

Mg<sub>2</sub>Si 化合物在静水压下的电子输运性能研究

朱岩 张新宇 张素红 马明臻 刘日平 田宏燕

Electron transport properties of Mg<sub>2</sub>Si under hydrostatic pressures

Zhu Yan Zhang Xin-Yu Zhang Su-Hong Ma Ming-Zhen Liu Ri-Ping Tian Hong-Yan

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 64, 077103 (2015) DOI: 10.7498/aps.64.077103

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.077103>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2015/V64/I7>

---

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

N/Cu 共掺杂锐钛矿型 TiO<sub>2</sub> 第一性原理研究

First-principles study of N/Cu co-doped anatase TiO<sub>2</sub>

物理学报.2015, 64(4): 047101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.047101>

MoSi<sub>2</sub> 薄膜电子性质的第一性原理研究

Firstprinciples study of electronic properties of MoSi<sub>2</sub> thin films

物理学报.2015, 64(4): 047102 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.047102>

金属 Fe 与间隙 H 原子相互作用的密度泛函研究

First principles investigation of interaction between interstitial hydrogen atom and Fe metal

物理学报.2014, 63(22): 227101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.227101>

应力对硅烯上锂吸附的影响

Effect of strain on Li adsorption on silicene

物理学报.2014, 63(21): 217101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.217101>

Ti 掺杂 W<sub>18</sub>O<sub>49</sub> 纳米线的电子结构与 NO<sub>2</sub> 敏感性能的第一性原理研究

First-principles study of the electronic structure and NO<sub>2</sub>-sensing properties of Ti-doped W<sub>18</sub>O<sub>49</sub> nanowire

物理学报.2014, 63(20): 207101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.207101>

Mg<sub>2</sub>Si化合物在静水压下的电子输运性能研究\*朱岩<sup>1)2)</sup> 张新宇<sup>1)†</sup> 张素红<sup>1)</sup> 马明臻<sup>1)</sup> 刘日平<sup>1)</sup> 田宏燕<sup>2)</sup>

1)(燕山大学, 亚稳材料制备技术与科学国家重点实验室, 秦皇岛 066004)

2)(河北科技师范学院物理系, 秦皇岛 066004)

(2014年10月7日收到; 2014年11月5日收到修改稿)

本文基于第一性原理采用全电势线性缀加平面波方法和波尔兹曼理论运算了在静水压下 Mg<sub>2</sub>Si 的电子和热电性能. 研究发现, 对于 n 型载流子控制 Mg<sub>2</sub>Si 输运性质, 应变达到 0.02 时, 室温情况下, 热电性能参数得到了明显提高, 其塞贝克系数增幅为 26%, 功率因数增幅 47%; 高温时, 功率因数增幅 45%. 而对于主要载流子为空穴时, 其热电系数最值出现在应变为 0.01 时. 但其数值与未施加静水压的结构相比提高不多, 表明对于 p 型 Mg<sub>2</sub>Si 半导体应变对其输运性能的影响不大. 并且结合电子能带结构图解释这些现象.

关键词: Mg<sub>2</sub>Si, 应变, 热电性能, 第一性原理

PACS: 71.15.Mb, 72.10.-d, 72.20.Pa

DOI: 10.7498/aps.64.077103

## 1 引言

能源和环境问题是当今人类关注的两大课题, 因此近些年来关于新能源、新材料以及环境保护的话题成为讨论的热点. 热电材料作为一种环保型固态能量转换材料, 实现了热能向电能的转化, 同样受到广泛的关注. Mg<sub>2</sub>Si 半导体金属硅化合物是一种应用于中温度区间的优良热电材料, 因其具有较大的载流子有效质量、较高的迁移率、高温稳定存在, 原料丰富、价格低廉、环境友好等特点受到广泛的关注与研究<sup>[1-4]</sup>. 目前如何提高 Mg<sub>2</sub>Si 热电性能是主要研究方向. 热电性能的好坏, 可由热电优值 ZT 描述. 其定义为  $ZT = S^2\sigma T/\kappa$ , 其中  $S$  为塞贝克系数;  $\sigma$  为电导率;  $T$  为绝对温度;  $\kappa$  为热导率, 其中包括晶格热振动热导率和电子热导率; 这里  $S^2\sigma$  称为功率因数 (PF). 从这个公式可以看出好的热电材料必须具有大的塞贝克系数, 同时应有较小的热导率, 较大的电导率. 目前提高热电性能的研究主要集中在寻找具有高塞贝克系数的材料、

