

硬 X 線光電子分光法による a-Si/BaSi₂ のバンドアライメント測定 Measurement of band alignment at a-Si/BaSi₂ interfaces using hard x-ray photoelectron spectroscopy

○高部涼太¹, 武内大樹¹, Du Weijie¹, 伊藤啓太^{1,2,3}, 都甲薫¹, 上田茂典⁴, 木村昭夫⁵, 末益崇¹
(¹筑波大, ²日本学術振興会, ³東北大, ⁴NIMS, ⁵広島大)

○Ryota Takabe¹, Hiroki Takeuchi¹, Weijie Du¹, Keita Ito^{1,2,3}, Kaoru Toko¹, Shigenori Ueda⁴,
Akio Kimura⁵, and Takashi Suemasu¹

¹Univ. Tsukuba, ²JSPS, ³Tohoku Univ., ⁴NIMS, ⁵Hiroshima Univ.

E-mail: bk200911087@s.bk.tsukuba.ac.jp

【背景・目的】

我々は薄膜太陽電池の新材料として BaSi₂ に注目している。BaSi₂ は光吸収係数 ($\alpha = 3 \times 10^4 \text{ cm}^{-1}$ @1.5 eV) と少数キャリア拡散長 ($L_h \sim 10 \text{ }\mu\text{m}$) がどちらも大きいユニークな材料であり^{1,2)}、禁制帯幅 ($E_g = 1.3 \text{ eV}$) も太陽電池に適している³⁾。アンドープ n-BaSi₂ 表面に自然酸化膜を形成することで、少数キャリア寿命が再現性良く、約 10 μs に達することが分かっている³⁾。また、自然酸化膜/BaSi₂ を用いた太陽電池構造において、太陽電池動作を実証した⁴⁾。しかし、自然酸化膜の厚さを制御して形成することは難しいため、デバイス特性向上のためには、それに代わる安定した不活性化膜が必要である。本研究では、自然酸化膜と同様に少数キャリア寿命が向上する a-Si 膜に着目し、硬 X 線光電子分光法 (HAXPES) を用いて a-Si/BaSi₂ 界面の価電子帯 (VB) バンド不連続を測定した。

【実験】

n-Si(111) 基板上に厚さ 730 nm の n-BaSi₂ 膜をエピタキシャル成長した後、*in situ* で 5 nm の a-Si を堆積した。また、比較のために BaSi₂ 表面に a-Si キャップをせず、自然酸化膜を形成した試料も用意した⁵⁾。バンドアライメント測定のために、HAXPES 測定を SPring-8 の BL15XU で行った。硬 X 線 (5953 eV) を試料表面に浅い角度で入射し、光電子の take-off-angle (TOA) を 15, 30, 90° に変えることで深さ方向分析を行った。エネルギー分解能は 155 meV であり、 E_F を蒸着 Au 膜で校正した。

【結果・考察】

Fig. 1 に Ba 3d_{3/2} の HAXPES 内殻スペクトルを示す。Fig. 1 (a) では、バルク敏感な TOA = 90° から、表面敏感な TOA = 15° になるに従って BaSi₂ のピーク強度が減少しているが、Ba 酸化物由来のピークは確認されなかった。更に、ピーク位置が変化していないため、a-Si/BaSi₂ 界面付近の BaSi₂ ではバンドベンディングは殆ど無いといえる。一方、Fig. 2 (b) では、BaSi₂ および Ba 酸化物由来の 2 つのピークが観察され、表面敏感な測定になるに従い Ba 酸化物由来のピークが支配的になった⁵⁾。この場合も、バンドベンディングは殆ど無かった。以上より、a-Si 層で BaSi₂ の酸化が抑えられたといえる。また、VB 付近の HAXPES

スペクトルを測定し、スペクトルの立ち上がりから VB 上端の位置を求めたところ、BaSi₂ は E_F から 1.06 eV に、a-Si は 0.96 eV の位置にあった。よって、a-Si/BaSi₂ のバンドアライメントは Fig. 2 (a) のようになり、n-BaSi₂ のホールに対する a-Si の障壁高さは -0.1 eV であることが分かった。一方、自然酸化膜の場合は 3.9 eV であり、a-Si キャップ層は少数キャリア輸送を阻害しないといえる。以上より、a-Si 膜は不活性化膜としてだけでなく、良好な電気接触を形成するホール輸送層として機能することが明らかになった。

【謝辞】 文部科学省委託事業ナノテクノロジープラットフォーム課題 (2015A4907, 2015B4906) として物質・材料研究機構微細構造解析プラットフォームの支援を受けて実施された。本研究の一部は、JST-CREST の支援を受けた。

- 1) K. Toh *et al.*, Jpn. J. Appl. Phys. **50** (2011) 068001.
- 2) M. Baba *et al.*, J. Cryst. Growth **348** (2012) 75.
- 3) R. Takabe *et al.*, J. Appl. Phys. **115** (2014) 193510.
- 4) W. Du *et al.*, Appl. Phys. Lett. **106** (2015) 122104.
- 5) R. Takabe *et al.*, J. Appl. Phys. in press.

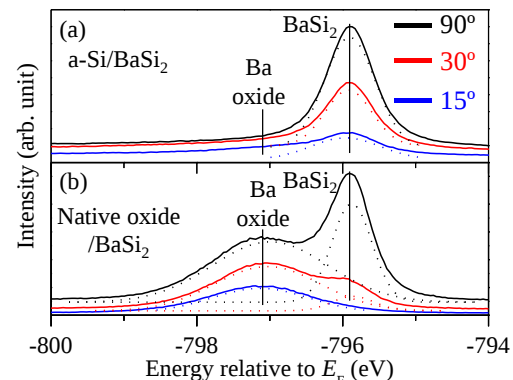


Fig. 1 Ba 3d_{3/2} core-level spectra for (a) a-Si/BaSi₂ and (b) native oxide/BaSi₂ taken at take-off angles of 90, 30, and 15°.

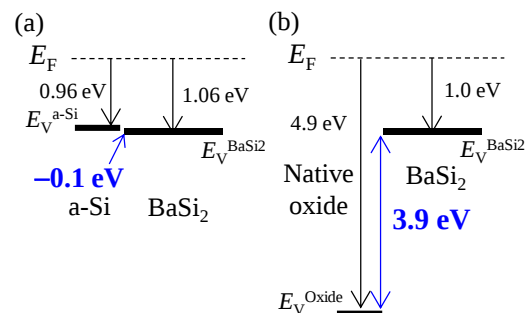


Fig. 2 Band alignments at (a) a-Si/BaSi₂ and (b) native oxide/BaSi₂.