

Bi₂Te₃ の bcc 構造への圧力誘起相転移

Pressure-induced phase transition of Bi₂Te₃ to the bcc structure

榮永茉利¹、大村彩子²、中山敦子²、石川文洋¹、山田裕³、中野智志⁴

¹ 新潟大院自然、² 新潟大超域、³ 新潟大理、⁴ 物質・材料研究機構

テルル化ビスマス (Bi₂Te₃) は常温常圧で三方晶系の結晶構造 (空間群 *R-3m*, I 相) をとり、室温付近で大きな熱電変換性能を示す物質である。Bi₂Te₃ は室温下 8、14 GPa でそれぞれ II、III 相へ転移する[1]。II 相では超伝導が発現し、超伝導転移温度 T_c は加圧に対して減少する。さらに加圧すると T_c は 11 GPa から大きく上昇し[2]、この変化は II 相と異なる超伝導相の形成を示唆する。そこで本研究では III 相の単相および、より高圧相の探索を目的として、PF BL-18C ($\lambda = 0.4840 \text{ \AA}$) で室温下 29.8 GPa までの X 線回折実験をおこなった。その結果、Bi₂Te₃ が 25.2 GPa で bcc 相に転移することを見出した[3]。

Fig. 1 に Bi₂Te₃ の加圧過程における X 線回折パターンを示す。加圧すると 8.41 GPa で II 相が現れ、14.5 GPa で I 相は消失して II、III 相の回折強度が増加する。また、この圧力では図中の矢印で示す角度に II、III 相と異なる高圧相からの反射が現れ、加圧に伴って回折強度が増加する。この新たな高圧相を IV 相とした。さらに加圧すると II、III 相の回折強度は減少し、III 相の単相を経ることなく 25.2 GPa で IV 相へと転移が完了する。得られた回折パターンは bcc 構造 (空間群 *Im-3m*) で指数付けでき、観測したピーク以外には反射は確認されなかった。そこで bcc サイトに Bi : Te = 2 : 3 の仮想原子を置いた構造モデルを仮定してリートベルト解析をおこなったところ、よく収束した。この結果から Bi₂Te₃ の IV 相は bcc サイトに Bi と Te が配列した固溶体のような構造であると推測できる。

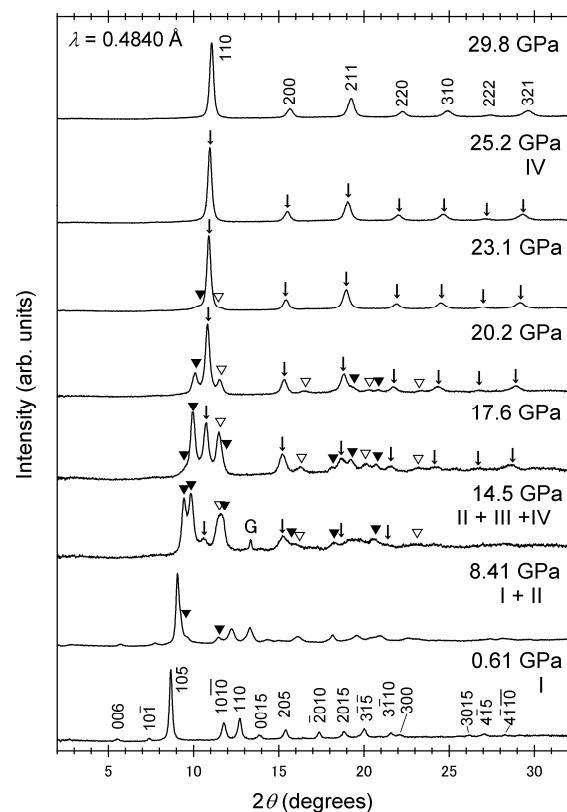


Fig.1. Bi₂Te₃ の室温高圧下の X 線回折パターン: 記号はそれぞれ II 相(▼)、III 相(▽)、IV 相(↓)からの回折線を示す。

[1] A. Nakayama *et al.*, High Pressure Research **29** (2009) 245.

[2] M. Einaga *et al.*, J. Phys.: Conf. Series **215** (2010) 012036.

[3] M. Einaga *et al.*, Phys. Rev. B: Brief Report, accepted.