

# 透過電子顕微鏡による Si クラスレート薄膜の結晶方位と歪みの評価

<sup>1</sup>宮崎大学工学部, <sup>2</sup>宮崎大学 産学・地域連携センター, <sup>3</sup>岐阜大学工学部 ○竹下博高<sup>1</sup>, 境健太郎<sup>2</sup>, 原口智宏<sup>1</sup>, 鈴木秀俊<sup>1</sup>, 大橋史隆<sup>3</sup>, 久米徹二<sup>3</sup>, 福山敦彦<sup>1</sup>, 野々村修一<sup>3</sup>, 碓哲雄<sup>1</sup>

## 【背景】

Si クラスレートとは、Si-Si の共有結合による多面体構造の中に Na を包接したものである。この Na の電子供給により金属的な性質を示すが、Na を抜き取ると理論上バンドギャップ( $E_g$ )が約 1.8 eV の直接遷移半導体になると推定されている[1]。また Ge クラスレート( $E_g=0.6$  eV)と合金化することで理論上 $E_g$ を 1.2~1.9 eV で制御可能で、将来の超高効率多層薄膜太陽電池への応用が期待できる[1]。最近、我々は Si(111)基板上に Na をほとんど含まない II 型 Si クラスレート薄膜の合成に成功したが、Si クラスレート薄膜結晶が Si(111)基板上にどのように形成しているかは未だ明らかになっていなかった。そこで本研究では、断面透過電子顕微鏡（断面 TEM）法を用いて Si(111)基板上に形成した Si クラスレート薄膜の結晶方位と歪みの評価を行い、膜を安定に形成するための条件を調べた。

## 【実験方法】

Na をほとんど含まない 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、真空中で熱アニールを行い、更にヨウ素処理を適切に行うことで作製した。我々はこの薄膜の断面 TEM 観察を行い、Na フリー II 型 Si クラスレート結晶の構造モデルによる回折パターンシミュレーションとの比較から結晶方位と歪みの評価を行った。

## 【結果と考察】

TEM 観察により Si クラスレート薄膜の膜厚が約 1  $\mu\text{m}$  であることが分かった。また高分解能 TEM 観察により様々な結晶方位を持つ格子像が得られたことから、この薄膜は多結晶体であることが確認でき、結晶粒径は 20~50 nm であると見積もられる。一部ではあるがアモルファス質の部位も存在する。Si(111)基板および Si クラスレート結晶の界面の格子像および回折図形を図 1 に示す。この回折図形には Na フリー II 型 Si クラスレート結晶構造を仮定した電子回折パターンシミュレーションにより計算した指数を示した。Si(111)基板界面での Si クラスレート薄膜結晶の方位は図 1 以外にも種々存在し、異なる数ヶ所の界面で観察された格子像を解析したところ、Si 基板[111]に対して Si クラスレート結晶の[111], [531], [004], [022],[422]方向が、Si[4 $\bar{5}$ 1]方向にそれぞれ 10, 2, 10, -4, 5°傾いて形成していることが確認された。これらの知見により、結晶方位を適切に制御した単結晶性の高い薄膜の作製が可能になることが示唆された。

## 【参考文献】

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

## 【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する。

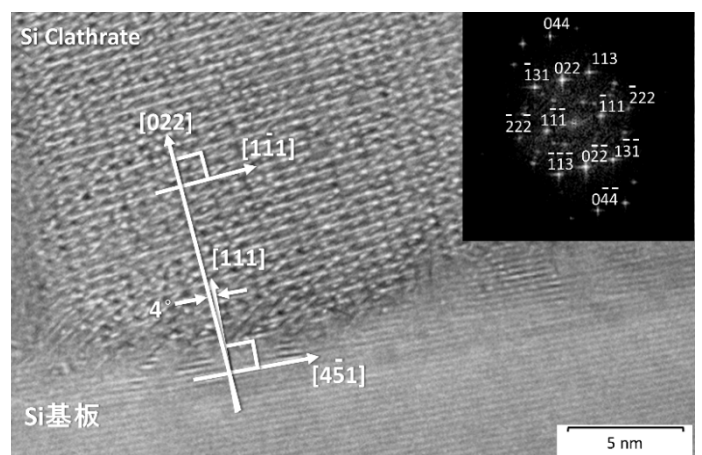


図 1 基板界面での Si クラスレート薄膜結晶の格子像と回折図形