

SrSi_{2-x}の結晶構造

Crystal structure of SrSi_{2-x}

物材機構¹、産総研² ○今井 基晴¹、藤久裕司²

NIMS¹, AIST² °Motoharu Imai¹, Hiroshi Fujihisa²

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

はじめに： SrSi₂ は SrSi₂ 型構造（立方晶）を持ち [1]、狭ギャップ半導体 [2]またはワイル半金属候補物質[3]と考えられているが、その詳細な物性はよく理解されていない。SrSi₂の物性を明らかにするためには高品質な試料が必要であり、そのためにはSr-Si相図が重要である。2004年に報告されたSr-Si相図では、Si濃度55～100 at. %で存在している化合物はSrSi₂のみであり、SrSi₂が室温相（立方晶、SrSi₂型構造）と高温相（正方晶、 α -ThSi₂型構造）を持つとされている[4]。我々がSi濃度55～100 at. %におけるSr-Si相図を実験的に検討した結果、このSi濃度範囲で二つの化合物SrSi_{2-x} ($0.16 \leq x \leq 0.34$) とSrSi₂が存在することが明らかになった[5]。1967年にはSr₄Si₇という化合物が報告されており[6]、これをSrSi_{2-x}で表すと $x = 0.25$ となる。今回発見されたSrSi_{2-x}はSi濃度的にはSr₄Si₇に対応している。

本研究ではSrSi_{2-x}の粉末X線回折（XRD）パターンを測定しSr₄Si₇のそれと比較を行った。

計算： 試料は、Sr と Si のモル比 (1-x_s) : x_s (x_s = 0.62, 0.63) の混合物をアーク溶解して合成した。組成は誘導結合プラズマ発光分析(ICP-OES), 電子線マイクロ分析(EPMA)で決定した。結晶構造は粉末 XRD 法 (Cu K α 線) により評価した。

結果： 図1に SrSi_{2-x}の粉末 X 線回折パターンを Sr₄Si₇の計算したパターンと共に示す。Sr₄Si₇は Si 原子が不規則に欠損した α -ThSi₂ 型構造を持つと報告されている[6]。SrSi_{2-x}と Sr₄Si₇の XRD パターンを比べると、この二つのパターンはよく似ている。しかしながら SrSi_{2-x}の XRD パターンは*で示したような 20.0° 以下で弱い強度のピークを持っている。これは SrSi_{2-x}の結晶構造が、規則的に Si 原子が欠損してできた α -ThSi₂ 型構造の超格子構造であることを示唆している。

当日は、SrSi_{2-x}の粉末 XRD パターンのリートベルト解析の結果について議論する予定である。

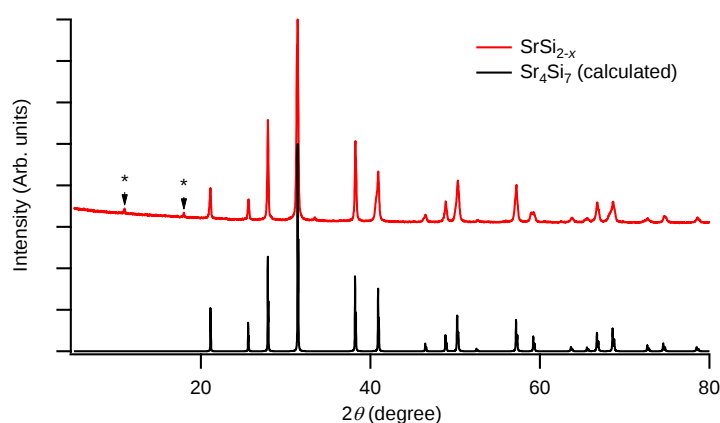


図1 SrSi_{2-x}の粉末 XRD パターンと Sr₄Si₇の計算した粉末 XRD パターン

参考文献

- [1] K. H. Janzon et al., Angew. Chem. Int. Ed. **4** (1965) 245.
- [2] M. Imai et al., Appl. Phys. Lett. **86** (2005) 032102.
- [3] S. M. Huang et al., Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A. **113** (2016) 1180.
- [4] A. Palenzona et al., J. Alloys Compd. **373** (2004) 214.
- [5] 今井基晴 第83回 応用物理学会 秋季学術講演会 東北大学、2022.
- [6] K. H. Janzon et al., Z. Naturforsch. B **22** (1967) 100.