

Ag ドープした Mg_2Si の高温高压下におけるによる結晶構造 Crystal structure of Ag-doped Mg_2Si under high pressure

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

熱電材料は熱エネルギーを直接電気エネルギーに変換できる材料で、環境問題の対策の一つとして積極的に研究がなされている。中でも Mg_2Si 熱電材料は、その構成元素が人体にとって無害であることと、埋蔵量が豊富で、環境にやさしい熱電材料として有望視されている。しかしながら、Mg の沸点(1363 K)と Mg_2Si の融点(1358 K)が高温領域で隣接しているため、化学量論比通りの Mg_2Si を合成することが困難という課題がある。その問題を解決するため、高压封止技術を用いた試料の合成研究を行っている。高压合成は、試料体積を確保するためにピストンシリンダー装置を用いるが、その合成条件を決めるためには、放射光を用いた高压 XRD 実験が有用である。そこで本研究課題の目的は、高压合成における合成条件を高压 XRD 実験により求めることであり、これまでの実験により Mg_2Si 高压合成するための最適な合成条件を明らかにしてきた[1]。

一方、高効率な熱電モジュールを作製するためには n 型と p 型双方の Mg_2Si が必要であるが、この材料の場合、安定した p 型 Mg_2Si が報告されていない。これまで Ag ドープにより不安定ながらも p 型 Mg_2Si が合成されたことが報告されているので、安定した p 型 Mg_2Si を高压技術により合成することを目的とし、本研究課題で最適な高压合成条件を探索するために、高压 XRD 実験を行った。

2 実験

高压 XRD 実験は NE5C ビームラインの MAX80 で行った。試料としては高純度 Mg_2Si の粉末あるいは、Mg と Si の混合粉末に 5% の Ag 粉末を混ぜたものを準備し、BN カプセルに封入したものをパイロフェライト製の圧力セル内に入れた。実験手順としては初めに 1 GPa まで昇圧し、その後温度を 50 K おきに出発原料の回折線が消失するまで昇温しながら、XRD 実験を行った。

3 結果および考察

高純度 Mg_2Si に Ag ドープした試料の高压 XRD 実験の結果は、温度の上昇に伴い、Ag の回折線が減少することはなく、むしろ 723 K 辺りから Mg_2Si の分解により Si や MgO の回折線が出現した。Ag の回折線は 873 K でも残っていた。また AgMg が昇温とともに合成され、クエンチした試料にも Si とと

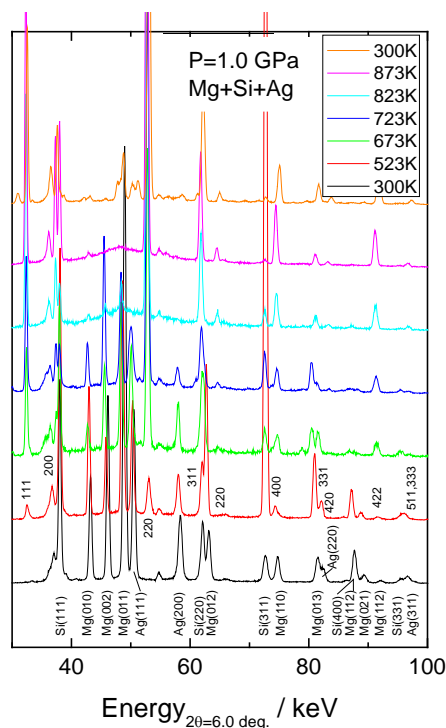


図1 : Mg, Si, Ag 混合粉末の高压 XRD 実験結果. Mg_2Si は 523K で合成されているが、Mg の回折線が消失する温度は 873K になる。

もに存在した。一方、Mg と Si の混合粉末に Ag ドープした試料の高压 XRD の結果を図 1 に示す。523 K ですでに Mg_2Si が合成されており、その温度は Ag をドープしていない場合よりも低い温度であった。Mg や Ag による回折線の強度は温度上昇により減少し、873 K でほぼ消失した。クエンチ試料には Mg_2Si 以外に AgMg や MgO なども含まれていた。

4 まとめ

Ag をドープした Mg_2Si の高压合成をする場合、 Mg_2Si の粉末試料から合成するのは困難であり、Mg と Si, Ag の混合粉末を高压合成することにより合成できることが明らかとなった。ただし、その合成温度によって、未反応物あるいは MgO などの酸化物や AgMg などの合成物が出るので、最適な合成温度を探す必要がある。

参考文献 [1] 森嘉久, 貝原裕司, *Photon Factory Activity Report 2012*, #30 (2013) B.

* mori@das.ous.ac.jp