



硬 X 線 XAFS を用いたハーフホイスラー化合物の局所構造評価

宮崎 秀俊¹, 曾田 一雄²
1 名古屋工業大学, 2 名古屋大学

キーワード : 硬 X 線 XAFS, ハーフホイスラー化合物, 電子状態

1. 背景と研究目的

ハーフホイスラー化合物は、600 K 以上で高い熱電特性を示すため次世代熱電変換材料として注目を集めている。ハーフホイスラー化合物は、C1b 構造を有するが、空孔サイトに侵入型の原子欠陥が存在していることがこれまでの X 線回折測定により示唆されているものの[1]、他の測定により、この原子欠陥の存在が証明されたことはない。XAFS 測定は、特定原子周辺の構造変化を敏感に検出することができ、局所構造の評価に最適な実験手法である。そこで本研究では、XAFS 測定を用いたハーフホイスラー化合物の局所構造評価を行った。

2. 実験内容

アーク溶解法によって作製したハーフホイスラー化合物 ZrNiSn について、あいちシンクロトロン光センターBL5S1 において Zr-K 吸収端における硬 X 線 XAFS 測定を室温で行った。XAFS 測定は透過法によって行った。また、参照試料として Zr 薄片も同条件で測定を行った。

3. 結果および考察

Fig. 1 に本実験で得られた Zr 薄片(a)および ZrNiSn の Zr-K 吸収端における硬 X 線 XAFS の結果を示す。双方の試料とも 18000 eV 近傍に鋭い吸収端のピークが観測されており、明瞭な EXAFS 振動が観測された。XAFS 解析ソフト Athena を用いた暫定的な構造解析の結果、ハーフホイスラー化合物における Zr 原子周辺では、完全結晶と異なる局所的な構造の変化が生じていることが明らかになった。今後は、第一原理計算により原子欠陥が存在する際の安定な結晶構造を考慮し、解析を進めることにより、XAFS によるハーフホイスラー化合物の局所構造評価が可能かどうか検証を進める。

4. 参考文献

1. H. Miyazaki *et al.*, Materials Transactions **55**, 1209-1214 (2014).

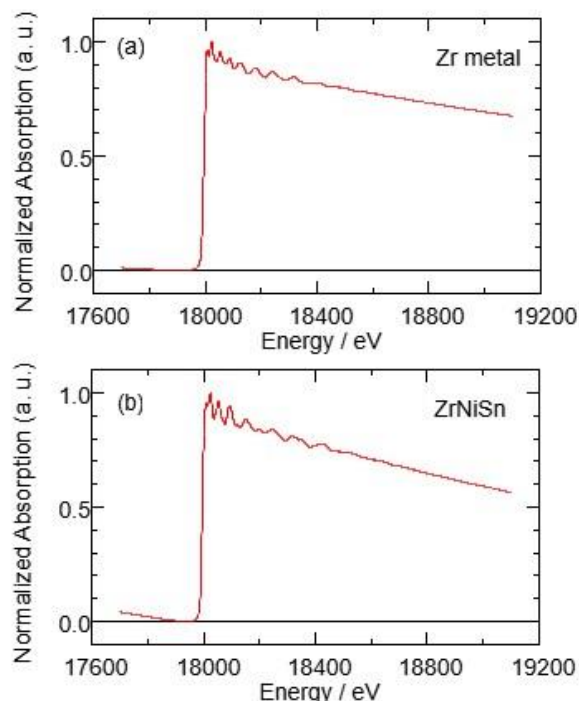


Fig. 1 Zr 薄片(a)および ZrNiSn の Zr-K 吸収端における硬 X 線 XAFS の結果