



硫化銀の粉末に対する X 線回折パターンの解析

佐藤 紅介, 平田 圭佑, 竹内 恒博
豊田工業大学

キーワード：硫化銀, フレキシビリティ, 熱電材料, 欠陥, 半導体

1. 背景と研究目的

Ag_2S は 450 K 付近で単斜晶(空間群: $P2_1/c$)から立方晶(空間群: $Im\bar{3}$)の構造相転移を示す材料である。その低温相(単斜晶に対応)では規則構造を有する化合物でありながら延性が発現する。^[1] 更に Ag_2S は半導体的な電子構造を持つため、フレキシブルな熱電デバイスへの応用が期待される。 Ag_2S の実用化への課題の 1 つは p 型の半導体が未報告な点である。p 型半導体の実現にはキャリア濃度の制御が必須であり、そのためには元々 Ag_2S に出来やすい欠陥の特定が重要である。 Ag_2S の欠陥を特定するため、本研究では Ag_2S および Ag の仕込み組成を変えた $\text{Ag}_{1.91}\text{S}$ と $\text{Ag}_{2.09}\text{S}$ の粉末に対して XRD 測定を行った。

2. 実験内容

全ての試料は溶融法で合成した。アニールにより得られた合金を液体窒素によって凍結粉砕し微細な粉末を得た。その後、 $\phi 0.5$ mm のボロシリケートキャピラリーに充填した。このキャピラリーに対して 20 keV の放射光 (BL5S2) を用いて室温での粉末 XRD を測定した。

3. 結果および考察

Ag_2S , $\text{Ag}_{1.91}\text{S}$, $\text{Ag}_{2.09}\text{S}$ の XRD パターンを下図に示す。図 a でどの XRD パターンも Ag_2S の主相に対応したピークを持つことが分かる。^[1] また、ピーク強度が大きい $2\theta=10^\circ\sim 20^\circ$ の範囲に着目すると、ピーク強度に違いが見えることが分かる。これは結晶構造因子の違いを反映しており、何らかの欠陥が生じている可能性が示唆された。 $2\theta=10^\circ\sim 20^\circ$ の範囲の低強度のピークに着目した結果が図 b である。図 b より、 $\text{Ag}_{1.91}\text{S}$ では 14° 付近、 $\text{Ag}_{2.09}\text{S}$ では 14° と 15° 付近で主相以外のピークが現れることが分かる。 $2\theta=15^\circ$ には Ag に由来するピークがあるので、 $\text{Ag}_{2.09}\text{S}$ では Ag 不純物の析出が示唆された。一方、 14° 付近にある共通のピークの同定およびリートベルト解析は現在実施中である。

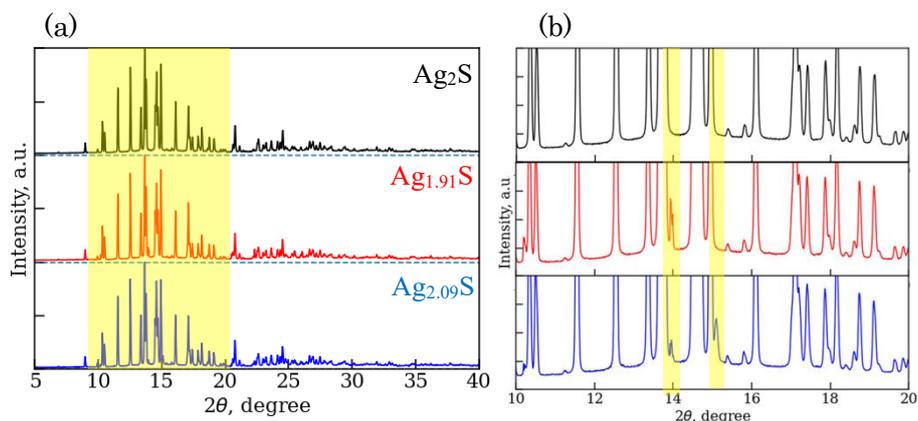


図 1 (a) 測定した XRD パターン。 $10^\circ \leq 2\theta \leq 20^\circ$ の角度領域を拡大し(b)に示した。

4. 参考文献

1. Shi *et al.*, Nat. Mater. **17**, 421 (2018).
2. Kim *et al.*, J. Phys. D: Appl. Phys. **54**, 115503 (2021).