

課題番号 : 2017B-E04
 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⁾, 米田 安宏²⁾
 Username (English) : T. Katsumata¹⁾, 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

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)

ペロフスカイト型酸フッ化物は ABO_2F の化学式を持ち、O、Fイオンは陰イオンサイトに無秩序に分布している。一方、粉末X線回折の結果より、これら化合物ではA、Bイオンに組み合わせによって局所構造が変化することが推測された。そこで、A、Bイオンの組み合わせが異なる、 $PbFeO_2F$ 、 $BaFeO_2F$ 、 $SrFeO_2F$ 、 $BaInO_2F$ の4種類の酸フッ化物について、二体相関関数(PDF)解析を行い、その局所構造の違いについて調べた。その結果、 $SrFeO_2F$ 、 $BaInO_2F$ ではAイオン方向への陰イオンの変位、 $BaFeO_2F$ ではBイオン方向への陰イオンの変位が観察された。このことから、 $BaFeO_2F$ 、 $SrFeO_2F$ 、 $BaInO_2F$ の平均構造はいずれも立方晶で大きくかわらないものの、その局所構造は、A、Bイオンの組み合わせによって大きく異なることが明らかとなった。

2. 実験 (Experimental)

カップ型多軸回折計を用いて、 $PbFeO_2F$ 、 $BaFeO_2F$ 、 $SrFeO_2F$ 、 $BaInO_2F$ について、15K、300Kでの粉末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)

図1に、本測定から得られた、 $BaFeO_2F$ 、 $SrFeO_2F$ の15KでのPDFを示す。 $BaFeO_2F$ では、 2\AA 近傍のBイオン-陰イオン間の相関を表すピークがブロードになっているのに対し、 $SrFeO_2F$ では、 $2\sim 3\text{\AA}$ 近傍のAイオン-陰イオン間の相関を反映するピークがブロードになっていた。また、 $BaInO_2F$ についても、 $SrFeO_2F$ と同様の傾向が観察された。リートベルト解析の結果から、 $BaFeO_2F$ ではFeイオンの off-center 位置への変位が示唆され、一方、 $SrFeO_2F$ 、 $BaInO_2F$ では陰イオンの off-center 位置への変

位が示唆されており、これらリートベルト解析の結果はそれぞれの化合物の局所構造の違いを反映したものであることが明らかとなった。今後、PDFについて解析を進め、各化合物におけるイオンの変位方向、変位量などについて明らかにする予定である。

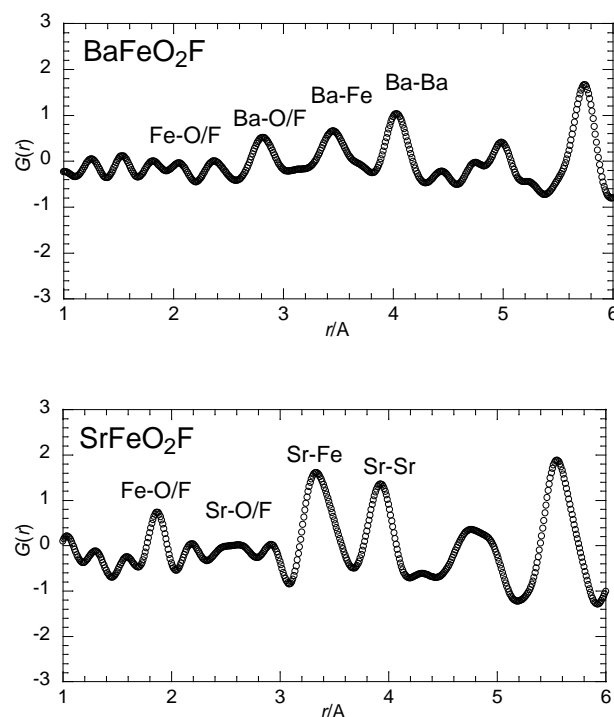


Figure 1 PDF of $BaFeO_2F$ and $SrFeO_2F$ at 15 K

4. その他・特記事項 (Others)

なし。