

Mg₂Si 単結晶の Si 空孔欠陥形成に対する酸素の効果

Effect of oxygen on the formation of Si vacancy defects in Mg₂Si single crystal

東北大院工¹, 奈良先端大², 名工大³

○林 慶¹, 川村 聡太², 橋本 由介², 赤尾 昇¹, 黄 志成¹,
齋藤 亘¹, 田崎 海地¹, 林 好一³, 松下 智裕², 宮崎 譲¹

Tohoku Univ.¹, NAIST², Nagoya Inst. Tech.³,

○Kei Hayashi¹, Sota Kawamura², Yusuke Hashimoto², Noboru Akao¹, Zhicheng Huang¹,

Wataru Saito¹, Kaichi Tasaki¹, Koichi Hayashi³, Tomohiro Matsushita², Yuzuru Miyazaki¹

E-mail: kei.hayashi.b5@tohoku.ac.jp

Mg₂Si の熱電性能を向上するためには点欠陥の理解が欠かせない。これまで我々は、Mg₂Si 多結晶に Mg 格子間欠陥(Mg_i)が存在するのに対し[1,2]、Mg₂Si 単結晶には Si 空孔欠陥(V_{Si})が存在することを明らかにしてきた[3,4]。計算によると、Mg₂Si における欠陥の形成エネルギーは Mg_i よりも V_{Si} の方が高いことが報告されており[5]、Mg₂Si 単結晶で V_{Si} が形成された理由は不明である。そこで、本研究では V_{Si} に酸素が侵入(O_{Si})して安定化する可能性を検討した。

第一原理計算 Wien2k [6]を用いて、Mg₂Si、Mg₂Si+Mg_i、Mg₂Si+V_{Si}、および Mg₂Si+O_{Si} について、2×2×2 スーパーセルの結晶構造モデルを作成して全エネルギーを計算した(図 1)。文献[5]で報告されている通り、Mg₂Si+V_{Si} の全エネルギーは Mg₂Si+Mg_i より高いことを確認した。どちらも Mg₂Si より高いことから、高温で Mg₂Si を作製した場合に V_{Si} や Mg_i が形成されることがわかる。実際に Mg₂Si 単結晶の作製温度は Mg₂Si 多結晶より高く、その結果、Mg₂Si 単結晶に V_{Si} が形成されたと考えられる。さらに、Mg₂Si+O_{Si} の全エネルギーは Mg₂Si より低くなっており、O_{Si} が形成されると安定化することがわかった。講演では、X 線光電子分光と光電子ホログラフィーによって、Mg₂Si 単結晶の O の有無を調査した結果も報告する。

- [1] M. Kubouchi et al., J. Alloys Comp. 617 (2014) 389.
- [2] M. Kubouchi et al., J. Electr. Mater. 45 (2016) 1589.
- [3] K. Hayashi et al., AIP Adv. 10 (2020) 035115; ibid 11 (2021) 029903.
- [4] W. Saito et al., ACS Appl. Energy Mater. 4 (2021) 5123.
- [5] A. Kato et al., J. Phys.: Condens. Matter 21 (2009) 205801.
- [6] P. Blaha et al., WIEN2k, An Augmented Plane Wave + Local Orbitals Program for Calculating Crystal Properties (Karlheinz Schwarz, Tech. Universität Wien, Austria (2001).

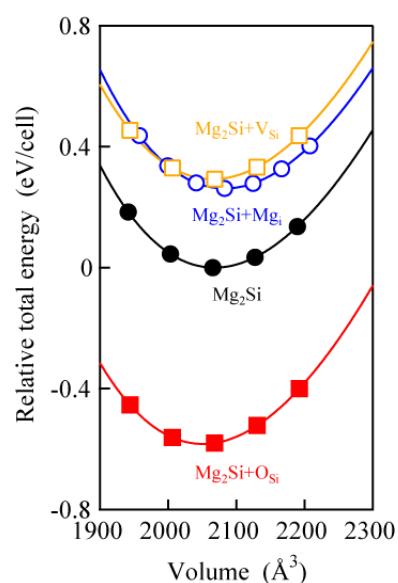


Fig. 1 Total energy of Mg₂Si with and without a point defect.