

## Mg<sub>2</sub>Si 熱電材料の高圧 X 線回折 High-pressure X-ray diffraction study of Mg<sub>2</sub>Si thermoelectric material

森嘉久<sup>1\*</sup>

<sup>1</sup>岡山理科大学理学部, 〒700-0005 岡山市北区理大町 1-1

### 1 はじめに

Mg<sub>2</sub>Si は、中温領域の 650 K 付近にピークを持つ N 型半導体の熱電材料で、その構成元素が人体に無害で且つその埋蔵量が豊富にあるので、近年活発に開発が進んでいる。しかし良質の Mg<sub>2</sub>Si を合成することは容易ではない。なぜなら試料合成は Mg と Si を化学量論比に配合して Mg<sub>2</sub>Si の融点(1358K)近傍に加熱して合成を行うが、その融点の 5K 上には Mg の沸点 (1363K) あるため、Mg 蒸発による組成ずれが生じてしまう。そのため試薬として購入できる Mg<sub>2</sub>Si (純度 2N5) にも少しの未反応物などが存在しており、その試料を出発原料として高温高压合成しても、得られる合成物にまでその影響がもたらされてきた。近年、高純度の Mg<sub>2</sub>Si 試料がユニオンマテリアル社から購入することが可能となり、その試料を出発原料として高温高压合成法により高い熱電特性を有する材料の合成研究を進めている。本研究課題では、まずその高純度 Mg<sub>2</sub>Si の基礎物性を明らかにするため高圧 XRD 実験を行い、その体積弾性率や圧力誘起構造相転移などを調べた。

### 2 実験

高圧 XRD 実験は PF-AR の NE1A ビームラインで、アンビルの先端が 0.6 mm φ のダイヤモンドアンビルセルを用いて実験した。高純度試料の Mg<sub>2</sub>Si を微粉末にした後、インコネルガasketの試料室内に圧力測定用のルビーボールとともに封入した。圧力媒体にはメタノール：エタノール：水=16:3:1 のアルコール媒体を使用し、実験はそのアルコール媒体が固化するまでの圧力領域で行った。波長は 0.04128 nm で、露光時間は 5 分であった。

### 3 結果および考察

高圧 XRD の結果を Fig. 1. に示す。0.00 GPa のプロファイルには Mg<sub>2</sub>Si 以外の回折線はほとんどなく、高純度の試料であることが分かる。4.00 GPa におけるプロファイルから、6.1, 7.7, 8.3, 2.3 度に高圧相からの回折線が確認できた。さらに昇圧すると、高圧相からの回折線強度が増加するとともに、Mg<sub>2</sub>Si からの回折線強度は減少した。Fig. 2 に体積の圧力依存性を示す。体積弾性率は Birch-Murnaghan の式により  $B_0=53.1$  GPa,  $B_0'=3.76$  と求められた。

### 4 まとめ

Mg<sub>2</sub>Si 高圧 XRD 実験により、圧力誘起構造相転移

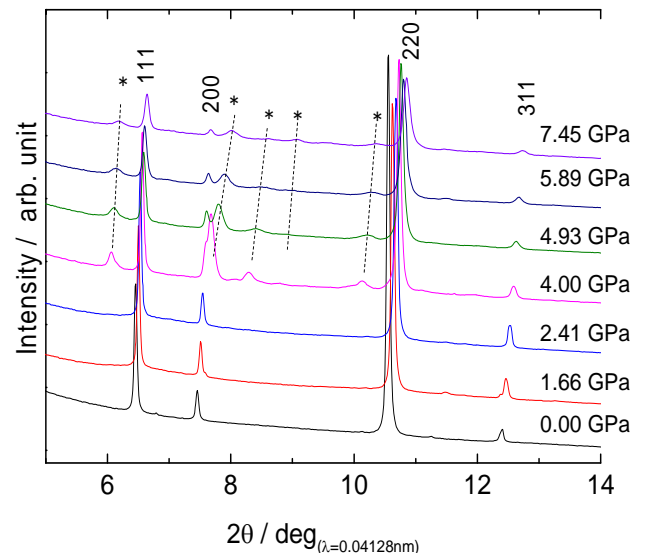


Fig.1. X-ray diffraction profiles of Mg<sub>2</sub>Si up to 7.45 GPa. Pressure-induced phase transition occurred at 4.00 GPa. Some diffraction peaks of the high-pressure phase are denoted by dotted line and asterisk (\*).

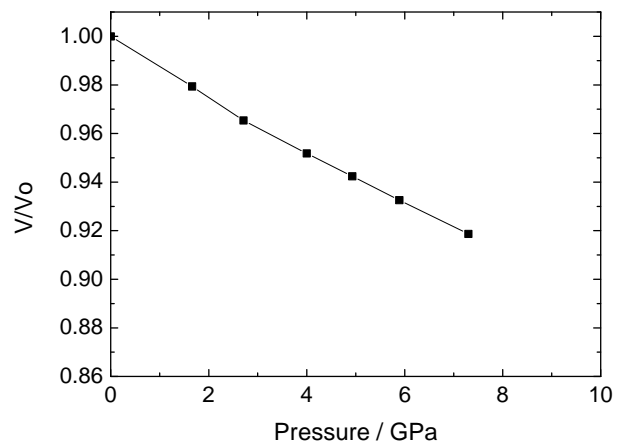


Fig.2. Volume change of Mg<sub>2</sub>Si as a function of pressure. Bulk modulus was determined by Birch-Murnaghan equation to be 53.1 GPa.

が 4.00 GPa で生じることが明らかとなった。また、Mg<sub>2</sub>Si の体積弾性率は、Birch-Murnaghan の式により  $B_0=53.1$  GPa,  $B_0'=3.76$  と求められた。

\* mori@das.ous.ac.jp