Ba/Si フラックス比が undoped $BaSi_2$ 膜の電気特性に与える効果

Effect of Ba/Si flux ratio on the electrical property of undoped $BaSi_2$ films

筑波大学 °高部 涼太, T. Deng, 小玉 小桃, 山下 雄大, 都甲 薫, 末益 崇
Univ. Tsukuba, °Ryota Takabe, Tianguo Deng, Komomo Kodama, Yudai Yamashita, Kaoru Toko, and Takashi Suemasu
E-mail: bk200911087@s.bk.tsukuba.ac.jp

【背景・目的】

新規薄膜太陽電池材料として $BaSi_2$ に注目している。$BaSi_2$ は光吸収係数(3×10^4 cm^{-1} @1.5 eV)と少数キャリア拡散長(10 μm)が両方とも大きい材料であり、禁制帯幅(1.3 eV)も太陽電池に適している [1]。$BaSi_2$ の分子線エピタキシー(MBE)成長では、Ba の大きな蒸気圧を考慮し、Ba/Si フラックス比 R_{Ba}/R_{Si} の大きな条件で成長している。前回の発表で、R_{Ba}/R_{Si} が $BaSi_2$ の分光感度特性に大きな影響を与え、R_{Ba}/R_{Si} = 2.2 のときに幅広い波長範囲で 80%を超える内部量子効率(*IQE*)が得られることを報告した [2]。本研究では、R_{Ba}/R_{Si} が undoped $BaSi_2$ の電気特性に与える影響を評価することで、R_{Ba}/R_{Si} = 2.2 のときに分光感度特性が向上した理由を解明することを目的とした。

【実験】

加熱した Si 基板上に Ba と Si を同時供給して反応させる MBE 法により、$BaSi_2$ エピタキシャル膜を 500 nm 堆積した。このとき、Si 堆積レート R_{Si}=0.9 nm/min に固定し、Ba 堆積レート R_{Ba} を 0.9–3.6 nm/min に変えることで、R_{Ba}/R_{Si} を 1.0–4.0 の範囲で変えた。試料の Hall 測定は、Van der Pauw 法により、0.8 T の磁場印加で行った。その際、各 R_{Ba}/R_{Si} で高抵抗 p-Si(111) (ρ = 1000 – 10000 Ω·cm)上に $BaSi_2$ 膜を堆積し、オーミック電極をスパッタで形成して評価した。 一方、$BaSi_2$ のキャリア密度が低いときは、$BaSi_2$/Si 界面で電荷蓄積が起こるため、キャリア密度を正しく測定することは難しい。そこで、先行研究と同様に 500 nm の undoped $BaSi_2$/p-Si (ρ = 0.1 Ω·cm)ヘテロ接合を作製して容量-電圧(C–V)特性で測定した [3]。

【結果・考察】

Figure 1 に、Hall 測定でキャリア密度が極端に小さかった R_{Ba}/R_{Si} = 2.2 の undoped $BaSi_2$/p-Si ヘテロ接合ダイオードの $1/C^2$–V プロットを示す。直線近似の傾きからイオン化不純物密度を求めることができ、1×10^{15} cm^{-3} と計算した。この値は、先行研究の undoped $BaSi_2$ の電子密度($n = 2\times10^{16}$ cm^{-3})より小さな値である [3]。また、内蔵電位は約 0.7 V であった。R_{Ba}/R_{Si} = 3.0 で作製した電子密度 2×10^{16} cm^{-3} の $BaSi_2$/p-Si ヘテロ接合の内蔵電位は約 1.5 V であるので、R_{Ba}/R_{Si} = 2.2 の試料では半分以下になった。ここで、p ~ 10^{15} cm^{-3} の $BaSi_2$ と p ~ 10^{17} cm^{-3} の Si のフェルミ準位差を求めると、約 0.8 eV と計算され、$1/C^2$–V プロットで求めた内蔵電位と一致する。よって、この試料は p 型といえ、不純物が全てイオン化していると仮定すると、ホール密度は $p = 1\times10^{15}$ cm^{-3} となる。

Figure 2 にキャリア密度と R_{Ba}/R_{Si} の関係に示す。R_{Ba}/R_{Si} = 2.2 でキャリア密度が最少になった。よって、R_{Ba}/R_{Si} を最適な 2.2 に調整することによって多数キャリア密度が減少し、少数キャリア拡散長が大きくなったために *IQE* が大きくなったと考えられる。M. Kumar らの $BaSi_2$ 中の点欠陥生成エネルギーに関する研究によると、$BaSi_2$ 中には V_{Si}, Ba_{Si}, および Si_i の点欠陥が生成しやすいとされている。よって、R_{Ba}/R_{Si} が最適値からずれた $BaSi_2$ ではこれらの点欠陥が生成され、それらがドナー不純物として働いたために多数キャリアが電子となっていたが、R_{Ba}/R_{Si} = 2.2 のときにストイキオメトリに近い $BaSi_2$ が成長し、その残留ホール密度が 10^{15} cm^{-3} であったために伝導型が n 型から p 型に変化したと考えられる。

1) T. Suemasu and N. Usami, J. Phys. D: Appl. Phys. **50** (2017) 023001.
2) R. Takabe *et al.*, The 64th JSAP Spring Meeting, 16p-B5-1 (2016).
3) H. Takeuchi *et al.*, Jpn. J. Appl. Phys. **54** (2015) 07JE01.
4) M. Kumar *et al.*, The 63rd JSAP Spring Meeting, 21a-S223-2 (2016).

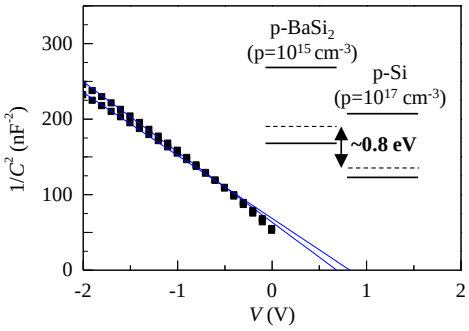

Fig. 1 $1/C^2$–V plot of $BaSi_2$/p-Si heterojunction diode with R_{Ba}/R_{Si} = 2.2. The inset shows the band alignment between p-$BaSi_2$(p ~ 10^{15} cm^{-3}) and p-Si (p ~ 10^{17} cm^{-3})

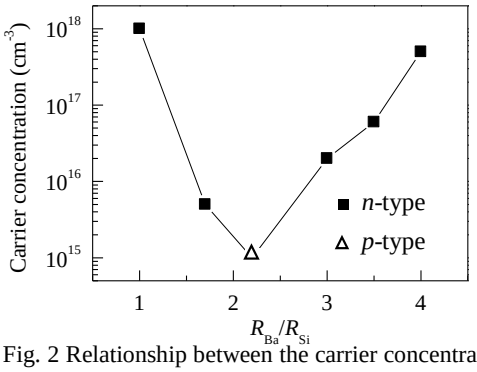

Fig. 2 Relationship between the carrier concentration and R_{Ba}/R_{Si}.