

Si 濃度 66.7at. %付近での Sr-Si 系の相関係

Phase relationship of Sr-Si system around Si concentration of 66.7 at. %

物材機構¹ ○今井 基晴¹

NIMS¹ ○Motoharu Imai¹

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

はじめに： SrSi₂は300Kで比較的大きな無次元性能指数 ZT (0.15) を持つことから熱電変換材料として注目されている[1]。SrSi₂はSrSi₂型構造（立方晶）を持ち、ナローギャップ半導体[2]またはワイル半金属候補物質[3]と言われているが、まだよく解っていない。これを解明するためには高品質な試料が必要であり、高品質試料合成のためにはSr-Si相図は重要である。最新のSr-Si相図では、SrSi₂は室温相（立方晶）と高温相（正方晶、 α -ThSi₂型構造）が存在するとされている[4]。これはそれ以前の報告(1)正方晶SrSi₂は高温高压下のみで生成される[5]、(2)Si欠損 α -ThSi₂型構造を持つSr₄Si₇が存在する[6]、と相反している。

本研究では、アーク溶融法によりSr-Si合金Sr_{1-x}Si_xを合成し、ICP発光分析、電子プローブマイクロ分析、粉末X線回折により試料を評価した。その結果、大気圧ではSrSi₂は立方晶相としてのみ存在し、SrSi_{2-x}が正方晶相として存在することを示した。

実験：モル比(1-x_s):x_s (x_s=0.62, 0.64, 0.66)の Sr、Si の混合物をアーク溶融し、Sr_{1-x_s}Si_{x_s}を合成した。作成した試料の同定は、ICP 発光分析、粉末 X 線回折 (XRD)、電子プローブマイクロ分析 (EPMA) で行った。

結果：ICP 発光分析から決定した x_s = 0.62, 0.64, 0.66 の Si 濃度 x はそれぞれ 62.6、64.4、66.2 at.% であった。図 1 にアーク溶融試料の粉末 XRD パターンを SrSi₂ と Sr₄Si₇ の計算した回折パターンとともに示す。 $x = 62.6$ at.%のアーク溶融試料は正方晶相単相、 $x = 66.2$ at.%のそれは立方晶相単相であったが、 $x = 64.4$ at.%のそれは正方晶相と立方晶相の混合物であった。 $x = 64.4$ at.%の試料の反射電子 (BSE) 像から異なる Si 濃度の相が二つ存在することが判明した。このことから正方晶相と立方晶相は組成が異なる相であり、組成が同じな低温相と高温相でないことが明らかになった。

References

- [1] S. K. Singh et al., *Intermetallics* **127**, 106981 (2020) and references therein. [2] M. Imai et al., *Appl. Phys. Lett.* **86**, 032102 (2005). [3] S.M. Huang et al., *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* **113**, 1180 (2016). [4] A. Palenzona et al., *J. Alloys Compd.* **373**, 214 (2004). [5] M. Imai et al., *Chem. Mater.* **15**, 2543 (2003). [6] K. H. Janzon et al., *Z. Naturforsch. B22*, 100 (1967).

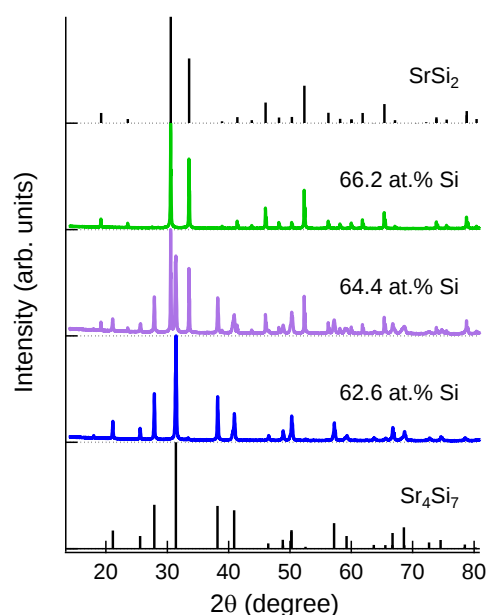


図 1 Sr_{1-x}Si_x の粉末 XRD パターン。