# Ba/Si フラックス比を変えて作製した Si (111) 基板上 undoped n-BaSi<sub>2</sub> エピタキシャル膜の評価

Characterization of undoped n-BaSi<sub>2</sub> epitaxial films on Si(111) with varying Ba/Si flux ratios

## 筑波大学 〇高部 涼太, 谷内 卓, 都甲 薫, 末益 崇

## Univ. Tsukuba, °Ryota Takabe, Suguru Yachi, 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 BaSi2 に注目し ている。BaSi2は光吸収係数(3×10<sup>4</sup> cm<sup>-1</sup> @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<sup>1)</sup>。BaSi<sub>2</sub>の分子線エピタキシー(MBE)成長 では、Si 基板からの Ba と Si の脱離の違いを考慮 し、Ba/Si フラックス比 R<sub>Ba</sub>/R<sub>Si</sub>の大きな条件で成 長している<sup>2)</sup>。この $R_{Ba}/R_{Si}$ は $BaSi_2$ の諸特性に大 きな影響を与えることが予想される。類似した成 長条件を用いている GaAs の MBE 成長では、 As/Ga 比を増やすことで電子トラップ密度が上 昇することが知られている<sup>3)</sup>。これは、As/Ga比 の増加により Ga 空孔や格子間 As が生成された ためであると考えられている。本研究では、 R<sub>Ba</sub>/R<sub>Si</sub>の異なる条件で Si(111)基板上に BaSi<sub>2</sub> を MBE 成長し、*R*<sub>Ba</sub>/*R*<sub>Si</sub>が undoped n-BaSi<sub>2</sub>の諸特性 に与える影響を評価することを目的とした。

#### 【実験】

本研究では MBE 装置を用いて BaSi2 のエピタ キシャル膜作製を行った。まず、500°Cに加熱し た n-Si(111)基板(ρ < 0.01 Ω·cm)上に Ba を堆積し て反応させる反応性エピタキシー法により、厚さ 3 nm 程度の BaSi2のテンプレート層を作製した。 次に、BaとSiを同時蒸着して反応させる MBE 法により、基板温度 580 ℃ で undoped n-BaSi2 エ ピタキシャル膜を 500-600 nm 堆積した。このと き、Si 堆積レート R<sub>Si</sub> = 0.9 nm/min に固定し、Ba 堆積レート R<sub>Ba</sub>を 2.0 – 4.5 nm/min に変えること で、R<sub>Ba</sub>/R<sub>Si</sub>を2.2-5.1の範囲で変更した。その後、 BaSi2のパッシベーション膜である a-Si を in situ で3 nm 堆積した<sup>4)</sup>。それぞれの試料表面に直径 1 mm、厚さ 80 nm の ITO 電極、裏面に 150 nm の Al 電極をスパッタ堆積した。実際に堆積した膜 の Ba と Si の原子比 NBa/NSi を測定するためにラ ザフォード後方散乱分析法(RBS)を用いた。また、 各試料の分光感度および反射率スペクトルを測 定し、内部量子効率(IQE)の算出を行った。

### 【結果・考察】

Figure 1 に RBS 測定によって求めた  $R_{Ba}/R_{Si} = 2.2$ および 4.0 の試料の  $N_{Ba}/N_{Si}$ 深さ方向分布を示す。 $R_{Ba}/R_{Si} = 4.0$ の試料では  $N_{Ba}/N_{Si}$ が 0.5 程度となり、ほぼストイキオメトリな BaSi<sub>2</sub>が作製できていることが分かる。一方、 $R_{Ba}/R_{Si} = 2.2$ の試料では  $N_{Ba}/N_{Si}$ が 0.5 を下回り、Si-rich の BaSi<sub>2</sub>が成

長していた。また、いずれの試料も、基板側から 試料表面へ向かうにつれて、 $N_{Ba}/N_{Si}$ が増加してい た。これは、 $BaSi_2$ の MBE 成長中に Si 基板から Si 原子が供給されているためであると予想して いる。

Figure 2 に各試料の *IQE* スペクトルを示す。 *R*<sub>Ba</sub>/*R*<sub>Si</sub> が下がるに従って *IQE* が向上した。M. Kumar らの理論計算によると、BaSi<sub>2</sub>中に Si 空孔 や Ba アンチサイト等の点欠陥が生成しやすいと している<sup>5)</sup>。そのため、Si-rich の成長条件にした ことで、これらの点欠陥密度が減少したことが考 えられる。また、いずれの *IQE* スペクトルも短波 長側、すなわち表面側で生成した電子・正孔対が 寄与する波長領域で減少した。これは、前述の通 り、表面側で  $N_{Ba}/N_{Si}$ が増加していることに起因 していると考えている。

1) T. Suemasu and N. Usami, J. Phys. D: Appl. Phys. 50 (2017) 023001.

2) R. Takabe et al., Jpn. J. Appl. Phys. 53 (2014) 04ER04.

3) P. K. Bhattacharya et al., Appl. Phys. Lett. 36 (1980) 304.

4) R. Takabe et al., J. Appl. Phys. 119 (2016) 165304.

5) M. Kumar *et al.*, The 63rd JSAP Spring Meeting, 21a-S223-2 (2016).



Fig. 1  $N_{\text{Ba}}/N_{\text{Si}}$  depth profiles of the samples with different  $R_{\text{Ba}}/R_{\text{Si}}$  of 2.2 and 4.0 measured by RBS.



Fig. 2 *IQE* spectra of the samples with different  $R_{\text{Ba}}/R_{\text{Si}}$  of 2.2, 3.1, 4.0, and 5.1.