

Ga 溶媒を用いた溶液成長法による β -FeSi₂ 結晶中の Ga 原子周りの局所構造と結合電子状態に関する研究

○ 恵良淳史¹、山田浩臣²、田淵雅夫³、竹田美和²、鶴殿治彦⁴
¹名大工、²名大院工、³名大 VBL、⁴茨城大工

【はじめに】

近年、有害物質が発生することのないエネルギー源である熱電変換素子の材料として、 β -FeSi₂ が期待されている。 β -FeSi₂ をバルク成長させる方法として溶液成長法が挙げられるが、この方法では結晶中に取り込まれた溶媒元素が結晶の物性に影響を知る必要がある。そこで本研究では溶媒原子が β -FeSi₂ 結晶に与える影響を調べることを目的とした。

前回、Ga 溶媒を用いて作製された β -FeSi₂ 結晶中の溶媒原子について XAFS 法による局所構造の解析した結果と、その結果に基づく第一原理計算によるエネルギー状態密度について報告した。今回は計算に用いたモデルを改善し新たにエネルギー状態密度の計算を行ったのでその結果について報告する。

【EXAFS 測定とその解析結果】

β -FeSi₂ 粉末結晶試料は Ga 溶媒を用いた溶液成長法により作製された[1]。 β -FeSi₂ 粉末結晶試料についてインクルージョン除去のために熱処理を行った後、Ga-K 端について EXAFS 測定を行った。その解析の結果から、試料中の Ga のうち約 60% が Si サイト、約 40% が Fe サイトを置換していることがわかった。

【エネルギー状態密度の計算】

前回の計算に用いたモデルでは、試料中の Ga の濃度や Si サイトを置換している Ga と Fe サイトを置換している Ga の比を表現できていなかった。そこで今回は仮想結晶近似を用いてモデルを構築し、この問題を回避した。このモデルでのエネルギー状態密度の計算結果を図 1 に示す。図から、価電子帯付近に不純物準位があり、その一部は電子で埋まっていない状態にあることがわかる。この状態が全て正孔の形成に寄与すると考えた場合のアクセプタ密度は論文で報告されている値[1]に近いことから、 β -FeSi₂ 試料に残留した Ga 溶媒原子はアクセプタとして働くと考えられる。

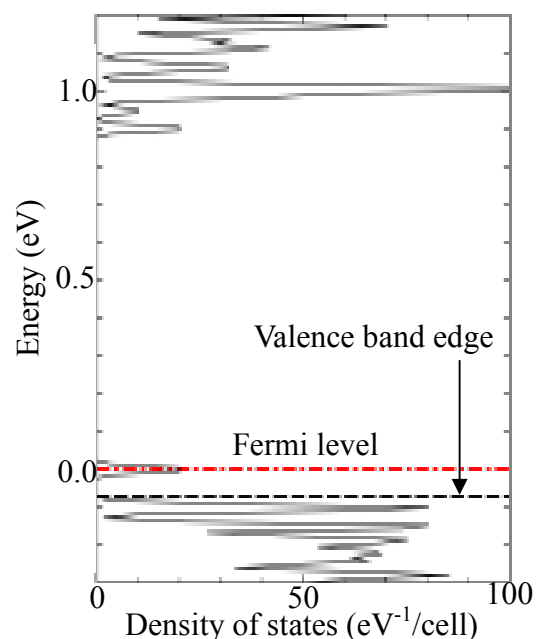


図1. 今回の計算より得られたエネルギー状態密度