



高分解能粉末X線回折測定による 第4元素ドーピングホイスラー型 Fe_2VAl の構造解析

宮崎 秀俊, 鎮目 邦彦
名古屋工業大学

キーワード : 熱電変換材料, ホイスラー型化合物, Fe_2VAl , 放射光粉末X線回折測定

1. 背景と研究目的

Fe_2VAl 化合物はホイスラー型構造を有し、環境負荷の低い熱電材料として注目されている。特に、元素ドーピングによりキャリア濃度およびバンド構造を精密に制御することで、高いn型およびp型の熱電性能が得られることが報告されている。しかしながら、ドーピングによる局所的な構造変化や原子配列の乱れが熱電特性に及ぼす影響については、未だ十分に明らかにされていない。そこで本研究では、 Fe_2VAl を母相とする各種ドープ試料を対象に、放射光粉末X線回折測定を実施し、ドーピングに伴う結晶構造の変化を高精度に解析することを目的とした。得られた回折データをリートベルト解析により詳細に検討することで、原子サイト占有率や格子定数の変化を明らかにし、電子構造変化との相関を議論することを目指した¹。

2. 実験内容

本研究では、 Fe_2VAl 、 $\text{Fe}_2\text{VAl}_{0.9}\text{Si}_{0.1}$ 、および $\text{Fe}_2\text{V}_{0.9}\text{Ti}_{0.1}\text{Al}$ の3種類のホイスラー化合物を対象として測定を行った。各試料は、高純度金属元素を所定の組成比で秤量し、アーク溶解法により合成した。得られたボタン状試料を粉碎後、ふるいにより粒径45 μm 以下に整粒し、測定に供した。粉末試料はリンデマンガラスキャビラリーに封入し、AichiSR BL5S2ビームラインに設置された高分解能粉末X線回折装置を用いて室温にて測定を実施した。測定波長は1.000 \AA とし、 CeO_2 標準試料による波長校正を行った。

3. 結果および考察

図1に Fe_2VAl 、 $\text{Fe}_2\text{VAl}_{0.9}\text{Si}_{0.1}$ 、および $\text{Fe}_2\text{V}_{0.9}\text{Ti}_{0.1}\text{Al}$ の放射光粉末X線回折パターンを示す。すべての試料において、明瞭なホイスラー構造由来の回折ピークのみが観測され、不純物ピークは認められなかったことから、単相試料であることが確認された。Siをドープした試料では主ピークが高角度側へシフトし、Tiドープ試料では逆に低角度側へシフトする傾向が見られた。これらのピークシフトは、Si原子がAl原子よりも小さい、またTi原子がV原子よりも大きいことに起因する格子収縮および格子膨張として理解できる。さらに、全てのピーク形状は対称的であり、ブロードニングや非対称性はほとんど観察されなかった。このことから、結晶性が高く、内部ひずみの少ない高品質な試料であると判断できる。今後は、得られた回折データに対してリートベルト解析を行い、格子定数およびサイト占有率の変化を定量的に求めることで、ドーピングに伴う構造変化と熱電特性の相関をより詳細に検討していく予定である。

4. 参考文献

- Y. Nishino, M. Kato, S. Asano, and U. Mizutani, Phys. Rev. B 63, 233303 (2001).

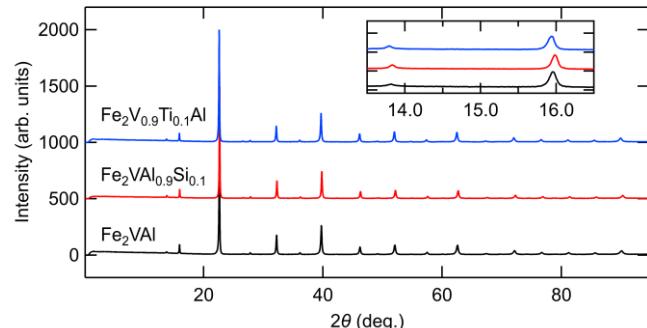


図1 Fe_2VAl 、 $\text{Fe}_2\text{VAl}_{0.9}\text{Si}_{0.1}$ 、および $\text{Fe}_2\text{V}_{0.9}\text{Ti}_{0.1}\text{Al}$ の放射光粉末X線回折パターン。