如何降低材料的热导率、及如何提高材料的电导率等这几个方面. 采用的方法多为掺杂其他元素, 及设计新结构<sup>[3-9]</sup>. 对于 Mg<sub>2</sub>-Si-Sn 合金已经被认为是最有潜力的热电材料, 其最优值  $ZT > 1$ <sup>[3,4]</sup>. 特别是 Mg<sub>2</sub>Si<sub>1-x-y</sub>Sn<sub>x</sub>Ge<sub>y</sub> 结构的 n 型掺杂 ZT 值达到 1.4<sup>[5]</sup>. 这些方法其本质都是改变材料中载流子的性能从而改善材料的热电性能. 本文主要目标是通过 Mg<sub>2</sub>Si 化合物施加静水压, 使其晶格产生应变, 改变该结构的电子能带性质, 探索应变对该化合物的电子输运性能的影响, 从而优化其热电性能.

目前多数计算理论研究采用赝势方法, 其认为芯电子不参与化学成键并且也不受体系的结构调整的影响. 采用较弱的赝势代替芯电子所受的强烈库仑势, 来提高计算效率. Balout 等<sup>[10]</sup> 使用平面波赝势方法模拟了 Mg<sub>2</sub>Si 在各向同性应变时的热电性能. 而对于半导体材料研究电子输运性质的来说, 电子结构计算的准确度十分重要. 本文采用全电子势, 其优点考虑了相对论效应, 自旋-轨道耦合作用, 能够更精确的提供电子结构信息.

\* 国家自然科学基金 (批准号: 51002130, 51121061), 燕山大学优秀博士生科学基金和河北省高等学校科学技术研究项目 (批准号: Z2011158) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: xzhang@ysu.edu.cn

## 2 计算方法

采用基于密度泛函理论(DFT)和应用广义梯度近似(GGA)的全电势线性缀加平面波方法加上局域轨道方法(FPLAPW)的Wien2k软件包<sup>[11]</sup>进行计算. 对Mg和Si原子球形半径为2.5 a.u. 在计算中, 根据系统的能量收敛测试, 控制基函数集大小的收敛参数 $R_{\min}K_{\max}$ 取为8.0, 其中 $R_{\min}$ 是最小的LAPW半径, $K_{\max}$ 是平面波截断波函数, 能量收敛标准设为 $10^{-7}$  Ry, 布里渊区取1000个 $k$ 点. 电子的输运性质采用的半经典的波尔兹曼理论方法进行运算.  $Mg_2Si$ 的电导率, 塞贝克系数, 功率因数由Boltrap软件包计算得到, 该软件采用的是弛豫时间为常数的刚性模型<sup>[12]</sup>. 为了获得更准确的输运性质的参数, 我们在布里渊区采用4734个 $k$ 点对电子能带结构进行计算.

$Mg_2Si$ 具有反萤石结构, 空间群为 $Fm-3m$ , 原胞包括3个原子, 其中1个Si原子占据 $4a(0, 0, 0)$ 位置, 2个Mg原子占据 $8c(0.25, 0.25, 0.25)$ 的位置. 经过精密的结构优化在常压下得到的晶格常数为0.639 nm, 实验值为0.635 nm<sup>[13,14]</sup>. 可见我们的计算结果与实验值十分符合, 是可靠的. 由于 $Mg_2Si$ 为立方结构, 其3个晶向的晶格常数是均等的, 因此, 我们可通过改变晶格常数的方法来模拟静水压的作用, 即用应变来表征静水压. 这种方法更能直观地表示出晶体结构对其性能的影响. 并且该方法在计算模拟中是普遍适用的<sup>[10,15]</sup>. 我们选取几个特殊晶格应变值作为研究对象, 寻找应变对热电性能的影响规律. 应变值为晶格参数的相对

变化量, 即 $\Delta a/a_0 = a/a_0 - 1$ . 其中 $\Delta a/a_0 > 0$ 表示对化合物施加的是负压, 反之施加的为正压. 由于在实际应用中,  $Mg_2Si$ 多用于Si半导体晶体表面上, 这样在 $Mg_2Si$ 与Si的界面会产生应变能, 使得 $Mg_2Si$ 的晶格大小及性能发生一定的微小变化. 因此, 为了使我们的研究更具有实用价值, 我们选取-0.03, -0.02, -0.01, 0.0, 0.01, 0.02, 0.03这七个应变值作为研究对象.

