

高温高压下における Mg_2Si

Mg_2Si at high pressures and high temperatures

物材機構¹ ○今井 基晴¹、井深 壮史¹、磯田 幸宏¹

NIMS¹ ○Motoharu Imai¹, Soshi Ibuka¹, Yukihiro Isoda¹

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

近年、資源埋蔵量が多く、毒性の少ない低環境負荷型の元素から構成される物質が次世代の材料として注目されている。地殻中の元素存在度を大きい順に 10 元素表すと、O、Si、Al、Fe、Ca、Na、Mg、K、Ti、H となる。そこで、資源・環境の視点から新たな機能材料として、地殻存在度第 2 位である Si の化合物シリサイドが注目されている。その中で Mg_2Si が熱電変換材料として注目されている[1]。このため、熱電特性向上のための研究はもとより、その物性理解のための基礎研究が盛んに行われている。その一つとして、高温高压下での Mg_2Si の安定性に関する研究が行われてきている[2 - 4]が、 Mg_2Si の高温高压下での振る舞いの詳細は良く分かっていない。

本研究では高温・高压下において Mg_2Si がどのような振る舞いを示すか、X 線回折法を用いて、300–1500K、0–10GPa の温度圧力領域においてその場観察を行った。

高温高压下でのその場観察は、高エネルギー加速器研究機構 PF-AR-NE5C ビームラインでマルチアンビル型高压発生装置 MAX80 を用いて行った。X 線回折はエネルギー分散法で行った。試料は BN カプセルに充填した。温度はアルメル・クロメル熱電対を用いて、圧力は NaCl の格子定数から見積もった。室温で目標圧力まで加圧した後、加熱・冷却を行い、この過程で X 線回折によるその場観察を行った。

図 1 に今回のその場観察から得られた Mg_2Si の圧力 - 温度ダイアグラムを示す。 Mg_2Si は室温大気圧で逆蛍石型(anti- CaF_2 -type)構造を持つ。室温で 10GPa まで加圧しても、構造相転移は観測されなかった。3GPa 以上で加熱をすると高温高压 (HPHT) 相が出現する。この温度 - 圧力領域では一つの HPHT 相のみが存在する。当日は HPHT 相の結晶構造、物性についても議論する予定である。

[1] For example, V.K. Zaitsev et al., in Thermoelectrics Handbook, ed. by D.M. Rowe, Chap.29 (CRC Press, Boca Raton USA, 2006)

[2] P. Cannon, E.T. Conlin, Science **145**, 487 (1964).

[3] J. Hao et al., Solid State Commun. **149**, 689 (2009).

[4] J. H. Hao et al., Solid State Commun. **150**, 2299 (2010).

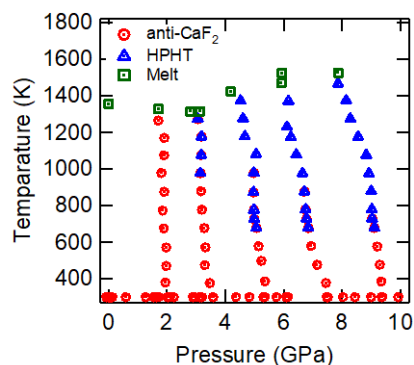


図 1 Mg_2Si の圧力 - 温度相図