

Mg₂Si のラマンスペクトルと第一原理計算による フォノンダイナミクス解析

Phonon Dynamics Analysis of Mg₂Si through Raman Spectroscopy and First-Principles Calculations

茨城大¹, 熊本高専² ◦島野 航輔¹, 太田 岳宏², 高倉 健一郎², 坂根 駿也¹, 鶴殿 治彦¹

Ibaraki Univ.¹, Kumamoto KOSEN² ◦Kosuke Shimano¹, Takehiro Ota², Kenichiro Takakura²,

Shunya Sakane¹, Haruhiko Udonon¹

*E-mail: 24nm625l@vc.ibaraki.ac.jp

【はじめに】

Mg₂Si は逆蛍石型の結晶構造を持つ、バンドギャップエネルギーが約 0.6 eV の間接遷移型半導体であり、短波長赤外域の受光素子や熱電変換材料として期待される^[1-3]。前回、我々は、Bi または Sb を数%添加した高不純物濃度の Mg₂Si 結晶において、259cm⁻¹ 付近の F_{2g} モードピーク位置^[4] が不純物添加量に依存して低波数側にシフトすることを報告した^[5]。そして、このピークシフトが結晶格子の歪みに起因して発生している可能性を指摘した^[5]。今回、Mg₂Si のラマンスペクトルと不純物の関係をより詳細に調査するため、より波数分解能の高いラマン分光測定装置で測定を行うと共に、第一原理計算により歪みとピークシフトの関係を調査したので報告する。

【実験方法】

Mg₂Si 結晶の成長は垂直ブリッジマン法または垂直温度勾配法で行った。Bi, Sb 不純物は、成長原料の Mg と Si の仕込み組成 2:1 に対して +0~3.0at% の範囲で仕込んだ。成長結晶を切り出し、鏡面研磨を行ったのち、顕微ラマン分光測定装置 (LabRAM HR Evolution) を用いて励起レーザ波長 633nm でラマン分光測定を行った。得られた結果をローレンツ関数でフィッティング解析を行った。また、不純物添加による結晶格子の歪みを考慮し、第一原理計算 (Quantum Espresso) でフォノン分散関係の計算を行うことで、歪みによるピーク位置のシフト量を評価した。

【実験結果】

波数分解能が高い装置でラマン分光測定を行ったところ、確かに不純物添加に依存したピーク位置のシフトが起きていることが判明した。また、歪みを導入した Mg₂Si に対して第一原理計算でフォノン分散関係の計算をすると、Γ点での F_{2g} モードが歪みに応じてシフトすることが確認できた。そこで実験によるピーク位置のシフトと、計算による Γ点での F_{2g} モードのシフトを照らし合わせたところ、傾向がおおむね一致することが分かった。

【参考文献】

- [1] H. Udonon *et al.*, *J. Phys. Chem. Sol.*, 74(2013) 311.
- [2] H. Udonon *et al.*, *Jpn. J. Appl. Phys.*, 54(2015) 07JB06.
- [3] 鶴殿治彦, 応用物理 88(2019) 797.
- [4] C. J. Buchenauer and M. Cardona., *Physical Review B*, vol. 3, 8(1971) 2504.
- [5] 島野他, 2024 年秋季応用物理学会, 18a-A24-9.