

三元系 Si クラスレートの探索

Search for ternary Si Clathrates

物材機構¹ ○今井 基晴¹、シン シバ クマール¹NIMS¹ ○Motoharu Imai¹, Shiva Kumar Singh¹

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をもたれている。我々は三元系 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]。材料として化合物を使用する場合には、その化合物が地球上に豊富に存在する元素から構成されることが理想的である。 $K_8Ga_8Si_{38}$ 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。そこで本研究では 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、Si クラスレートの合成を試み

た。合成した試料は粉末 X 線回折を用いて評価した。また粉末試料を高温高压下で焼結しその電子プローブマイクロ分析 (EPMA) を行うことにより、組成を決定した。

結果：今回合成された試料の形状は粉末である。図に合成した試料の X 線回折パターンと K_8Si_{46} の計算した回折パターンを示す。これらの比較からほぼ単一相の Si クラスレートが合成されたことがわかる。EPMA の結果、合成された Si クラスレートは、 $K_8Al_xSi_{46-x}$ ($x \sim 7$) であることが分かった。

[参考文献]

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

