

Mg₂Si の高压合成と結晶構造

High-pressure Synthesis and Crystal Structure of Mg₂Si

森嘉久^{1,*}, 貝原裕司¹

¹岡山理科大学理学部, 〒700-0005 岡山市北区理大町 1-1

Yoshihisa Mori^{1,*} and Yuji Kaihara¹

¹Okayama University of Science, 1-1 Ridai, Kita-ku, Okayama, 700-0005, Japan

1 はじめに

Mg₂Si は中温領域にゼーベック係数のピークを有する N 型半導体の熱電材料で, その構成元素が環境にやさしい元素であるため, 近年活発に研究・開発が進んでいる. しかしながら Mg₂Si の合成は, その Mg₂Si の融点(1358 K)と Mg の沸点(1363 K)が高温領域で近接しているために非常に困難である. そこで我々は, 高压技術を活用して Mg₂Si の合成を試みている. 本研究の目的は, 出発原料の Mg と Si 粉末から Mg₂Si が高压下で合成される様子を高温高压 XRD 実験で明らかにすることである.

2 実験

高温高压 XRD 実験は NE5C ビームラインの MAX80 装置を使用した. 試料は Mg 粉末(粒径~50 μm)と Si 粉末(粒径~150 μm)の混合試料で, その試料を BN カプセルに封入した. 中央位置には熱電対を配置し, 対称位置に圧力評価のための NaCl と MgO の混合粉末を置いた.

実験は, 常温常圧の状態からまず圧力を 1 GPa まで昇圧し, 温度を徐々に上げながら 973 K まで昇温した後, 常温常圧に戻すプロセスで, 随時 XRD 実験を行った.

3 結果および考察

高温高压 XRD の結果を Figure に示す. 常温(300 K)での回折線は出発試料の Mg と Si 回折線として指数付けが出来た. 1 GPa で加熱すると 573 K で既に Mg₂Si が合成されていることが分かる. 常圧における合成実験では[1], Mg₂Si の合成温度は 823 K であったが, それよりも低い合成温度であり, 圧力によって反応が促進されたと考えられる. 更なる温度上昇で Mg と Si のピークが減少するとともに Mg₂Si の回折線強度は増加した. Mg の融点以上の 973K では, 50keV 辺りにブロードなピークが存在しており, Mg の一部が液体状態になるとともに, 未反応の Si も少し残っていることが分かった. その後, 常温に戻すと, Mg₂Si はクエンチされたが, 未反応物としての Si や Mg からの回折線も見られた. 常圧合成で問題となった MgO 酸化物からの回折線は, 出発原料においてすでに出現しているが, 温度上昇とともにそ

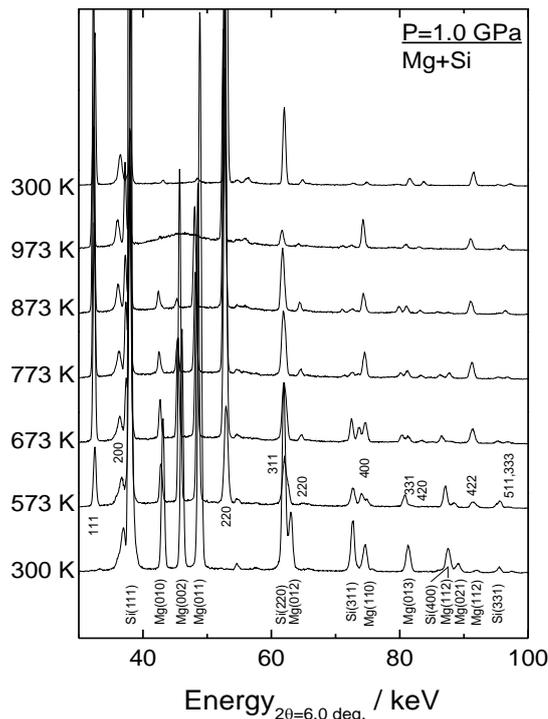


Figure EDX diffraction patterns of Mg₂Si under high-temperature at 1 GPa. The starting material was a mixture of Mg and Si powders. Mg₂Si was synthesized at 573 K, and a broad peak appeared at 973 K. The quenched sample included not only Mg₂Si but also MgO and Si.

これらの回折線強度が増すことはなかった. BN カプセルを使用した高压合成によって, 酸化を抑制したものと考えられる.

4 まとめ

1GPa における高温 XRD 実験により, Mg₂Si が合成される温度を明らかにした. この結果により, Mg₂Si の高压合成の条件を決定する上で多くの知見を与えることが可能となった.

参考文献

[1] Y. Mori *et al.*, *Journal of Electronic Materials*, accepted

* mori@das.ous.ac.jp