## 3 结果和讨论

### 3.1 能带结构

在不同压力的条件下, 我们沿着 $W-L-\Gamma-X-W-K$ 路径对 $Mg_2Si$ 能带结构进行了计算, 图1给出不同应变下的能带结构图. 从图中我们可以看出价带顶在 $\Gamma$ 点, 而导带底在 $X$ 点附近, 表明 $Mg_2Si$ 化合物为间接半导体特性. 在施加正压的过程中, 导带底 $X$ 点附近的两条能带随着应变发生了改变, 其中能量更低的能带(能带1)随着应变的增加, 其能量值逐渐减小, 出现下移现象, 并且该能带在 $L$ 点和 $F$ 点能量出现上移现象; 而能量较高的能带(能带2)也随应变增大而上移. 当应变 $\Delta a/a_0$ 达到-0.02时, 两条能带在 $X$ 点出现简并现象, 此时在 $X$ 点能量为0.319 eV. 应变继续增大到-0.03时, 能带1能量不再上移而是略微下降为0.262 eV, 同时该能带在 $L$ 点和 $F$ 点能量值依然上升; 能带2的则出现下移现象, 能量为0.323 eV. 导带底的能带1在 $W$ 点的能量值基本不随应变而改变. 导带底的能带发生偏移主要因为随着应变的增加, 晶格长度变大, 原子间距变大, 布里渊区减小, 能带就应

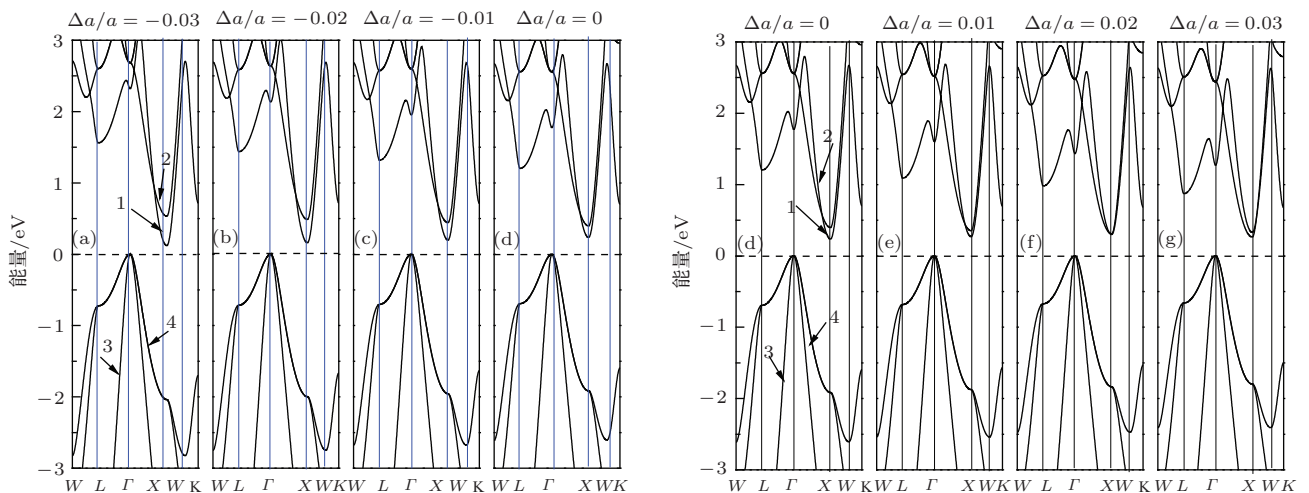


图1 不同应变下 $Mg_2Si$ 的电子能带图(图中虚线表示费米能级的位置, 箭头标出导带底的两条能带, 价带顶的两条能带) (a)–(c)为负压过程, 应变值分别为-0.03; -0.02; -0.01; (e)–(g)为负压过程, 应变值分别为0.01; 0.02; 0.03; (d)为常压下

