

## 概要

鉄シリサイドには、3 種類( $\alpha$ 相:  $\text{Fe}_2\text{Si}_5$ 、 $\beta$ 相:  $\text{FeSi}_2$ 、 $\epsilon$ 相:  $\text{FeSi}$ )あり、その結晶構造としてICDDコードの分類によると $\alpha$ 相として35-0822と73-1843、半導体の $\beta$ 相として20-0532と71-0642と73-0963および74-1285、そして $\epsilon$ 相として38-1397と76-1748、のように複数の異なる構造が知られている。しかし、これらの構造の詳細については明らかにされていない。

本実験では $\alpha$ 、 $\beta$ 、および $\epsilon$ の各相をアーク溶解によって作り、ディフラクトメータによる、X線回折法と背面反射ラウエ法により結晶構造の解析を行うことを目的としている。

## 1. はじめに

鉄シリサイドは、原料の鉄とシリコンが資源として豊富にあり、また不純物の添加量によって比較的自由に伝道型を制御することができ、p-n接合が容易にでき、さらに高温の大気中で使用できるなど、実用上の長所がある。

このような理由で、鉄シリサイドはケイ化物半導体の中でも経済性に富んだ非常に使いやすい熱電材料であり、実用化が期待されている。しかし、鉄シリサイドの基礎物性とわけ結晶構造に関しても、また熱電材料のとして実用化に関しても系統的な研究は十分に行われていない。

## 2. 実験方法

電子天秤を使用して鉄シリサイドを各希望組成に秤量した。次にアーク溶解炉によって、秤量した鉄とシリコンを溶解し、鉄シリサイドを合成した。得られた鉄シリサイドをアルミナ乳鉢により粉末にし、ディフラクトメータによりX線解析プロファイルを観察した。この観察結果を構造解析ソフトウェアJadeにかけて構造の同定を行った。

また、 $\text{Fe}_2\text{Si}_5$ を作るアーク溶解の際に“単結晶と思われる部分”が表面に見出されたので、その部分について背面反射ラウエ法により撮影しステレオ投影をして観察した。

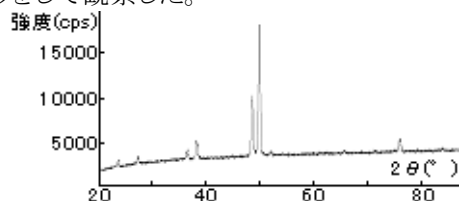


図1  $\text{Fe}_2\text{Si}_5$ のX線回折プロファイル

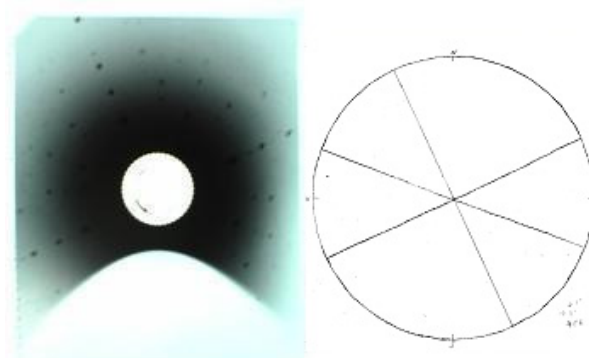


図2  $\text{Fe}_2\text{Si}_5$ のラウエ写真(左)とステレオ投影(右)

## 3. 結果

$\alpha$ 相と $\epsilon$ 相については、それぞれICDD35-0822と38-1397の一種類ずつしか確認できなかった。このことから、アーク溶解では、この各構造のものしか得られないと考えられる。

$\beta$ - $\text{FeSi}$ は原料を単に溶解しただけで、熱処理を行わないと合成できないということが知られている。これは、 $\alpha$ 相と $\epsilon$ 相の混合相から $\beta$ 相に変化する包析反応を必要とするからである。本実験においても $\alpha$ 相と $\epsilon$ 相の混合相のみが観察された。これらの混合相についても、やはり35-0822と38-1397の一種類ずつしか存在しないことが確認できた。

“単結晶と思われる部分”が表面に見出された $\alpha$ 相のラウエ写真では、ラウエ斑点の中心から同じ距離離れた部分をつなげると正方形になるといった対象性が見られ、正方晶である事が確認された。

## 4. 今後の発展

$\alpha$ 相と $\epsilon$ 相の混合相に熱処理を加えて $\beta$ 相に変え、X線回折プロファイルをとる必要がある。

また、 $\alpha$ 相のラウエ写真は撮れたので、今後は $\beta$ 相、および $\epsilon$ 相を背面ラウエ法によってそれぞれ投影し、 $\beta$ 相が斜方晶、 $\epsilon$ 相が立方晶であることを確認する必要がある。

## 文献

- [1] 小島 勉, “高温熱電半導体 $\text{FeSi}_2$ の熱電特性に関する研究,” 博士学位論文, p2, 平成元年