

ドーピングした Mg_2Si における不純物サイト

Impurity site in the doped Mg_2Si

○今井 基晴¹、松下能孝¹、鵜殿治彦² (物材機構¹、茨城大学²)

○Motoharu Imai¹, Yoshitaka Matsushita¹, Haruhiko Udonon² (NIMS¹, Ibaraki Univ.²)

E-mail: IMAI.Motoharu@nims.go.jp

はじめに： Mg_2Si は熱電変換材料、赤外線検出器用材料として盛んに研究がされている[1]。

Mg_2Si を熱電変換素子、赤外線検出器に使用する際には、n型、p型の制御が必要になることから、ドーピングに関する研究も行われている。Sb、Biはn型のドーパントとして、Agはp型のドーパントとして重要な元素である。今後これらのドーパントがどのような役割をしているかを理解するためには、これらのドーパントがどの結晶学的サイトを占有しているかを明らかにすることが必要である。図1に示すように、 Mg_2Si は逆蛍石型構造をとる。Mgは8cサイト、Siは4aサイトを占有し、格子間サイトとして4bサイトが存在する。今まで、ドーパントがどのサイトを占有するか、実験的に検討した例は少ない[2,3]。

本研究では、ドーピングした Mg_2Si 単結晶を育成し、ドーパントが占有する結晶学的サイトを単結晶X線回折で決定することを試みた。

実験： アンドーピング Mg_2Si 、Ag、Sb、ドーピング Mg_2Si 単結晶を垂直ブリッジマン法で育成した。育成した単結晶の化学組成は誘導結合プラズマ発光分析 (ICP-OES) で調べた。Sb、Bi、Ag 濃度はそれぞれ 0.67、0.30、0.15 at.% であった。CCD 型単結晶 X 線回折計を用いて、結晶構造を決定した。

結果： アンドーピング Mg_2Si を調べた結果、微量の Mg 原子が 4b サイトを占有していることを確認した。この結果は過去の報告と一致している[4]。Sb ドーピング Mg_2Si を調べた結果、Sb 原子は 4a サイトの Si 原子の一部と置換していることが分かった。

これは Zhao らの報告と一致する[2]。当日は、Ag ドーピング試料、Bi ドーピング試料の結果についても報告する予定である。

[1] H. Udonon et al., Jpn. J. Appl. Phys. **54**, 07JB06 (2015).

[2] J. Zhao et al., J. Alloys. Compd. **681**, 66 (2016).

[3] N. Farahi et al., Dalton Trans. **43**, 14983 (2013).

[4] M. Kubouchi et al., J. Alloys Compd. **617**, 389 (2014).

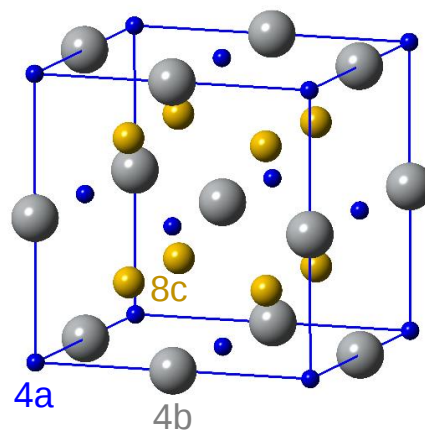


図1 Mg_2Si の結晶構造。Mg は 8c サイト、Si は 4a サイトを占有する。4b サイトは格子間サイト。