该越窄. 负压过程中, 价带顶的两条能带(能带3和能带4)在 $\Gamma$ 点出现二重简并. 能带3随着应变的变化很微小, 只是能带的宽度有略微改变, 在能量为 $-3$  eV时测量能带3的跨度变化, 发现当应变为0.01时, 其能带宽跨度最大. 在高对称点 $W$ 点, 能带4能量值随应变值增加比较大, 在 $L$ 点能量值基本不变, 在 $X$ 点和 $K$ 点略微下降. 总体来说能带4随着应变值增大能带宽度逐渐变窄.

图2给出晶体的电子能带带隙随着应变的变化趋势. 不施加应变时, 其带隙值为0.24 eV, 实验值为0.78 eV<sup>[16]</sup>, 理论与实验值有一定的差异, 但符合其他密度泛函理论的计算<sup>[10,17]</sup>. 这种差距主要是密度泛函理论本身低估带隙的原因所致. 带隙最大值出现在负压时应变为0.02时; 在应变低于0.02时, 带隙是随应变增加, 并近似于线性的增加. 通过上述分析得知带隙的变化, 主要是由导带底的能带贡献的.

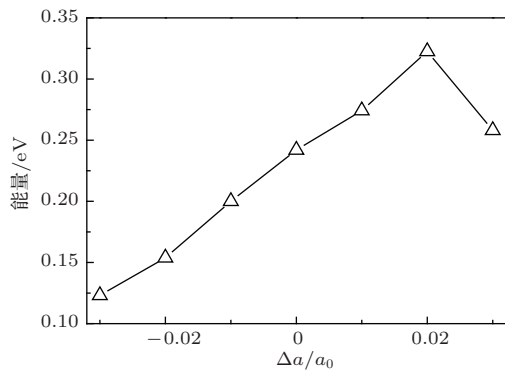


图2 能带带隙随应变变化曲线图

### 3.2 运输性质

关于 $Mg_2Si$ 的运输性质, 我们主要分别从两种不同浓度( $1 \times 10^{18}$ 和 $2.0 \times 10^{19}$  / $cm^3$ ), 不同类型(n型和p型)的载流子讨论. 由于半经典的波尔兹曼理论假定电子弛豫时间( $\tau$ )是一个与能量无关的常数. 若想知道电导率数值和ZT值必须知道弛豫时间的数值, 一般来说 $\tau$ 是从理论计算与实验测量结果的比较中推算出来. 但据我们所知, 目前并没有给出适用于 $Mg_2Si$ 弛豫时间的报道. 因此我们采用Ong等<sup>[17]</sup>的方法利用实验数据和电子-声子耦合性质估测弛豫时间. 该理论提供的公式为 $\tau = \frac{C}{T} n^{-1/3}$ , 其中 $C$ 为常数, 对于未掺杂的 $Mg_2Si$ ,  $C$ 为 $5 \times 10^{-6}$  s·K·cm<sup>[18]</sup>. 对于300 K时, 浓度为 $1 \times 10^{18}$  / $cm^3$ 的载流子, 弛豫时间 $1.67 \times 10^{-14}$  s;

而温度为700 K, 浓度为 $2.0 \times 10^{19}$  / $cm^3$ 的载流子, 弛豫时间为 $2.09 \times 10^{-14}$  s.

