

# 中性子回折による Ca,Sr-La-Co 系 M 型フェライトの金属イオンのサイト分布解析

## Estimation of Site Distribution of Metal-ions in Ca,Sr-La-Co-M-type Ferrites by Neutron Diffraction

尾田 悦志<sup>1)</sup> 小林 義徳<sup>1)</sup> 井川 直樹<sup>2)</sup> 深澤 裕<sup>2)</sup> 山内 宏樹<sup>2)</sup>  
 Etsushi ODA<sup>1)</sup> Yoshinori KOBAYASHI<sup>1)</sup> Naoki IGAWA<sup>2)</sup> Hitoshi FUKAZAWA<sup>2)</sup> Hiroki YAMAUCHI<sup>2)</sup>

<sup>1)</sup>日立金属磁材研 <sup>2)</sup>原子力機構

六方晶 M 型マグネトプランバイト構造を有するフェライト  $Sr_{1-x}La_xFe_{12-x}Co_xO_{19}$  ( $x=0\sim 0.35$ ) および  $Ca_{0.5}La_{0.5}Fe_{10.4-y}Co_yO_{19}$  ( $y=0.20\sim 0.35$ ) の中の各構成元素の占有サイトを粉末中性子回折パターンの Rietveld 解析により解析し、各組成毎の構造モデルを数種類にまで限定することができた。

**キーワード**：中性子回折, Rietveld 解析, SrLaCo 系フェライト, CaLaCo 系フェライト

### 1. 目的

SrLaCo 系および CaLaCo 系フェライトは六方晶マグネトプランバイト構造 (M 型) を有するフェライト (組成式:  $SrFe_{12}O_{19}$ , 空間群:  $P6_3/mmc$ ) の  $Sr^{2+}$  の一部または全てを  $La^{3+}$  および  $Ca^{2+}$  で、 $Fe^{3+}$  の一部を  $Co^{2+}$  で置換した組成であり、 $SrFe_{12}O_{19}$  よりも高い飽和磁化および磁気異方性を有することから高性能フェライト磁石材料として実用化されている[1][2]。これらの磁気特性の向上は La, Ca および Co 置換により M 型の結晶・磁気構造が変化したことが原因と考えられる。本実験では SrLaCo 系および CaLaCo 系フェライトにおける元素置換による磁気特性変化と結晶・磁気構造変化との関係を明らかにするため、中性子回折データの Rietveld 解析により各構成元素の占有サイトを決定することを目的とする。

### 2. 方法

測定試料は  $SrCO_3$ ,  $CaCO_3$ ,  $La(OH)_3$ ,  $Fe_2O_3$ ,  $Co_3O_4$  粉末を  $Sr_{1-x}La_xFe_{12-x}Co_xO_{19}$  ( $x=0\sim 0.35$ ) および  $Ca_{0.5}La_{0.5}Fe_{10.4-y}Co_yO_{19}$  ( $y=0.20\sim 0.35$ ) になるように秤量し、純水を溶媒とするボールミルで 4h 混合した。得られた混合原料を乾燥後、1523K で 20h、大気中で仮焼成して、測定用の粉末試料を得た。

中性子回折には JRR-3 の HRPD を用いた。Ge(331) のモノクロメータを用い、中性子の波長は 0.1823nm、コリメータは  $6'-40'$ -sample- $6'$  とした。測定  $2\theta$  は  $2.50\sim 162.40^\circ$  で  $\Delta 2\theta = 0.05^\circ$  とした。試料ホルダーはバナジウム製の円筒 (直径 15mm) を用いた。測定温度は室温とした。得られた回折データを RIETAN-FP および VESTA[3] を用いて Rietveld 解析を行った。

### 3. 研究成果

SrLaCo 系および CaLaCo 系フェライトともに組成を連続的に変化させることで、組成と各構成元素の占有サイトとの関係を系統的に調査でき、両組成系における各構成元素の占有サイトと占有率を特定した確からしい構造モデルとして、考える 100 種類以上のモデルから各組成毎に数種類にまで限定することができた。

### 4. 結論・考察

中性子回折により構造モデルの候補を数種類に限定できたが、中性子回折の解析結果からのみでは得られた各モデルの可能性として優位性に差が少なく、最終的な構造モデルを特定するには確度が十分でない。別途 Spring-8 や PF で測定を実施済みの XAFS や X 線回折の解析結果を中性子回折の解析に相補的に利用し、解析の確度と精度を向上させることで構造モデルの特定を行い、SrLaCo 系および CaLaCo 系フェライトにおける磁気特性向上の原因解明に繋げる予定である。

### 5. 引用(参照)文献等

- [1] Y. Ogata et al.: IEEE Trans. Magn. 35(1999)3334-3336.
- [2] 小林義徳, 細川誠一, 尾田悦志, 豊田幸夫: 粉体および粉末冶金 55 (2008) p541-546.
- [3] F. Izumi and K. Momma: Solid State Phenom. 130(2007)15-20.