

β-FeSi₂ エピタキシャル膜での直接遷移エネルギーと電気特性の相関

Correlation between direct transition energies and electrical properties in β-FeSi₂ epitaxial films

九工大情報工, [○]飯沼元輝, 村社尚紀, 池田修哉, 扇 和也, 寺井慶和

Kyushu Inst. of Tech., [○]M. Iinuma, N. Murakoso, S. Ikeda, K. Ogi, Y. Terai

E-mail: m232005m@mail.kyutech.jp

【はじめに】 これまで我々は、Si 上に作製した β-FeSi₂ エピタキシャル膜において、ヘテロ界面で生じるひずみにより β-FeSi₂ の直接遷移エネルギー(E_g)が減少することを明らかにしてきた[1]。前回、低温成長によりひずみが緩和してしまい、 E_g が β-FeSi₂ 単結晶の値に近づくことを報告したが[2]、それらエピタキシャル膜の構造解析および電気評価が不十分であった。そこで今回は、構造解析および電気評価を詳細に行い、低温成長に伴うひずみ緩和の原因を考察したので報告する。

【実験方法】 FZ-Si(111)基板($\rho > 1-2 \text{ k}\Omega\cdot\text{cm}$)上に、RDE 法により基板温度(T_s)を $T_s = 670 \text{ }^\circ\text{C}$ で 20 nm の β-FeSi₂ テンプレート層を作製した。その後、Fe, Si フラックス比を Si/Fe = 1.56 と固定し、MBE 法により $T_s = 400-670 \text{ }^\circ\text{C}$ で 60 nm の β-FeSi₂ エピタキシャル膜を成長させた。前回作製した試料は Si/Fe = 1.17 と $T_s = 550 \text{ }^\circ\text{C}$ で化学量論組成が達成される Si/Fe 比で成長したが、今回は Si/Fe = 1.56 と意図的に Si 過剰下で成長を行った。成長後、フォトリフレクタンス(PR)により E_g , XRD により構造解析、そして van der Pauw 法により電気特性を評価した。

【結果】 XRD 測定の結果、 $T_s = 400 \text{ }^\circ\text{C}$ の試料では微弱であるが金属相 ε-FeSi の回折ピークが観測された。よって、低温成長試料では微結晶 ε-FeSi が混入していると考えられる。Fig. 1 に室温で測定した電子濃度の成長温度依存性を示す。 $T_s = 400-500 \text{ }^\circ\text{C}$ では、 $5 \times 10^{18} - 8 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ と非常に高い電子濃度を示し、 $T_s = 550-670 \text{ }^\circ\text{C}$ では $4-9 \times 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ と低い値であった。この結果は $T_s = 400-500 \text{ }^\circ\text{C}$ で作製した試料では微結晶 ε-FeSi が存在し、そのため高い電子濃度が観測されたといえる。これら同一試料で PR スペクトルを測定し、Aspnes の式から求めた E_g を Fig. 2 に示す。前回の報告と一致し、今回 Si 過剰下で成長した試料においても、 T_s の減少に伴い E_g が増加し単結晶の E_g に近づいた。以上のように、電子濃度すなわち微結晶 ε-FeSi の存在と、 E_g の成長温度依存性に相関があることが明らかとなった。

Si 基板から β-FeSi₂ への熱拡散による Si 供給量は、成長温度の低下とともに減少し、低温成長試料では膜内の Si 空孔が増加する。この Si 空孔量の増加により原子配列の乱れが促進され、その結果ひずみが緩和され E_g が増加すると解釈してきた。しかし、今回は Si 空孔が形成されにくい Si 過剰下で作製したにも関わらず、 T_s の減少に伴い E_g は増加した。この結果は、ε-FeSi の混在によっても β-FeSi₂ へのひずみが緩和することを示唆しており、β-FeSi₂ 中のひずみ緩和は複合的に生じていると考えられる。

[1] Y. Terai, *et al.* Thin Solid Films **519**, 8468 (2011).

[2] 塚本他, 第 63 回応用物理学会春季学術講演会, 20p-P13-8.

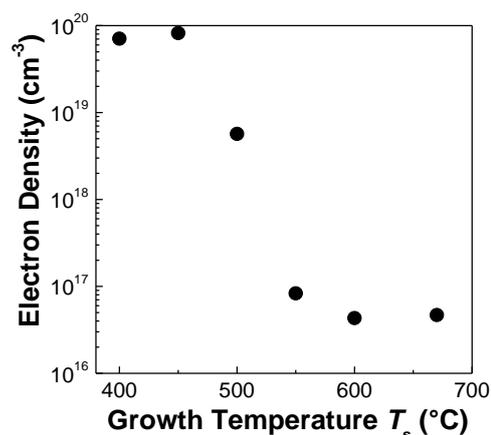


Fig. 1 Electron density as a function of T_s .

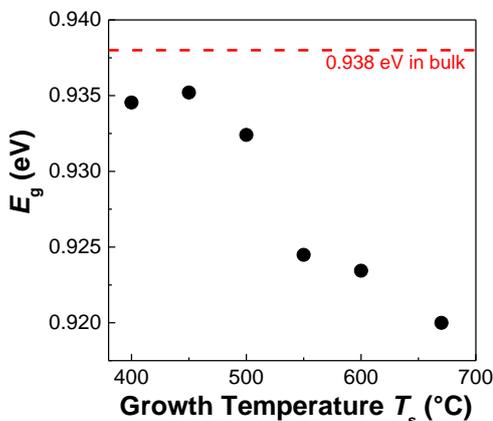


Fig. 2 E_g as a function of T_s .