



# (Ag, Cu)<sub>2</sub>(S, Se, Te) の MEM-Rietveld 解析用粉末 X 線回折実験

平田圭介, 邊韜均, Swapnil Ghodke, Saurabh Singh, 竹内恒博  
豊田工業大学

キーワード：非調和振動, 熱ダイオード

## 1. 背景と研究目的

(Ag,Cu)<sub>2</sub>(S, Se, Te)は, 100~200°Cに構造相変態を示す化合物半導体である. 低温相は規則相であり, 高温相は超イオン伝導を示す不規則相として知られている. 超イオン伝導を示す高温相において, 小さな熱伝導度が観測されることは自明であるが, 規則相においても, 高温相と同程度の熱伝導度を示す. さらに, 相変態時に, 格子熱伝導度に数度程度の幅しか持たない鋭いピークが現れる. また, そのピークは化学的不規則性を導入することで, 著しく抑制される. 格子熱伝導度におけるこれらの異常な挙動の起源を理解する為には, 詳細な結晶構造解析が必要であると考えられる. そこで, 本申請課題では, (Ag,Cu)<sub>2</sub>(S, Se, Te)に対して MEM-Rietveld 解析が行えるだけの高品質な粉末 X 線回折データを, 相変態温度を含む幅広い温度領域で収集をすることを目的に実験を行った.

## 2. 実験内容

(Ag,Cu)<sub>2</sub>(S, Se, Te)のバルク試料を, 自己発熱反応法により真空中にて合成した. それらを十分に粉碎した後に, φ0.2mm の石英キャピラリーに封入し, 21 keV の放射光を用いて室温から 300°Cまでの粉末回折パターンを BL5S2 にて測定した.

## 3. 結果および考察

測定した回折スペクトルの例として, 図 1 に Ag<sub>2</sub>Se の回折パターンを Rietveld 解析により得られた計算値と併に示す. 実験で得られた回折パターンは, 全て, Ag<sub>2</sub>Se で指数付け可能であり, 不純物を内包しない質の高い試料を作製できたことを確認した.

Ag<sub>2</sub>Se では昇温に伴い, 約 130°Cに於て低温相から高温相に相変態する. その際に高温相のイオン伝導性や構造相変態と関係する格子振動の非調和性が観測されるはずである. この非調和格子振動を MEM の電子密度分布から求める計画であり, 現在, 解析を進めている.

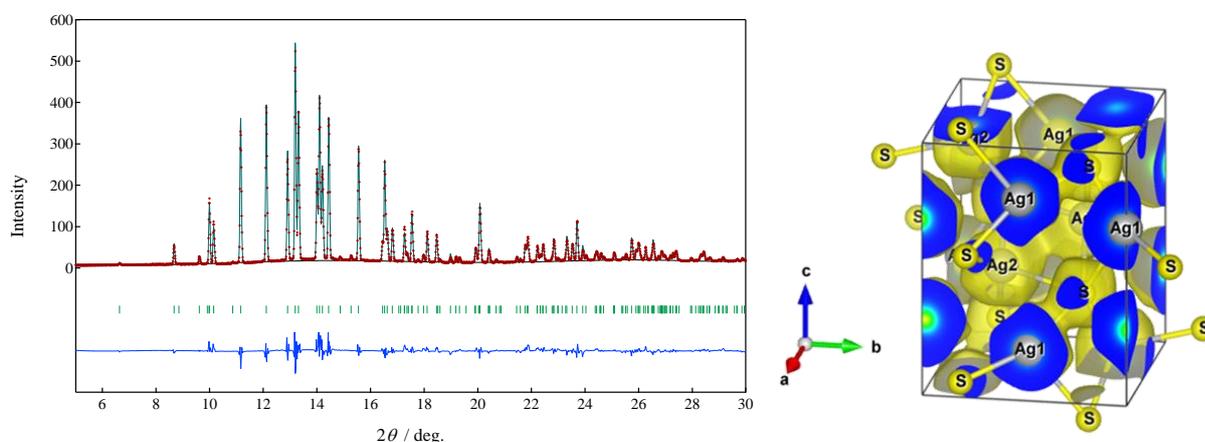


Fig.1 (左) Ag<sub>2</sub>Se の回折パターンと (右) 電子密度分布.