Ba/Si フラックス比を変えて作製した Si (111) 基板上 undoped n-BaSi₂ エピタキシャル膜の評価

Characterization of undoped n-BaSi₂ epitaxial films on Si(111) with varying Ba/Si flux ratios

筑波大学 ○髙部 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(3×10⁴ 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 $^{1)}$ 。BaSi₂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_{Ba}/R_{Si} の大きな条件で成 長している 2 。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³⁾。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、 $R_{\text{Ba}}/R_{\text{Si}}$ の異なる条件で Si(111)基板上に BaSi₂ を MBE 成長し、R_{Ba}/R_{Si}が undoped n-BaSi₂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℃に加熱し た n-Si(111)基板($\rho < 0.01~\Omega$ ·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°C 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_{Si} = 0.9 nm/min に固定し、Ba 堆積レート R_{Ba}を 2.0 - 4.5 nm/min に変えること で、 $R_{\text{Ba}}/R_{\text{Si}}$ 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 4)。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 N_{Ba}/N_{Si} 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 $R_{\rm Ba}/R_{\rm Si}=2.2$ および 4.0 の試料の $N_{\rm Ba}/N_{\rm Si}$ 深さ方向分布を示す。 $R_{\rm Ba}/R_{\rm Si}=4.0$ の試料では $N_{\rm Ba}/N_{\rm Si}$ が 0.5 程度となり、ほぼストイキオメトリな ${\rm BaSi}_2$ が作製できていることが分かる。一方、 $R_{\rm Ba}/R_{\rm Si}=2.2$ の試料では $N_{\rm Ba}/N_{\rm Si}$ が 0.5を下回り、 ${\rm Si-rich}$ の ${\rm BaSi}_2$ 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_{Ba}/R_{Si} 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、 $BaSi_2$ 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 5 。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。

- 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).

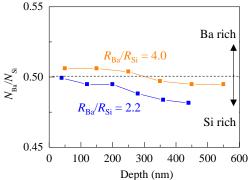


Fig. 1 $N_{\text{Ba}}/N_{\text{Si}}$ depth profiles of the samples with different $R_{\text{Ba}}/R_{\text{Si}}$ of 2.2 and 4.0 measured by RBS.

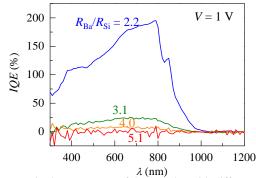


Fig. 2 *IQE* spectra of the samples with different $R_{\text{Ba}}/R_{\text{Si}}$ of 2.2, 3.1, 4.0, and 5.1.