#### 3.2.1 n型载流子

由能带分析可知, 随着应变的变化, 价带的能带变化不明显, 而导带底的能带变化很显著. 说明对于 $Mg_2Si$ 半导体来说, n型载流子受应变的影响更大一些. 图3分别给出温度为300 K电子载流子浓度为 $1 \times 10^{18}$  / $cm^3$ 和温度为700 K时载流子浓度为 $2.0 \times 10^{19}$  / $cm^3$ 的电导率、塞贝克系数及功率因数随应变变化的趋势. 在室温下, 当应变值低于0.01时,  $\sigma$ 是单调下降的, 且下降趋势逐渐缓和. 当应变达到0.02时 $\sigma$ 出现了一个小高峰. 在n型载流子为主要载流子支配 $Mg_2Si$ 的传输行为时, 在整个研究温度范围内,  $Mg_2Si$ 的塞贝克系数都为负. 图3(b)给出不同应变下的塞贝克系数变化趋势. 对于不施加应变情况,  $S$ 值为 $333.8 \mu V/K^{-1}$ , 此结果与Boulet等<sup>[16]</sup>在相同温度相同的载流子浓度时计算的结果 $335 \mu V/K^{-1}$ 十分相近. 实验上报道对于不掺杂的 $Mg_2Si$ 在300 K,  $n = 8.41 \times 10^{18}$  / $cm^3$ 时的 $S = 307.5 \mu V/K^{-1}$ <sup>[19]</sup>. 由于载流子浓度不一样, 不能直接对比, 但可以估测出我们计算的结果是十分可靠, 有参考价值的. 从图3(b)可以看出随着应变值增加塞贝克系数增大, 当应变达到0.02时, 其数值达到最大为 $420.4 \mu V/K^{-1}$ . 比不施加应变时, 塞贝克系数增大了26%. 可见在室温时, 可通过增大 $Mg_2Si$ 的应变增强其电子的运输性质. 图3(c)给出功率因数随应变的变化趋势, 不施加应变时, 其 $PF=0.70$ , 实验中报道出温度为300 K时 $n = 4.3 \times 10^{17}$  / $cm^3$ 的未掺杂 $Mg_2Si$ 的功率因数可达到0.41<sup>[20]</sup>. 此外, 从图中可以看出在 $\Delta a/a_0 = 0.02$ 时达到最大值, 增幅为无应变的47%. 表明在该条件下材料的运输性能得到了大幅度提高. 在高温区( $T = 700$  K), 电导率的变化趋势与室温下有很大的不同, 数值也相差了1个数量级, 表明在高温时, 电子载流子的电导率更高一些, 这与温度和载流子浓度都有密切的关系, 并与实际情况相符合. 在负应变时,  $\sigma$ 随着应变值增大而减小; 当变为正应变时,  $\sigma$ 随着应变值增大而增大,  $\Delta a/a_0 = 0.02$ 时达到高峰, 表明在应变值为0.02时, 其载流子的电导率最大. 提高 $Mg_2Si$ 的运输性能的手段之一就是增大载流子的电导率, 可见, 通过施加应变的方式, 无论在室温还是高温区, 都可以增大电子载流子的电导率. 图3(e)给

出在高温时,塞贝克系数的变化趋势,可以看出应变值在0.01—0.03时, $S$ 值接近,这可以从能带图解释,应变在该范围内,导带底的两条能带(能带1和能带2)的间隙非常小(0.062—0.074 eV),当 $\Delta a/a_0$ 为0.02时,完全重合,此时的 $S$ 值最大,值为258  $\mu\text{V}/\text{K}^{-1}$ .可见导带底的电子对 $\text{Mg}_2\text{Si}$ 的输运性能影响很大.对于高温时,功率因数的最大值依然

出现在应变为0.02时,其数值比无应变时增加了45%,其增值幅度与低温时接近.

### 3.2.2 p型载流子

图4给出空穴载流子的输运性能参数.图4(a)给出室温时,电导率随应变的变化,在应变值较低的时候变化比较显著,表现为急剧下降,当应变值为-0.01时开始平缓的下降,最低值出现在应变为

