

# ALD 法で作製した $\text{TiO}_x/\text{SiO}_x/\text{結晶 Si}$ ヘテロ界面の パッシベーション効果発現メカニズム ～水素原子脱離の影響～

Activation mechanism of passivation effect at the ALD- $\text{TiO}_x/\text{SiO}_x/\text{c-Si}$  heterointerface  
~The impact of effusion of hydrogen atoms~

名大院工<sup>1</sup>, 東北大金研<sup>2</sup>, 望月 健矢<sup>1</sup>, 〇後藤 和泰<sup>1</sup>, 北條 智彦<sup>2</sup>,  
黒川 康良<sup>1</sup>, 秋山 英二<sup>2</sup>, 宇佐美 徳隆<sup>1</sup>

Graduate School of Eng. Nagoya Univ.<sup>1</sup>, IMR Tohoku Univ.<sup>2</sup>

T. Mochizuki<sup>1</sup>, 〇K. Gotoh<sup>1</sup>, T. Hojo<sup>2</sup>, Y. Kurokawa<sup>1</sup>, E. Akiyama<sup>2</sup>, N. Usami<sup>1</sup>

E-mail: gotoh.kazuhiro@material.nagoya-u.ac.jp

【導入】我々は、結晶シリコン (c-Si) 上に原子層堆積(ALD)法によって製膜した水素を含む酸化チタン( $\text{TiO}_x$ )薄膜のパッシベーション効果発現機構について調査してきた。ポストアニールによるパッシベーション効果の大幅な上昇は、 $\text{TiO}_x/\text{c-Si}$  界面における水素脱離と Si-O 結合の形成、さらに、 $\text{TiO}_x$  から  $\text{SiO}_x$  中間層側への Ti、O 原子の拡散に起因することを報告した<sup>[1,2]</sup>。一般的に、H 原子はパッシベーション効果に大きく寄与することが知られているが、 $\text{TiO}_x/\text{SiO}_x/\text{c-Si}$  構造における H 原子の機能は明らかになっていない。本研究では、 $\text{SiO}_x$  中間層を  $\text{TiO}_x/\text{c-Si}$  界面に導入することで飛躍的に向上したパッシベーション効果における H 原子の機能を調査した。

【実験方法】 FZ-n 型 Si 基板を使用し、ALD 法を用いて  $\text{TiO}_x/\text{SiO}_x/\text{c-Si}$  と  $\text{TiO}_x/\text{c-Si}$  の 2 種類の構造を作製した。 $\text{SiO}_x$  中間層は、室温の硝酸に 10 分間浸すことで形成した。 $\text{TiO}_x$  と  $\text{SiO}_x$  の合計の膜厚を 4 nm とし、両面に製膜した。パッシベーション効果発現のため、製膜後に 350 °C で 3 分のフォーミングガスアニリング(FGA)を行った。また、実効キャリアライフタイム( $\tau_{\text{eff}}$ )を疑似定常状態光伝導度法により測定した。さらに、FGA 前の試料に関して昇温脱離装置(TDS)を用いて、試料からの水素分子の脱離を分析し、Si と H 原子の結合エネルギー( $E_{\text{Si-H}}$ )を算出した。

【結果と考察】 FGA 後の  $\text{TiO}_x/\text{SiO}_x/\text{c-Si}$  と  $\text{TiO}_x/\text{c-Si}$  構造の少数キャリア注入量  $1 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$  における  $\tau_{\text{eff}}$  を表 1 に示す。 $\text{SiO}_x$  中間層を導入することで、大幅に  $\tau_{\text{eff}}$  が向上している。図 1 は、FGA 前の試料の TDS から得られた昇温温度と水素分圧の関係を示す。低温側、高温側のピークはそれぞれ  $\alpha 1$  と  $\alpha 2$  と呼ばれ、 $\text{SiH}_2$ 、 $\text{SiH}$  結合由来の脱離である。 $\alpha 2$  ピークに注目すると、昇温速度の増加に伴い、ピーク位置が高温側にシフトしている。得られたスペクトルから算出した  $E_{\text{Si-H}}$  を表 1 に示す。より高いパッシベーション性能を示す  $\text{TiO}_x/\text{SiO}_x/\text{c-Si}$  構造の  $E_{\text{Si-H}}$  は、 $\text{TiO}_x/\text{c-Si}$  構造の値より小さく、FGA 前の  $\text{SiH}$  結合中の H 原子は  $\text{TiO}_x/\text{SiO}_x/\text{c-Si}$  構造の方が脱離し易いことが明らかになった。よって、 $\text{TiO}_x/\text{SiO}_x/\text{c-Si}$  構造においては、FGA 中に H 原子が容易に脱離し、ダングリングボンドが形成されると考えられる。その結果、 $\text{TiO}_x$  から  $\text{SiO}_x$  側への Ti、O 原子の拡散に起因する Si-O(Ti)結合の形成が促進されたことで高いパッシベーション効果が発現すると唆される。

【謝辞】本研究は東北大金研共同研究 18K0093、MEXT 科研費 JP18H05514、NEDO の支援の下行われた。

Table. 1. Influence of the  $\text{SiO}_x$  interlayer on  $\tau_{\text{eff}}$  and  $E_{\text{Si-H}}$ .

	$\tau_{\text{eff}}$ after FGA [ $\mu\text{s}$ ]	$E_{\text{Si-H}}$ [eV]
$\text{TiO}_x/\text{c-Si}$	766	2.05
$\text{TiO}_x/\text{SiO}_x/\text{c-Si}$	1416	1.01

## 【参考文献】

- [1] T. Mochizuki *et al.*, *Appl. Phys. Express* **11**, 102301 (2018).  
[2] T. Mochizuki *et al.*, *Adv. Mater. Interfaces* **5**, 1801645 (2018).

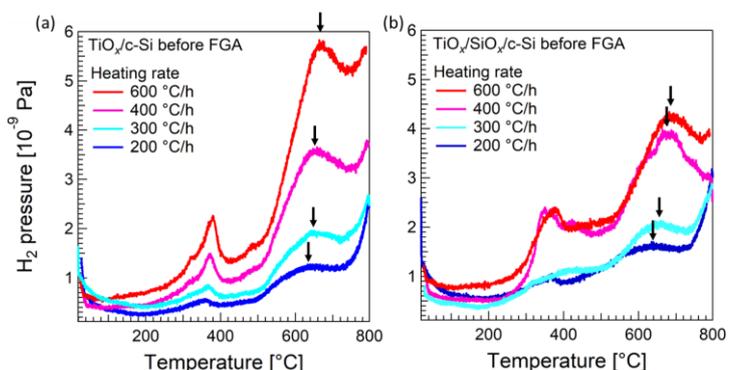


Fig. 1. TDS spectra of (a)  $\text{TiO}_x/\text{SiO}_x/\text{c-Si}$  and (b)  $\text{TiO}_x/\text{c-Si}$  structure before FGA