

BaSi<sub>2</sub> 融液から発生する蒸気組成の理論解析Theoretical analysis of vapor composition generated from BaSi<sub>2</sub> melt山梨大<sup>1</sup> °原 康祐<sup>1</sup>, 山中 淳二<sup>1</sup>, 有元 圭介<sup>1</sup>Univ. of Yamanashi<sup>1</sup>, °K. O. Hara<sup>1</sup>, J. Yamanaka<sup>1</sup>, K. Arimoto<sup>1</sup>

E-mail: khara@yamanashi.ac.jp

【はじめに】BaSi<sub>2</sub>は、太陽電池の光吸収層に適した特性を有する半導体であり、簡便かつ高速な真空蒸着法により成膜可能である。BaSi<sub>2</sub>の蒸着における蒸気組成は原料組成とは異なるため、Si基板上に堆積しSiと平衡させることで均一組成のBaSi<sub>2</sub>薄膜を形成可能である。ここで、蒸気組成の原料との相違や時間変化は実験的に明らかとなっているが [1]、熱力学による理論的立証はなされていなかった。そこで、本研究では BaSi<sub>2</sub> 融液の熱力学による理論解析に基づき、蒸気組成の時間変化を推測することを目的とした。

【方法】Esin らが報告した 1723 K における Ba-Si 融液中の Ba と Si の部分モル生成エンタルピー [2] から、正則溶体を仮定して Ba と Si の活量係数を算出した。活量係数から活量と平衡蒸気圧を算出した。そして、蒸気圧から Ba-Si 融液から発生する Ba と Si の蒸気フラックスを求めた。Ge 基板上に室温で BaSi<sub>2</sub> 蒸着を行い、蒸気フラックスの計算値と比較を行った。

【結果と考察】Figure 1 に蒸気フラックスの計算値を示す。計算を行った組成範囲において、融液中の Ba 組成が上昇すると Ba 蒸気フラックスが増加し Si 蒸気フラックスが減少する傾向が分かる。BaSi<sub>2</sub>は調和溶解するため、融解直後の融液組成は Ba モル分率 0.33 である。このとき、Ba 蒸気フラックスは Si よりも桁違いに大きく、Ba が優先的に蒸発することが分かる。この結果、融液中の Ba は減少し、Ba 蒸気フラックスが減少するとともに Si 蒸気フラックスは増加する。Ba モル分率が 0.2 より小さくなると Si 蒸気フラックスが Ba より大きくなるため、Si の割合が多い蒸気となる。Figure 2 に室温で BaSi<sub>2</sub> 蒸着した薄膜の組成プロファイルを示す。この図より、堆積組成は Ba 主体から Si 主体へと

変化することが確認できる。これは熱力学計算による予測と一致しており、蒸気組成変化が理論的に裏付けられた。

【参考文献】 [1] K. O. Hara, et al., J. Mater. Res. **33**, 2297, (2018). [2] Y. O. Esin, et al., Zh. Prikl. Khim. **46**, 2402, (1973).

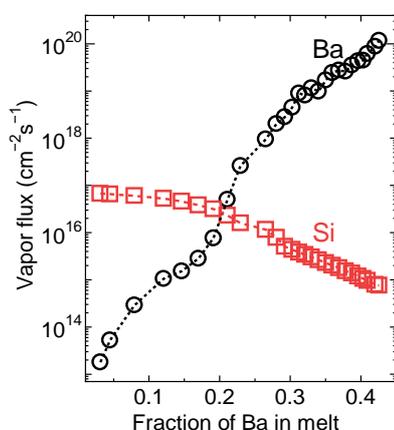


Figure 1 Calculated vapor fluxes of Ba and Si at 1723 K.

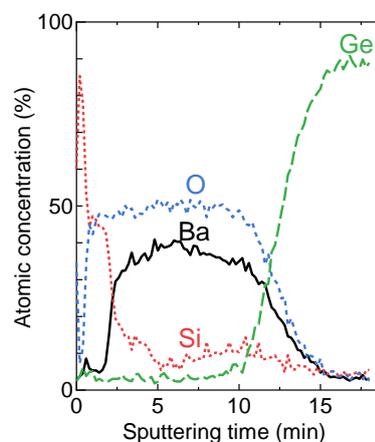


Figure 2 AES composition depth profiles Ba-Si films deposited on Ge substrate at room temperature.