



## Mg<sub>3</sub>(Sb, Bi)<sub>2</sub> 粉末試料の構造評価

菅野 勉<sup>1</sup><sup>1</sup>パナソニック 先端研究本部

### 1. 背景と研究目的

Mg<sub>3</sub>Sb<sub>2</sub>系材料は熱エネルギーを電気エネルギーに変換できる熱電材料として研究されている。中でも Sb サイトを一部 Bi に置換し、さらに微量の Te をドーピングするなど材料組成を調整した。Mg<sub>3.2</sub>Sb<sub>1.5</sub>Bi<sub>0.49</sub>Te<sub>0.01</sub> は高い熱電変換性能を示すことが最近わかった<sup>1)</sup>。今回、BL5S2 での X 線回折測定により、Mg<sub>3.2</sub>Sb<sub>1.5</sub>Bi<sub>0.49</sub>Te<sub>0.01</sub> の構造に関する知見を得ることを目的に実験を行った。

### 2. 実験内容

測定試料の Mg<sub>3.2</sub>Sb<sub>1.5</sub>Bi<sub>0.49</sub>Te<sub>0.01</sub> 粉末は遊星ボールミル処理（400 rpm、4 h）した単体原料粉末を 600 °C、50 MPa で放電プラズマ焼結した試料を粉砕することによって得た。この粉末試料をリンデマンガラス製キャピラリ（キャピラリ径 0.1 mm）に充填し、室温での X 線回折測定を行った。X 線のエネルギーは 12.4 keV に調整した。CeO<sub>2</sub>（NIST SRM674b）の測定データから算出される X 線の波長の校正値は 1.000072 Å であった。

### 3. 結果および考察

Mg<sub>3.2</sub>Sb<sub>1.5</sub>Bi<sub>0.49</sub>Te<sub>0.01</sub> 粉末の X 線回折プロファイルを Fig.1 に示す。14° < 2θ < 17° の範囲にある 3 つのプロファイルの半値幅は 0.15° から 0.17° と比較的広がったものであった。このような広がったプロファイルの原因として、焼結後の

Mg<sub>3.2</sub>Sb<sub>1.5</sub>Bi<sub>0.49</sub>Te<sub>0.01</sub> 粉末中の結晶子に残存する歪みまたはミクロな組成の不均一性などが考えられる。Mg<sub>3.2</sub>Sb<sub>1.5</sub>Bi<sub>0.49</sub>Te<sub>0.01</sub> の格子定数は既に報告されている Mg<sub>3</sub>Sb<sub>2</sub>（空間群 P-3m1, a = 4.582 Å, c = 7.244 Å）と Mg<sub>3</sub>Bi<sub>2</sub>（空間群 P-3m1, a = 4.666 Å, c = 7.401 Å）の中間の値であり、Mg<sub>3.2</sub>Sb<sub>1.5</sub>Bi<sub>0.49</sub>Te<sub>0.01</sub> は概ね固溶していることがわかった。本試料は化学量論比よりも Mg を過剰に含むが、Mg 単体に由来する回折ピークは観測されなかった。過剰な Mg は Mg<sub>3</sub>(Sb, Bi)<sub>2</sub> の結晶構造の格子間サイトを占有する可能性も示唆されるが、今回測定した試料では過剰 Mg の占有位置を特定するには至らなかった。今後は試料の調整方法などさらに検討を深める予定である。

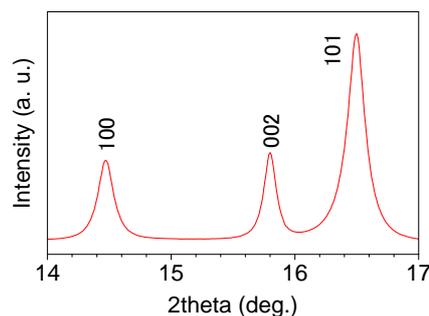


Fig.1 Mg<sub>3.2</sub>Sb<sub>1.5</sub>Bi<sub>0.49</sub>Te<sub>0.01</sub> 粉末の X 線回折プロファイル

### 4. 参考文献

1. Tamaki et al., *Advanced Materials* (in press)