



XANES によるランタノイド化合物の 局所構造解析

朝倉博行

名古屋大学シンクロトロン光研究センター

1. 測定実施日

2013年8月7日 10時 – 18時30分 (2シフト), BL5S1
2013年10月1, 2, 16, 17, 24, 30日 10時 – 18時30分 (2シフト), BL5S1
2013年10月24, 29日 10時 – 18時30分 (2シフト), BL5S2
2013年10月31日 10時 – 18時30分 (2シフト), BL5S1
2013年11月20日 10時 – 18時30分 (2シフト), BL5S1
2014年2月6日 10時 – 18時30分 (2シフト), BL5S1
2014年3月4日 10時 – 18時30分 (2シフト), BL5S1

2. 概要

様々なランタノイド(Ln)複合酸化物の Ln L₁, L₃-edge XANES スペクトルに見られる特徴的な構造と Ln の局所構造に一定の相関を見いだした.¹

3. 背景と研究目的

報告者はこれまでに Nb, Mo, Ta, W, Re 複合酸化物の XANES スペクトルに見られる特徴的な構造が局所構造との間に相関を示す, すなわち XANES スペクトル解析から局所構造に関する情報が得られることを見いだした. 本研究では Ln 複合酸化物においても, Ln L₁, L₃-edge XANES スペクトルと局所構造に一定の関係が

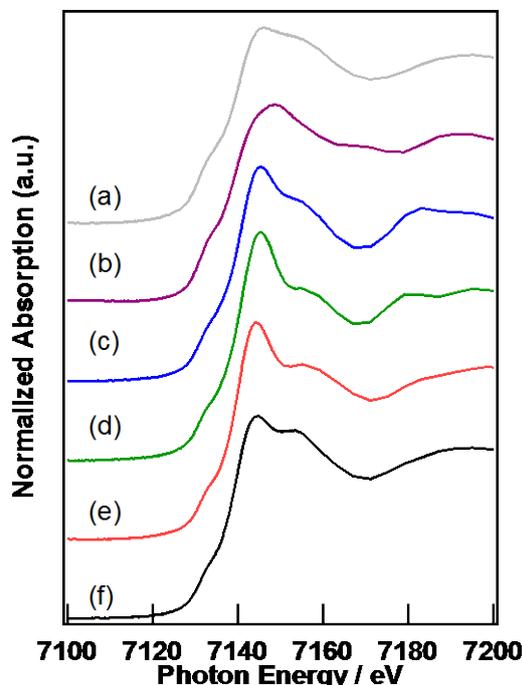


Figure 1 Nd L₁-edge XANES spectra of Nd complex oxides: (a) Nd₄PdO₇, (b) Nd₂CuO₄, (c) SrAlNdO₄, (d) SrCoNdO₄, (e) CoNdO₃, (f) MnNdO₃

見いだせるかどうか検討した。

4. 実験内容

様々な局所構造を持つ Pr, Nd, Sm 複合酸化物を調製し, 透過法で Pr, Nd, Sm L_1 , L_3 -edge XANES スペクトル測定を行った。

5. 結果および考察

例として, Figure 1 に様々な Nd 複合酸化物の Nd L_1 -edge XANES スペクトルを示す. $MnNdO_3$ は 7135 eV 付近に比較的小さなショルダーピークを示すのに対し, Nd_4PdO_7 ではより大きなピークを示した. 一方, Nd L_3 -edge XANES スペクトル(Figure 2) は互いによく似た形状を示すが, $MnNdO_3$ が比較的シャープなピークを示しているのに対して, Nd_4PdO_7 はややブロードなピークを示した. これらのスペクトルについて, カーブフィッティングを行うことで, L_1 -edge XANES のプレッジピークの面積と L_3 -edge XANES の半値幅を定量したところ, これら 2 つの値の間により相関が見られた. この結果は, 局所構造の変化に伴う Nd の d 軌道や p 軌道の混成状態の変化を反映しているものと考えられる. 詳細については, 以下に示す文献を参照されたい.

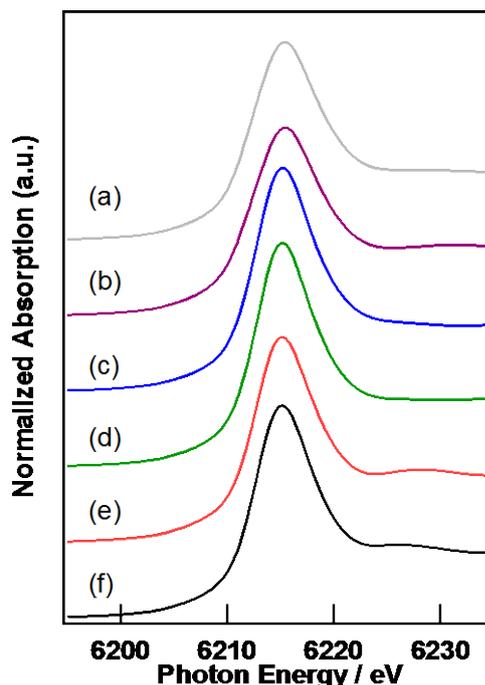


Figure 2 Nd L_3 -edge XANES spectra of Nd complex oxides: (a) Nd_4PdO_7 , (b) Nd_2CuO_4 , (c) $SrAlNdO_4$, (d) $SrCoNdO_4$, (e) $CoNdO_3$, (f) $MnNdO_3$

6. 今後の課題

ランタノイド系列後半の元素について同様の傾向が見られるか検討を行う。

7. 参考文献

¹ H. Asakura *et al.*, *Inorg. Chem.*, **2014**, *53*, 6048.; H. Asakura *et al.*, *J. Phys. Chem. C*, **2014**, accepted.

