共スパッタリング法により形成したMgSiSn薄膜の電気特性

Electrical properties of MgSiSn thin films formed by co-sputtering

明大理工 [1] ○布施　翔太郎 [1], 和田　英之 [1], 勝俣　裕 [1]

Meiji Univ.[1], ○Syotaro Fuse[1], Hideyuki Wada [1], Hiroshi Katsumata [1]

E-mail: ce181055@meiji.ac.jp, katumata@meiji.ac.jp

【はじめに】

Mg_2Siは約0.6～0.8 eVの禁制帯幅を示す間接遷移型半導体である。また，Mg_2Siの無次元性能指数（ZT）は900 K付近で0.8~1.0と高く，熱電変換素子への応用が期待されている。しかし，Mg_2Siは熱伝導が高いために，質量差の大きい元素を添加するによって熱伝導率の低減が図られている[1]。$Mg_2Si_{1-x}Sn_x$の相図では0.4≦x≦0.6でMg_2SiとMg_2Snの複相が得られ三元固溶体が得られにくい。実際に，我々は融液からの結晶成長では，SiとSnの大きな質量差からMg_2SiとMg_2Snが相分離することを確認している。本研究では，共スパッタリング法によりMgSiSn系三元固溶体薄膜の形成を試み，構造的特性と電気的特性を評価した。また，第一原理計算によりMgSiSnの電子状態密度（DOS）を計算し，電気伝導特性について検討した。

【実験方法】

Mg_2Si ターゲット(3N，φ4inch)上に Sn チップ(3N，10×10×t1 mm)の枚数を変えて置き，Mg_2Si ターゲットに対しての Sn チップの面積比（Sn/Mg_2Si）を変化させ，共スパッタリング法により c 面サファイ基板，(100) CaF_2 基板，labo-USQ 石英ガラス基板上に MgSiSn 薄膜を推積した。その後，Ar/H_2 (200 sccm)雰囲気中で 200℃，30min ＋400 ℃，30min の二段階熱処理をすることで，Mg_2SiSn 系三元固溶体薄膜の形成を試みた。

【結果と考察】

XRD 測定結果から Sn/Mg_2Si =0.01-0.05 では Mg_2SiSn 三元固溶体の形成が確認されたが，Sn/Mg_2Si =0.075-0.1 では Mg_2SiSn の他に Mg_9Sn_5 と Sn が観測された。図 1 にホール効果測定の Sn/Mg_2Si 依存性を示す。すべての試料で p 型電気伝導を示し，Sn/Mg_2Si の増大と共に正孔密度が増加した。EDS 結果より，Sn/Mg_2Si の増大と共に Mg 組成が減少することを確認している。図 2 に Mg 空孔を考慮に入れた時の第一原理計算（Phase/0,（株）アスムス）による DOS プロファイルを示す。$Mg_{54}Si_{27}$ の結晶構造において，Mg の数を 5 個減らした $Mg_{49}Si_{27}$ は p 型を示した。Mg 空孔の増大により伝導型が p 型化することが示唆された。

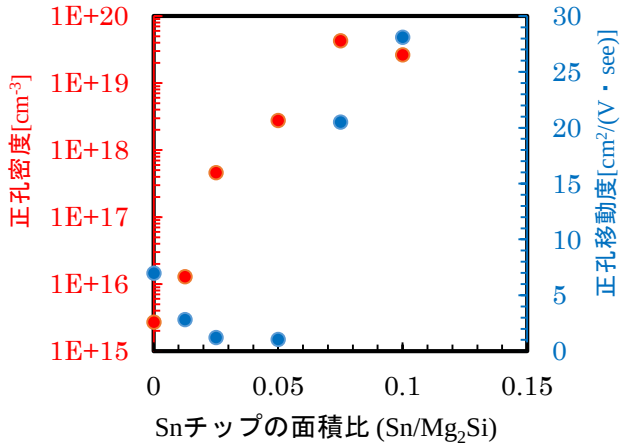

図 1　ホール効果測定の結果

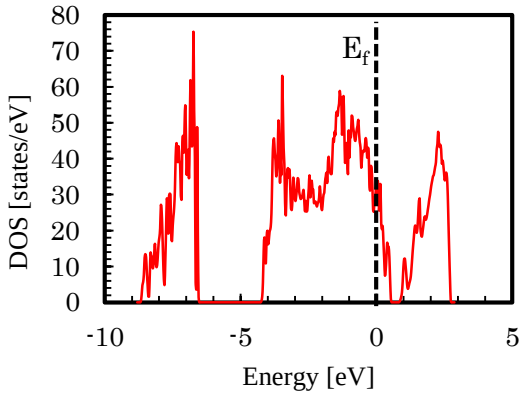

図 2　$Mg_{49}Si_{27}$ の DOS プロファイル

[1] Wei Liu et al., Phys. Rev. Lett.**108**, 166601 (2012).

© 2018年 応用物理学会