



RTa₃O₉ の構造解析

松 平 恒 昭

一般財団法人 ファインセラミックスセンター

キーワード：遮熱コーティング、カチオン欠損型ペロブスカイト、ナノドメイン界面、熱伝導率

1. 背景と研究目的

航空機エンジンや発電用ガスタービン等の高温部材として用いられている Ni 基超合金の適用温度を高めるためには、部材表面に付与する遮熱コーティング (Thermal barrier coating, TBC) のさらなる低熱伝導化が不可欠である。我々は、結晶内において大きなフォノン散乱が期待できる氧化物群として、結晶学的に多くの欠損サイトを有するカチオンサイト欠損型ペロブスカイト酸化物 (RTa₃O₉) を対象とした研究を推進中である。その結果、LaTa₃O₉ に比して R のイオン半径が小さくかつ熱伝導率が大幅に低い YbTa₃O₉ においては、STEM-ABF により 2~3 nm の周期で濃淡が観察された[1]。

そこで、放射光 XRD により構造データを取得し、ナノドメイン界面形成の支配因子や結晶格子内におけるフォノン散乱や熱伝導特性に及ぼす影響について検討した。

2. 実験内容

YbTa₃O₉、YTa₃O₉、Hf-doped YTa₃O₉ を対象として、R(NO₃)₃・nH₂O と Ta₂O₅ 粉末とを所定の組成に配合の上、尿素加水分解法により RTa₃O₉ 粉末を調製した。なお、合成後の熱処理において、通常の徐冷 (5°C/min で降温) の他に、急冷処理 (1300°C から水冷) で得られる高温相試料も調製した。5S2 ビームラインを用いて、15 min 照射の条件で XRD データを取得し、得られた回折図形から構造解析を実施し、ナノドメイン界面形成の支配因子等について検討した。

3. 結果および考察

Fig.1 に、取得した X 線回折結果を示す。構造解析の結果、徐冷処理により得られる室温安定相は、YbTa₃O₉ は正方晶構造 (*P4/mmm*) であるのに対して、YTa₃O₉ では直方晶構造 (*P2₁am*) であった。また、YTa₃O₉ に Hf を添加することにより正方晶構造 (*P4/mmm*) が得られた。これらの正方晶構造 (*P4/mmm*) を有する 2 種類の RTa₃O₉ は、TEM により、共通して 2~3 nm 周期の規則的なナノドメイン界面が形成されていることが確認されている。一方、急冷処理により得られる高温相は、3 試料に共通して直方晶構造 (*P2₁am*) であることが明らかとなった。これら急冷試料の TEM 観察によれば、YbTa₃O₉、YTa₃O₉ はドメイン界面が認められないが、Hf-doped YTa₃O₉ では、規則的なナノドメインの存在が確認されている。高温で消失したナノドメイン界面の、急冷に伴う再形成過程が YbTa₃O₉ と Hf-doped YTa₃O₉ とで異なる可能性があり、今後、非弾性散乱実験等を行うことにより、フォノン散乱や熱伝導特性に及ぼす影響も明らかにしていく。

4. 参考文献

[1] T. Ogawa et al, spontaneously formed nanostructures in double perovskite rare-earth tantalates for thermal barrier coatings, Acta Mater., 216, 117152 (2021).

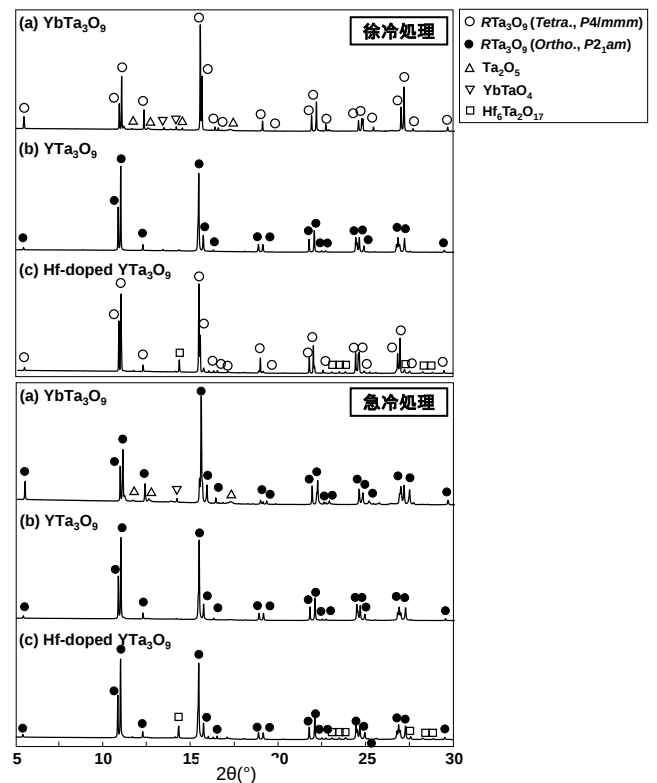


Fig. 1 RTa₃O₉ の X 線回折図形 (5S2 ビームライン)