

$\text{Ba}_{1-x}\text{Sr}_x\text{Si}_2$ の結晶構造

Crystal Structure of $\text{Ba}_{1-x}\text{Sr}_x\text{Si}_2$

○今井 基晴¹、松下 能孝¹ (物材機構¹)

○Motoharu Imai¹, Yoshitaka Matsushita¹ (NIMS¹)

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

はじめに： BaSi_2 は 1.3eV の間接型エネルギーギャップを持ち大きな光吸収係数を持つことから太陽電池材料として注目されており、エネルギーギャップ、結晶構造における元素置換効果についても研究が行われている[1-3]。 BaSi_2 は室温大気圧下で BaSi_2 型構造を持っており、Si 原子は Si_4 四面体を形成している (図 1 (a))。結晶学的には単位胞当り 2 種類の Ba サイト (Ba1, Ba2) と 3 種類の Si サイト (Si1, Si2, Si3) が存在している。前回、我々は Ba の一部を Sr に置換した $\text{Ba}_{1-x}\text{Sr}_x\text{Si}_2$ ($x = 0.20, 0.41$) の単結晶を育成し、結晶構造における Sr 置換効果について研究を行った[3]。その結果、Ba1 サイトにある Ba 原子が優先的に Sr 原子と置換することが明らかになった。

そこで本研究では、より広い Sr 濃度領域で $\text{Ba}_{1-x}\text{Sr}_x\text{Si}_2$ の単結晶試料を合成し、単結晶 X 線回折法により Sr 原子の占有するサイトを決定した。

実験： まず BaSi_2 と SrSi_2 を Ba と Si、または Sr と Si をアーク溶融炉で溶解することにより合成した。 $\text{Ba}_{1-x}\text{Sr}_x\text{Si}_2$ はモル比 $(1-x):x$ ($x=0.05 - 0.8$) の BaSi_2 と SrSi_2 混合物を用いてアーク溶融法で合成した。アーク溶融試料をアルゴン雰囲気中で BN るつばに封入し、更に石英管に封入した後、電気炉を用いて約 1200°C で再熔融し、5K/h で 900°C まで冷却して単結晶試料を作成した。これらの試料から 100 μm 角程度の大きさの単結晶試料を取り出した。X 線回折は CCD 型単結晶 X 線回折装置を用いて行った。

結果： $x=0.05-0.80$ の試料において Sr は Ba(I) サイトの Ba と優先的に置換することが分かった。当日は配位多面体を用いた解析の結果とエネルギーギャップの Sr 濃度依存性についても述べる予定である。

[1] K. Morita et al., Jpn. J. Appl. Phys. Part2 45, L390 (2006).

[2] Y. Imai and A. Watanabe, Thin Solid Films 515, 8219 (2007).

[3] M. Imai et al., Intermetallics 18, 548 (2010).

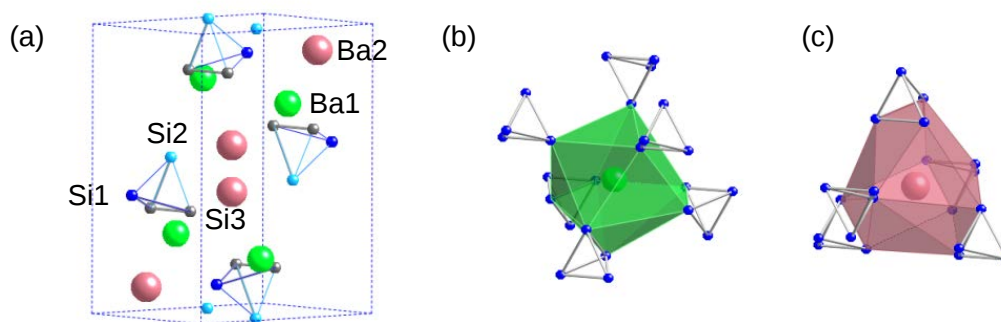


図 1 (a) BaSi_2 の結晶構造、(b) Ba1 サイトの配位多面体、(c) Ba2 サイトの配位多面体。