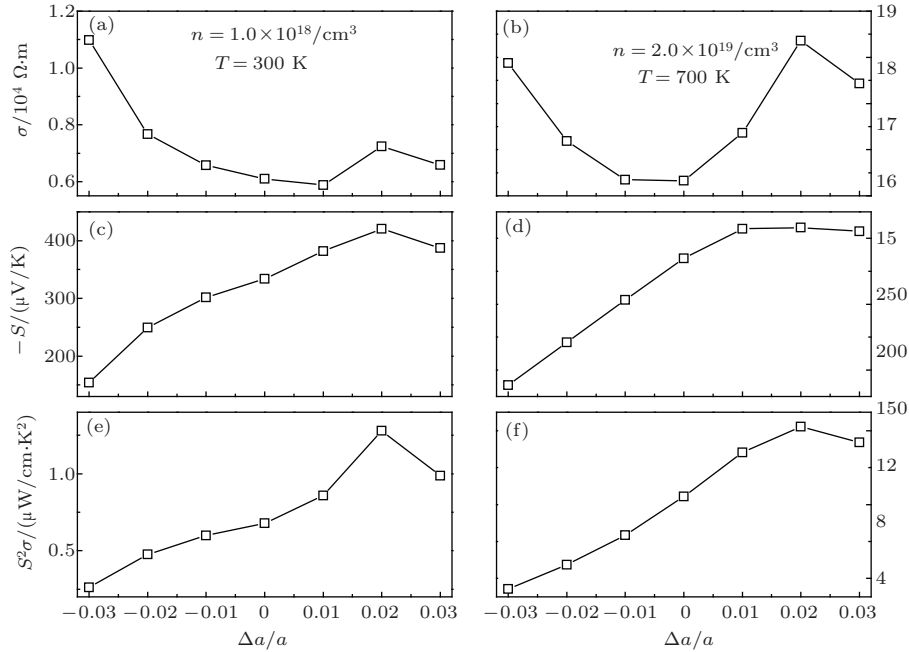


图3 n型载流子时,计算不同应变下 $\text{Mg}_2\text{Si}$ 的热电系数曲线图(左侧为 $T = 300\text{ K}$ ,载流子浓度为 $1 \times 10^{18} / \text{cm}^3$ ;右侧为 $T = 700\text{ K}$ ,载流子浓度为 $2.0 \times 10^{19} / \text{cm}^3$ ) (a), (b) 电导率; (c), (d) 塞贝克系数; (e), (f) 功率因数

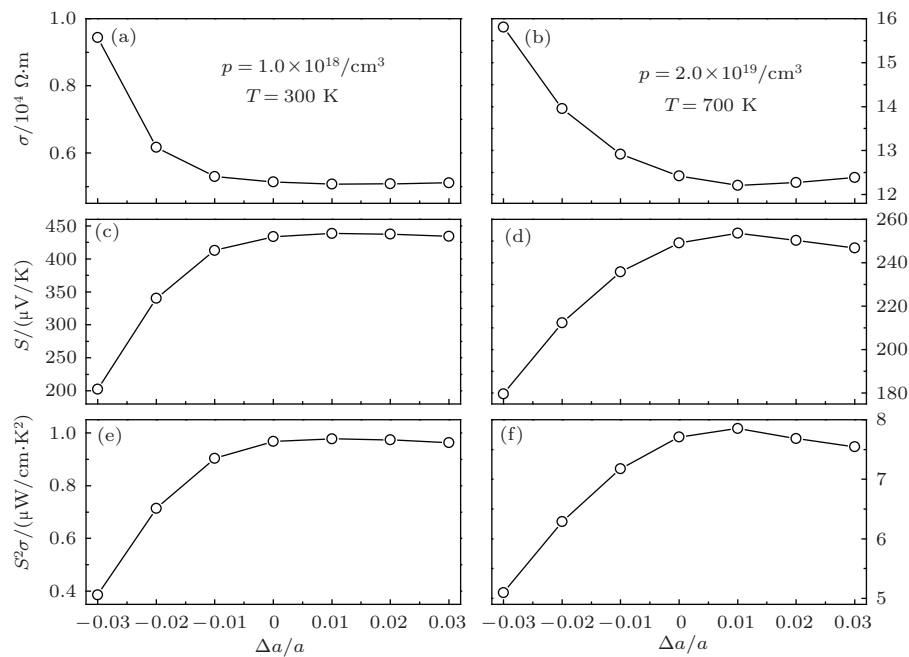


图4 p型载流子时,计算不同应变下 $\text{Mg}_2\text{Si}$ 的热电系数曲线图(左侧为 $T = 300\text{ K}$ ,载流子浓度为 $1 \times 10^{18} / \text{cm}^3$ ;右侧为 $T = 700\text{ K}$ ,载流子浓度为 $2.0 \times 10^{19} / \text{cm}^3$ ) (a), (b) 电导率; (c), (d) 塞贝克系数; (e), (f) 功率因数

