20a-A27-7

三元系 Si クラスレート $K_8Al_xSi_{46-x}$ の合成

Synthesis of ternary Si Clathrate $K_8Al_xSi_{46-x}$

物材機構[1]　シン シバ クマール[1]、○今井 基晴[1]

NIMS[1]　Shiva Kumar Singh[1], ○Motoharu Imai[1]

E-mail: IMAI.Motoharu@nims.go.jp

はじめに: 14 族クラスレート化合物は、14 族元素が籠状のフレームを作りその中にアルカリ金属及びアルカリ土類金属原子をゲストとして内包する特徴的な結晶構造を持つ化合物である。14 族クラスレートは、超伝導物質、熱電変換材料、太陽電池材料として興味がもたれている。我々は三元系Ｉ型 Si クラスレート $K_8Ga_8Si_{38}$ を合成しそれが半導体であることを示した[1]。材料としては、その物質が地球上に豊富に存在する元素から構成されることが好ましい。$K_8Ga_8Si_{38}$ を構成する元素 Si、K の地殻存在率は 2 位、8 位であり地殻中に豊富に存在するが、Ga のそれは 34 位であり、地殻中に豊富に存在するとは言い難い。そこで、我々は、Ga を地殻存在率 3 位である Al に置換した三元系 Si クラスレート $K_8Al_xSi_{38-x}$ の合成を試み、成功した。

実験: グローブボックス中で K-Al-Si 混合物を BN 坩堝に入れそれをステンレススチール容器に密閉した。この容器を電気炉で加熱することにより、粉末状試料を合成した。合成した試料は ICP 発光分析法、粉末 X 線回折法を用いて評価した。また粉末試料を放電プラズマ焼結法により焼結し、電子プローブマイクロ分析（EPMA）による組成決定、10 - 390K での電気抵抗測定を行った。

結果: 粉末 X 線回折パターンから、合成された試料は、単一相のＩ型 Si クラスレートであることが判明した。更に ICP 発光分析により、K、Al、Si はそれぞれ 19.4(4)、12.0(1)、68.3(7)wt.%であることが決定された。これらの結果から合成された試料は $K_8Al_7Si_{39}$ であると結論付けた。電気抵抗率は加熱とともに増加するという金属的な振る舞いを見せた。

［参考文献］

[1] M. Imai et al. Dalton Trans. **40**, 4045 (2011).

© 2014 年　応用物理学会