29p-G7-4

$BaSi_2$への軽元素侵入型化合物の物性予測

Prediction of Interstitial Compounds of $BaSi_2$ with Lighter Elements

産総研[1]，筑波大院[2]　○今井庸二[1,2]，相馬 貫[1]，末益 崇[2]

AIST[1] , Univ. Tsukuba[2]

°Yoji Imai[1,2], Mitsugu Sohma[1], Takashi Suemasu[2]

E-mail: imai-y@aist.go.jp

1.はじめに.

アルカリ土類金属ケイ素化合物は、比較的空隙の多い構造を有するため、侵入型化合物を作りやすい。その一例である $BaSi_2$ も、以前から有望な太陽電池材料としての系統的な研究がなされてきたが、その過程で、Cu や Ga が $BaSi_2$ に対して侵入型化合物を形成する可能性があることが指摘された。本報告では、侵入型化合物を作りやすいと見込まれる周期律表前半の比較的小さな元素（2p 元素 (B, C, N, O, F, Ne)； 3s 元素 (Na, Mg)；3d 元素(Sc - Cu)） が $BaSi_2$ と侵入型化合物を形成した場合の物性を、電子構造計算から推測することを試みた。

2．計算方法.

幾何学的な考察から $BaSi_2$ の可能性のある侵入サイトとして、1 ユニットセル（Ba_8Si_{16}）あたり 16 サイトが想定されている[1)]。これらは、$BaSi_2$ の属する空間群 Pnma(62)に対する Wyckoff の記法を用いると *4a* サイト、*4b* サイト、および 2 種の *4c* サイトに分類される。これらのうち 1 サイトにのみ上述の元素が侵入したと仮定して、全電子エネルギーを算出した。$BaSi_2$ の構造データとしては Schäfer らのデータ[2)]を用いたが、構造最適化は実施していないため、今回のエネルギー計算の結果は暫定的なものである。計算手段は、密度勾配補正・局所密度近似の第一原理擬ポテンシャル法（CASTEP）である。計算されたエネルギー、及び、侵入原子が孤立原子状態であるときのエネルギーと、純 $BaSi_2$ のエネルギーとから、侵入型化合物の生成エネルギー（ ΔE_F ）を算出した。生成相の電子状態密度計算結果から予測される物性を議論する。

3．結果

Na、Mg、Sc は、もしも侵入型化合物を作れば、電子を供与して **n** 型となる。但し、エネルギー的には不利な過程である。**B, N** は、**Si** と強く混成して、**$BaSi_2$** のバンドギャップ内に局在準位を形成する。但し、実際は **Si** と置換する可能性が高い。遷移金属元素もバンドギャップ内に局在準位を形成し系に電導性を付与するが、とくに **Fe** や **Co** という磁性元素については、スピン分極したキャリアの生成が予測される。**Ni** は電子供与も捕獲もせず、**intrinsic** な半導体が維持されると予測され、さらに電子数が多い **Cu** では **n** 型電導となる。

1)Y. Imai, A. Watanabe, ***Intermetallics.*** **19 (2011) 1102-1106**

2)H. Schäfer, K. H. Janzon, A. Weiss, ***Ang. Chem. Int. Ed.,*** **2 (1963) 393-394**

© 2013 年　応用物理学会