0.01时,但其数值与无应变及应变为0.02很接近.同时塞贝克系数和功率因数的变化也同样是在低应变值变化剧烈,当应变值为 $-0.01$ 时开始平缓.  $S$ 最大值出现在 $\Delta a/a_0 = 0.01$ 处,数值为 $439 \mu\text{V}/\text{K}^{-1}$ . 功率因数的高峰同样出现在应变值为0.01时,其比无应变时仅仅增加了0.9%. 载流子浓度为 $2.0 \times 10^{19}/\text{cm}^3$ ,温度为700 K时,其电导率、塞贝克系数和功率因数的变化都比室温时要显著一些,其最值均出现在应变值为0.01时, $\sigma$ 的最小值为 $5.84 \times 10^{18} / \text{ms}$ ,  $S$ 值最大为 $439 \mu\text{V}/\text{K}^{-1}$ ,功率因数的最大值比无应变时增加了2%. 可见正应变对空穴载流子的输运性质影响不大. 这从导带结构图中的价带对应变的响应中可以看出. 而最值出现在应变为0.01时,可能是因为价带顶的能带3起到主导作用.

## 4 结 论

本文在密度泛函理论的框架下,用第一性原理线性完全势级加平面波法 (FLAPW) 计算了 $\text{Mg}_2\text{Si}$ 的能带结构,使用恒定弛豫时间近似下的玻尔兹曼方程理论计算了 $\text{Mg}_2\text{Si}$ 半导体的各热电系数. 计算结果表明,对于n型载流子控制 $\text{Mg}_2\text{Si}$ 输运性质时,在 $T = 300 \text{ K}$ 、应变达到0.02时,其塞贝克系数可明显提高,增幅为26%. 无论在室温还是高温情况,应变达到0.02时,功率因数都明显的大幅度提高,增幅分别为47%和45%. 可见对于n型掺杂的 $\text{Mg}_2\text{Si}$ 可通过增大应变的方式提高其热电性能. 对于p型载流子控制 $\text{Mg}_2\text{Si}$ 输运性质时,在应变值较高时,其热电系数变化比较平缓,最值出现在应变为0.01时. 由于 $\text{Mg}_2\text{Si}$ 的能带结构中价带能带变化比较微小,使得空穴成为 $\text{Mg}_2\text{Si}$ 主要载流子时,应变对其作用甚微.

## 参考文献

- [1] Zaitsev V K, Fedorov M I, Gurieva E A, Eremin I S, Kondtantinov P P, Samunin A Y, Vedernikov M V 2006 *Phys. Rev. B* **74** 045207
- [2] Han X P, Shao G S 2012 *J. Appl. Phys.* **112** 013715
- [3] Liu W, Tan X J, Yin K, Liu H J, Tang X F, Shi J, Zhang Q J, Uher C 2012 *Phys. Rev. Lett.* **108** 166601
- [4] Hinsche N F, Yavorsky B Y, Gradhand M, Czerner M, Winkler M, KÖnig J, BÖttner H, Mertig I, Zahn P 2012 *Phys. Rev. B* **86** 085323
- [5] 2013 *Scripta Mater* **69** 606
- [6] Zhang H, Luo J, Zhu H T, Liu Q L, Liang J K, Rao G H 2012 *Acta Phys. Sin.* **8** 086101 (in Chinese) [张贺, 骆军, 朱航天, 刘泉林, 梁敬魁, 绕光辉 2012 物理学报 **8** 086101]
- [7] Sun Z, Chen S P, Yang J F, Meng Q S, Cui J L 2014 *Acta Phys. Sin.* **63** 057201 (in Chinese) [孙政, 陈少平, 杨江锋, 孟庆森, 崔教林 2014 物理学报 **63** 057201]
- [8] Xue L, Xu B, Yi L 2014 *Chin. Phys. B* **23** 037103
- [9] Zhang H, Luo J, Zhu H T, Liu Q L, Liang J K, Li J B, Liu G Y 2012 *Chin. Phys. B* **21** 106101
- [10] Balout H, Boulet P, Record M C 2014 *Intermetallics* **50** 8
- [11] Blaha P, Schwarz K, Sorantin P, Trickey S B 1990 *Comput. Phys. Commun.* **59** 399
- [12] Madsen G K H, BoltzTraP S D J 2006 *Comput. Phys. Commun.* **175** 67
- [13] Anastassakis E, Hawranek J P 1972 *Phys. Rev. B* **5** 4003
- [14] Zhang J, Fan Z, Wang Y Q, Zhou B L 2000 *Mater. Sci. Eng. A* **281** 104
- [15] Hinsche N F, Mertig I, Zahn P 2011 *J. Phys.: Condens. Matter* **23** 295502
- [16] Koenig P, Lynch D W, Danielson G C 1961 *J. Phys. Chem. Solids* **20** 122
- [17] Ong K P, Singh D J, Wu P 2011 *Phys. Rev. B* **83** 115110
- [18] Boulet P, Record M C 2011 *J. Chem. Phys.* **135** 234702
- [19] Akasaka M, Iida T, Matsumoto A, Yamanaka K, Takanashi Y, Imai T, Hamada N 2008 *J. Appl. Phys.* **104** 013703
- [20] Tani J I, Kido H 2007 *Intermetallics* **15** 1202

