

NiSi 合金の熱膨張率測定 ～WPPF 法による格子定数精密化～

はじめに

格子定数は、結晶構造の基本単位となる単位格子の一辺の長さ(a 、 b 、 c)と、そのなす角度(α 、 β 、 γ)を規定する定数です。実測の粉末X線回折プロファイルのピーク位置と初期構造から格子定数の精密化を行うと、温度条件や固溶体組成の異なる金属やセラミックスのわずかな格子定数の変化を調べることができます。ここではNiSi 粉末の熱膨張について調べるために、赤外線加熱高温装置 Reactor X を用いて高温X線回折測定を行い、WPPF法を用いて各測定温度における格子定数精密化解析を行いました。

測定・解析例

図1には、各温度で測定したX線回折プロファイルを示します。昇温に伴い、ピークが低角度側、もしくは高角度側にシフトしていることがわかります。低角度側へのピークシフトは格子面間隔の広がりを示唆します。各ピークのシフトする方向、またシフト量が一律でないことから、NiSiの結晶軸 a 、 b 、 c の熱膨張率は一律ではなく、また熱膨張係数が負の軸があることが考えられます。図2には、各温度に対する格子定数のプロットを示します。解析の結果、 a 、 b 、 c 軸の熱膨張が異方性を示すこと、また、熱膨張率が一定ではなく、なだらかな曲線を示すことがわかりました。一方で、単位胞体積は直線的に増加することがわかりました。

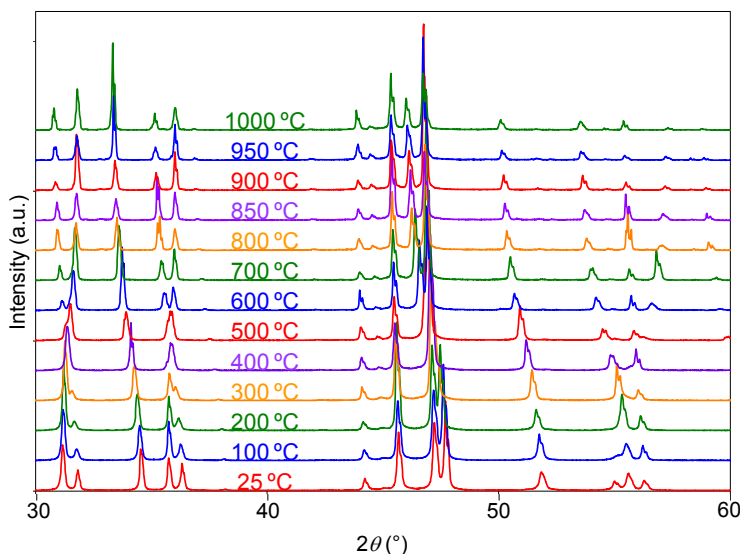


図1 各温度で測定されたNiSi粉末のX線回折プロファイル

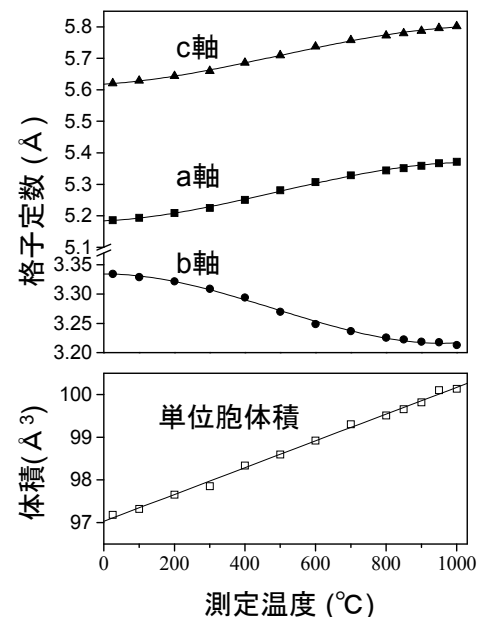


図2 各温度に対するNiSiの格子定数のプロット

<NiSiの初期構造>

空間群: Pnma
 格子定数: $a = 5.18 \text{ \AA}$ 、 $b = 3.33 \text{ \AA}$ 、 $c = 5.62 \text{ \AA}$
 $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$

推奨装置

- ▶ 全自動水平型多目的X線回折装置 SmartLab
- ▶ 赤外線加熱高温装置 Reactor X