

TI系熱電材料の3次元原子配列イメージと原子ゆらぎ : 蛍光X線ホログラフィーによる研究

細川伸也^A、三村功次郎^B、八方直久^C、胡雯^D、林好一^D

^A広島工大工、^B大阪府大工、^C広島市大情報、^D東北大金研

TIを含む3元系である TlInSe_2 は、熱起電力の非常に大きな半導体的性質を持つため、熱電材料として期待されている。その原子構造は、左下図に示すように、 InSe_4 の作る鎖状の枠のすきまをTI原子が埋めるとされているが、そのTI原子の位置は温度降下によって InSe_4 枠との位置関係が変わり、ノーマル、インコメンシュレート、コメンシュレートと相転移していきとされ、電子状態を大きく変化させている。本研究では、室温のインコメンシュレート相において、TI $L\alpha$ 蛍光X線ホログラフィー測定を行い、TI原子のまわりの3次元原子配列イメージを構築した。右下図は、その ab 面での実験結果で、○の位置は図の中心に位置するTI原子に隣接が期待される原子の位置を示す。In原子は期待される位置にはっきりとしたイメージが見いだされたが、TI原子のイメージ強度は非常に小さい。X線の散乱能はTIがInと比べて大きいので、この実験結果は、TI原子の位置のゆらぎが非常に大きいことを示している。また、他の面に存在するはずのSe原子の像は、これまで見いだされていない。発表では、TI原子の位置ゆらぎとイメージ強度の関係について、理論計算の結果と比較しながら詳しく議論する。

この研究は、PF/BL6Cビームライン(課題番号:2007G573および2009G551)において行われた。

