



第二元素含有バーネサイト型マンガン酸化物の構造解析

田中 秀樹, 齋藤 亮太, 杉本 渉, 手嶋 勝弥

信州大学先鋭領域融合研究群先鋭材料研究所 (RISM)

キーワード：粉末 X 線回折, Rietveld 解析

1. 背景と研究目的

バーネサイト型マンガン酸化物は、 Mn^{4+} カチオンを含む MnO_6 八面体からなる層状構造を有しているが、その層状構造中における Mn^{3+} カチオンや空孔の存在によって電荷が不足するため、層間に補償カチオンを内包している¹⁾。この特異な構造ゆえに、バーネサイト型マンガン酸化物は多孔性材料や電極材料として広く研究されているが、他種金属カチオンのドーピングによってその特性を制御することが可能となるものと期待される。そこで本研究では、第二元素をドーピングしたバーネサイト型マンガン酸化物に着目し、その構造を粉末 X 線回折測定・Rietveld 解析により明らかとすることで、その特性制御のための指針を得ることを目的とする。

2. 実験内容

バーネサイト型マンガン酸化物は乳鉢で粉碎し、直径 0.3 mm のキャピラリーマークチューブ (リンデマンガラス) に封入した。粉末 X 線回折測定は、X 線波長：0.80020 Å (CeO₂ を用いた波長校正結果)、 2θ 範囲：0~95°、露光時間：135 秒/ショットにて行った。

3. 結果および考察

第二元素を含有しないバーネサイト型マンガン酸化物の Rietveld 解析結果を Fig. 1 に示す (図中の*は超格子構造による反射)。本試料の subcell の構造解析結果は、空間群： $Ccmm$ (63), $a = 5.16778$ Å, $b = 2.84596$ Å, $c = 14.1504$ Å, $R_{wp} = 8.16\%$, $S = 0.73$ となり、既報の構造¹⁾ に一致することを確認した。また、第二元素含有バーネサイト型マンガン酸化物については、現在、指数付け、Le Bail 法による全回折パターンフィッティングを進めており、空間群の候補を決定後、Rietveld 解析を実施する予定である。

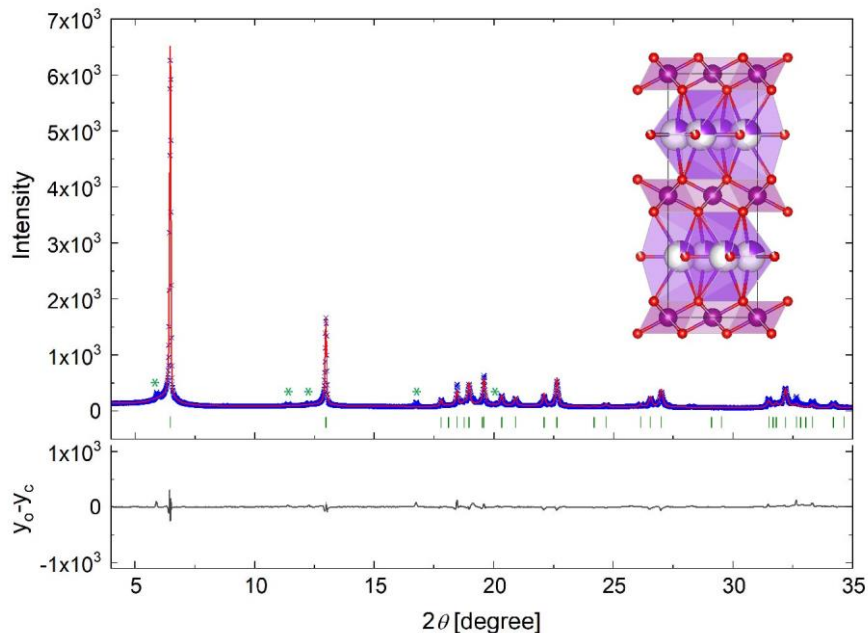


Fig. 1 バーネサイト型マンガン酸化物の粉末 X 線回折パターンと Rietveld 解析結果

4. 参考文献

1. A.-C. Gallot, V. A. Drits, A. Manceau, B. Lanson, *Microporous Mesoporous Mater.* **98**, 267-282 (2007).