# 三段階成長法による BaSi<sub>2</sub> 光吸収層の高品位エピタキシャル成長 Molecular beam epitaxy of high-quality BaSi<sub>2</sub> light absorbers using three-step growth method

筑波大<sup>1</sup>, <sup>0</sup>山下 雄大<sup>1</sup>, 佐藤 拓磨<sup>1</sup>, 都甲 薫<sup>1</sup>, 末益 祟<sup>1</sup>

### Univ. Tsukuba<sup>1</sup>, °Yudai Yamashita<sup>1</sup>, Takuma Sato<sup>1</sup>, Kaoru Toko<sup>1</sup>, Takashi Suemasu<sup>1</sup>

#### E-mail: bk201311068@s.bk.tsukuba.ac.jp

# 【背景・目的】

新規薄膜太陽電池材料として BaSi<sub>2</sub> に注目している。BaSi<sub>2</sub> は地殻中に豊富に存在する元素で構成される半導体 でありながら、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)がどちらも大きいユニークな材料であ り、禁制帯幅(1.3 eV)も太陽電池に適している<sup>1)</sup>。現在、25%を超える変換効率が実現可能<sup>2)</sup>な BaSi<sub>2</sub>-pn ホモ接合太 陽電池の作製を目指しており、undoped BaSi<sub>2</sub> は上記構造の光吸収層として期待されている。先行研究において過 渡容量分光法(DLTS)と陽電子消滅法(PAS)による欠陥評価を行い、Si 空孔(V<sub>Si</sub>)が BaSi<sub>2</sub> 中で正孔トラップとして働 き、表面付近に多く存在することが明らかとなった<sup>3,4)</sup>。さらに、検出した V<sub>Si</sub>を低減させる目的で成長時の基板温度高 温化を検討し、分光感度の増加に成功した<sup>5)</sup>。本研究では、Si-rich 条件下での Si 原子拡散メカニズムを明らかにし、 Si 拡散を利用した新たな成膜方法を検討した。

# 【実験】

本研究では、従来の二段階成長を拡張した三段階成長を検 討した。Fig. 1 に作製方法の概略図を示す。まず、加熱した Czn-Si(111) 基板 ( $\rho < 0.01 \Omega$ ·cm) 上に Ba のみを堆積し反応させる RDE 法で BaSi<sub>2</sub> テンプレート層を作製した。次に、Ba と Si を同 時供給する MBE 法で、Ba-rich BaSi<sub>2</sub>( $R_{Ba}/R_{Si}$ = 4.0)を 100 nm エ ピタキシャル成長した。最後に MBE 法で Si-rich BaSi<sub>2</sub>( $R_{Ba}/R_{Si}$ = 1.2)を 400 nm 製膜した。3 層目から吐き出された過剰 Si が 2 層 目の Si 空孔を埋めることで全体が Si-rich となる。表面には *insitu* で BaSi<sub>2</sub> のパッシベーション膜である 3 nm の a-Si を堆積し た。さらに、スパッタ法を用いて表面に直径 1 mm、厚さ 80 nm の ITO 電極、裏面に Al 電極を作製した。本研究では上記手法で 作製した試料を、二段階成長で製膜した Ba-rich BaSi<sub>2</sub>( $R_{Ba}/R_{Si}$ = 4)、Si-rich BaSi<sub>2</sub>( $R_{Ba}/R_{Si}$ = 1.2)と比較した。結晶性評価には RHEED と  $\theta$ -2 $\theta$  XRD を用い、分光感度特性は直径 1 mm のマ スクを用いて測定した。

# 【結果・考察】

Fig. 2(a) に  $\theta$ -2 $\theta$  XRD パターンと RHEED 像を示す。3 段階成 長による試料( $R_{Ba}/R_{Si} = 1.2+4.0$ )は大半を Si-rich 条件で作製し たにもかかわらず、Ba-rich 時に匹敵する鮮明なストリークパター ンと a 軸配向 BaSi<sub>2</sub> 由来の XRD ピーク強度が得られた。Si-rich 条件下では、BaSi<sub>2</sub> 600 回折強度の FWHM が大きく、a 軸の配 向性が悪いのが特徴であった(Fig.3(a))が、三段階成長により 格段に配向性が改善された。さらに、分光感度も Si-rich BaSi<sub>2</sub> ( $R_{Ba}/R_{Si} = 1.2$ )により得られていた過去最大の値を 4 - 5 倍更新 する値を達成した。以上より、配向性と低 V<sub>Si</sub> 密度を両立した BaSi<sub>2</sub> 光吸収層の実現に成功したといえる。

# 【参考文献】

- 1) T. Suemasu, Jpn. J. Appl. Phys. 54, 07JA01 (2015).
- 2) T. Suemasu and N. Usami, J. Phys. D: Appl. Phys. 50, 023001 (2017).
- 3) Y. Yamashita et al., Jpn. J. Appl. Phys. 57, 075801 (2018).



Fig. 1 Schematic images of BaSi<sub>2</sub> 3-step growth method.



Fig. 2  $\vartheta$ -2 $\vartheta$  XRD patterns and RHEED images for BaSi<sub>2</sub> grown with defferent  $R_{Ba}/R_{Si}$  ratios.



Fig. 3 (a) Dependence of FWHM of XRD BaSi<sub>2</sub> 600 intensity on  $R_{Ba}/R_{Si}$ . (b) Photoresponce spectra of BaSi<sub>2</sub> grown defferent  $R_{Ba}/R_{Si}$  ratios under a bias voltage of -0.1 V.

- 4) Y. Yamashita et al., JSAP Spring meeting 19a-F202-7 (2018).
- 5) Y. Yamashita et al., JSAP Autumn meeting 19p-436-15 (2018).