# Electron transport properties of Mg<sub>2</sub>Si under hydrostatic pressures\*

Zhu Yan<sup>1)2)</sup> Zhang Xin-Yu<sup>1)†</sup> Zhang Su-Hong<sup>1)</sup> Ma Ming-Zhen<sup>1)</sup>  
Liu Ri-Ping<sup>1)</sup> Tian Hong-Yan<sup>2)</sup>

1) (State Key Laboratory of Metastable materials Science and Technology, Yanshan University, Qinhuangdao 066004, China)

2) (The Department of Physics, Hebei Normal University of Science & Technology, Qinhuangdao 066004, China)

( Received 7 October 2014; revised manuscript received 5 November 2014 )

## Abstract

The electronic and thermoelectric properties of Mg<sub>2</sub>Si under hydrostatic pressures have been investigated using the first principles calculations with general potential linearized augmented plane-wave method and the semiclassical Boltzmann theory with the rigid band approach and the constant scattering time relaxation approximation. In this work, the hydrostatic pressure is simulated by applying equiaxial strain method for the cubic anti-fluorite structure of Mg<sub>2</sub>Si in space group *Fm3m*. The strain values ranging from  $-0.03$  to  $0.03$  describe the compressive and tensile Processes under pressure. The band structure, electrical conductivity, Seebeck coefficient and power factor have been calculated and analyzed in detail.

From the band structure in Mg<sub>2</sub>Si one can see that the bottom of the conduction band shows significant changes under strains. Especially, when the strain is up to  $0.02$ , there are two twofold-degeneracy states occurring at the center of the Brillouin zone. The top of the valence band shows a slight change due to the strain effect. For the unstrained structure, our calculated thermoelectric data are in accordance with other reports. Moreover, the results indicate that when the value of strain is up to  $0.02$ , the transport properties get an optimal functioning of Mg<sub>2</sub>Si due to electron doping. At  $300$  K, the Seebeck coefficient improves obviously and comes up to  $126\%$ . And the power factor is up to  $47\%$  ( $45\%$ ) at  $T = 300$  K ( $700$  K). Consequently, the thermoelectric properties can be improved through applying negative pressures to the Mg<sub>2</sub>Si crystal. For the case of hole doping, the transport parameters change obviously at a small strain value, and change gently at a high strain values. When the strain is up to  $0.01$ , the Seebeck coefficient reaches the maximum value  $439 \mu\text{V}/\text{K}^{-1}$ . But, the power factor only increases  $0.9\%$ — $2\%$ . Hence, we can conclude that the hydrostatic pressures have a slight influence on the thermoelectric properties of hole-doped materials.

**Keywords:** Mg<sub>2</sub>Si, strain, thermoelectric properties, first principles

**PACS:** 71.15.Mb, 72.10.-d, 72.20.Pa

**DOI:** 10.7498/aps.64.077103

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 51002130, 51121061), the Science Foundation of Yanshan University for the Excellent Ph. D. Students, and Education Department of Hebei Province (Grant No. Z2011158).

† Corresponding author. E-mail: [xyzhang@ysu.edu.cn](mailto:xyzhang@ysu.edu.cn)