

デバイス応用に向けたシリコンクラスレート単結晶のフラックス成長

Flux-growth of silicon clathrate single-crystal for device applications

東北大金研 ○森戸 春彦

IMR, Tohoku Univ.

E-mail: morito@imr.tohoku.ac.jp

シリコン(Si)クラスレートは、Si 元素で構成されたカゴ状物質で、炭素フラーレンにも似た特異な空間構造を有することから、原子や分子を内包した物質貯蔵材料や、ラットリング効果を活かした熱電変換材料など、様々な機能性材料として応用が期待されている。また、本物質の結晶構造はダイヤモンド構造の Si とは異なることから、次世代の新規 Si 結晶基板としても注目を浴びている。Si クラスレートの特長の一つとして、カゴを構成する Si と内包されるゲスト原子との組み合わせにより、多彩な物性を示すことが挙げられる。特に、ゲスト原子として Na を内包した Si クラスレート (Na-Si クラスレート) は Na の内包量によって電気的特性が金属から半導体まで変化することが知られており、古くから盛んに研究が行われている。これまで本物質は、NaSi 化合物を前駆体とした熱分解によって合成されていたが、得られる試料が粉末状であるため、実用はおろか詳細な特性評価にも至っていない。本研究では、Na-Si クラスレートの新しい結晶育成手法として、金属フラックス法を見出した[1,2]。これまでに、Na と Sn の複合金属フラックスを用いることで、大きさが数 mm 角の Na-Si クラスレート単結晶の作製に成功している。本講演では、上記プロセスの詳しい原理や単結晶育成条件について紹介する。

また、本研究では、元素置換による新規クラスレートの作製にも取り組んでおり、Na-Ga-Si 系や Na-Ba-Si 系において新規クラスレートを見出している[3,4]。本研究成果についても上記の結晶育成と併せて報告する。

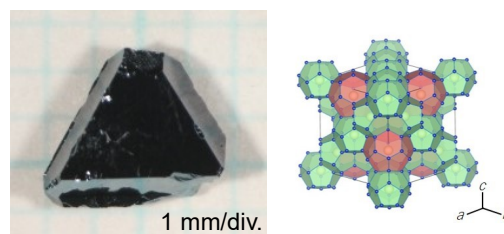


図 1 Na-Sn フラックスを用いて作製された Na-Si クラスレート単結晶とその結晶構造

謝辞

本研究を遂行するにあたり、東北大学多元物質科学研究所の山根久典教授、下田将司氏、漆山宏直氏、寺内正己教授、東北大学金属材料研究所の藤原航三教授、二見航平氏、飯島穰氏、ベロスルドフ・ロディオン准教授、多くの研究者の方々から多大なるご支援をいただいた。また、本研究は、科学研究費補助金(課題番号：16H06123, 18H01887)の助成を受けて行われた。

参考文献

- [1] H. Morito, M. Shimoda, H. Yamane, *J. Cryst. Growth*, **450** (2016) 164.
- [2] H. Morito, M. Shimoda, H. Yamane, K. Fujiwara, *Cryst. Growth Des.*, **18** (2018) 351.
- [3] H. Urushiyama, H. Morito, H. Yamane, M. Terauchi, *RSC Advances*, **8** (2018) 40505.
- [4] H. Urushiyama, H. Morito, H. Yamane, *RSC Advances*, **9** (2019) 14586.