

課題番号 :2016B-E10
 利用課題名 (日本語) :高エネルギーX線回折を用いたペロフスカイト型酸フッ化物の局所構造解析
 Program Title (English) :Local structure analysis of perovskite-type oxyfluorides
 利用者名(日本語) :勝又 哲裕¹⁾, 乙部 嵯稀¹⁾, 米田 安宏²⁾
 Username (English) :T. Katsumata¹⁾, S. Otake¹⁾, Y. Yoneda²⁾
 所属名(日本語) :1) 東海大学大学院理学部, 2) 原子力機構物質科学研究センター
 Affiliation (English) :1) School of Science, Tokai University 2) Materials Sciences Research Center, JAEA
 キーワード:ペロフスカイト、酸フッ化物、局所構造、2体相関関数

1. 概要 (Summary)

強誘電体である BaTiO₃、KNbO₃ に酸フッ化物、フッ化物を固溶させた固溶体、(1-x)BaTiO₃-xKTiO₂F、(1-x)KNbO₃-xKMgF₃ を合成し、異種陰イオンドーピングに伴う、相転移挙動、結晶構造の変化について調べた。その結果、これら固溶系では、少量のフッ化物イオンの添加に伴い、結晶構造、相転移温度、誘電物性が大きく変化することが明らかとなった。さらに、異種陰イオンのドーピングが結晶構造に与える影響を詳細に検討するために、ペロフスカイト型酸フッ化物、0.98KNbO₃-0.02KMgF₃、K₃TiOF₅ の局所構造解析を行った。

2. 実験(目的,方法) (Experimental)

カップ型多軸回折計を用いて、(1-x)KNbO₃-xKMgF₃、K₃TiOF₅ について、15K, 150K, 300K の各温度で粉末X線回折を測定し、さらに、測定データを基に2体相関関数(PDF)を算出した。

3. 結果と考察(Results and Discussion)

0.98KNbO₃-0.02KMgF₃ の 300K での X 線回折データについて、菱面体晶 (空間群 *R3m*)、斜方晶(空間群 *Amm2*)でリートベルト解析を行った結果を図 1 に示す。菱面体晶の構造モデルで良くフィッティングでき、0.98KNbO₃-0.02KMgF₃ は室温で菱面体晶であることが明らかとなった。固溶体の端成分である KNbO₃ は 300K で斜方晶であることから、KMgF₃ を 2%程度固溶させることで、構造が変化することが明らかとなった。X 線回折データより得られた PDF について、リートベルト解析から求められた結晶構造モデルを基にフィッティングした結果を図 2 に示す。PDF では 1.85Å、2.11Å と 2 種類の B イオン・O イオン間距離が観察されているが、リートベルト解析から得られた構造モデルでは 2.0Å 程度の 1 種類の結合しか再現

されない。このことは、0.98KNbO₃-0.02KMgF₃ が平均構造からだけでは評価できない局所構造を有していることを示唆している。今後、解析を進め、PDF を再現できる構造モデルの構築を試みる。

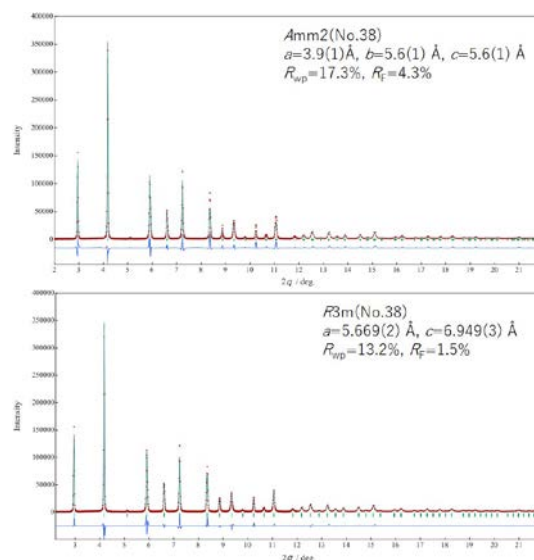


Fig.1 Results of Rietveld refinement.

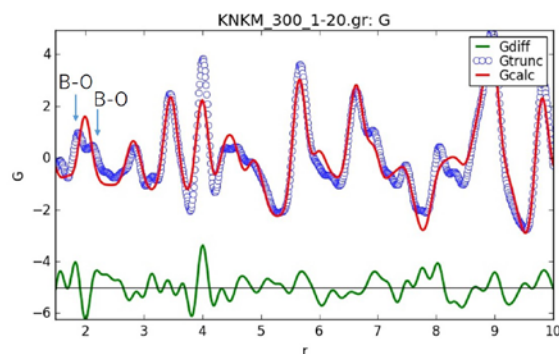


Fig.2 Observed and calculated PDFs.

4. その他・特記事項 (Others)

なし。