄膜 NaSi を作製した。その後、基板を真空中で熱処理（典型的には 10^{-4} Pa, 380 ~ 450°C, 3 h）し、クラスレート化した。試料の評価は光学顕微鏡観察、X 線回折測定、ラマン散乱測定により行った。

図 1 は、サファイア基板の上に作製した試料の X 線回折測定結果である。II 型 Si クラスレートの回折ピークが観測されており、サファイア基板の上に Si クラスレートの生成が確認された。現在の所、均一な膜の形成には至っていないが、試料作製条件（NaSi 溶融時の温度・時間、ペレットの Na:Si モル比、真空熱処理の温度・時間）を変更し、実験を行っている。今後、均一な薄膜合成のための最適条件を見出し、薄膜 Si クラスレートの詳細な物性測定を目指す。

参考文献

[1] T. Kume, *et al.*, *Thin Solid Films* **609**, 30-34 (2016).

謝 辞 本研究は先端的低炭素化技術開発(JCT-ALCA)プロジェクトの一環として行われました。

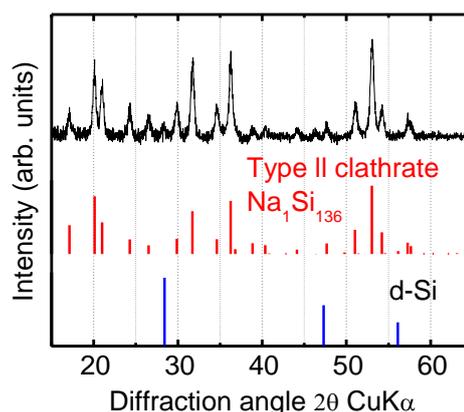


図 1. サファイア基板の上に作製した試料の X 線回折測定結果