Si クラスレート薄膜の Na 含有量と結晶歪みのヨウ素処理依存性

Effect of iodine treatment on Na contents and induced crystal strains of Si clathrate thin films

[1]宮崎大工, [2]宮崎大産・地連セ, [3]岐大工　竹下博高 [1], 境健太郎 [2],

原口智宏 [1], 鈴木秀俊 [1], 大橋史隆 [3], 久米徹二 [3], 福山敦彦 [1], 野々村修一 [3], 碇哲雄 [1]

[1]Univ. of Miyazaki Fac. of Eng., [2]Univ. of Miyazaki CRCC, [3]Gifu Univ. Fac. of Eng.　H. Takeshita[1]

K. Sakai[2], T. Haraguchi[1], H. Suzuki[1], F. Ohashi[3], T. Kume[3], A. Fukuyama[1], S. Nonomura[3], T. Ikari[1]

E-mail: tc14012@student.miyazaki-u.ac.jp

1 はじめに

ゲストフリーII 型 Si クラスレート Na_XSi_{136} (X=0)結晶は、理論上約 1.8 eV にバンドギャップ(E_g)を持つ直接遷移半導で、さらに Ge との混晶は組成制御により理論上 1.2~1.9 eV の E_g 制御が可能であるため、将来の高効率多層薄膜太陽電池への応用が期待できる[1]。我々は最近 Si(111)基板上に Na をほとんど含まない II 型 Si クラスレート薄膜（多結晶体）の合成に成功したが、膜にアモルファス質が存在し均質でなく、また Na の除去方法として用いるヨウ素(I_2)処理の適切な条件が不明であった。そこで本研究では、I_2 処理条件の異なる試料を作製し、それぞれの Si クラスレート薄膜の結晶方位、歪み量、そして Na 含有量を測定し、適切な I_2 処理条件と膜を安定に形成させるための条件を調べた。

2 実験方法

II 型 Si クラスレート薄膜は Si(111)基板上に NaSi 前駆体を形成した後、真空中で熱処理を行うことにより作製した。更に I_2 処理を行うと Na 量を低減することができ、本研究では処理を 1,3,6 回行った 3 つの試料の薄膜断面に対して透過電子顕微鏡(TEM)法による格子像解析と走査 TEM-エネルギー分散型 X 線分析(STEM-EDX)による組成分析を行った。

3 結果と考察

組成分析の結果、I_2 処理 1 回の試料からは Na が多く検出されたが 3 回以上行うと検出できないほどまで Na 含有量が減少した。これより、3 回以上で Na をほとんど含まない II 型 Si クラスレート薄膜、Na_XSi_{136}(X<0.5)が得られると考えられる。そこで、I_2 処理 3,6 回の試料に対して異なる数ヶ所の Si 基板界面での格子像解析を行い Si クラスレート結晶粒内の歪の方向と量を算出した（I_2 処理 1 回の試料は膜質が悪く格子像解析が不可能であった）。Fig.1 に I_2 処理 3 回の試料の基板界面の Si クラスレート結晶の格子像と Na フリーII 型 Si クラスレート結晶の計算機シミュレーションにより指数付けした回折図形を示した。Si 基板[111]に対して Si クラスレート[113]が Si 基板[4$\bar{2}\bar{2}$] 方向に約 4°傾斜し存在していることが確認された。I_2 処理 3,6 回の試料の各結晶粒内の歪み量はそれぞれ約 3.5, 3.0%以内であり、これより I_2 処理の回数を増やすと結晶粒内の歪み量が小さくなる傾向が見られた。

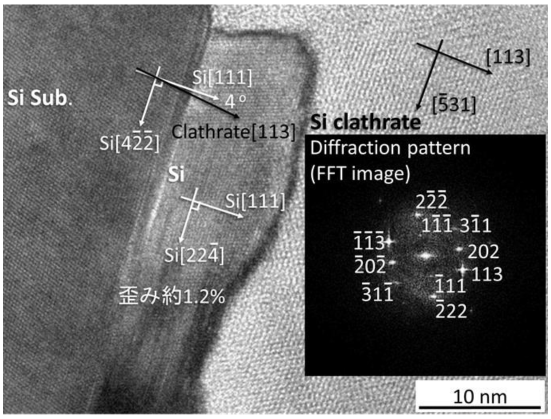

Fig.1 Lattice image and diffraction pattern of Si clathrate thin film at substrate interface (3 times I_2-treated).

参考文献

[1] K. Moriguchi, *et al.*, Phys. Rev. B 62, 7138 (2000).

謝辞

本研究は JST-ALCA の一環として行われた。関係者の方々に深く感謝いたします。

© 2015年 応用物理学会