



層状ペロブスカイト化合物の構造精密化

小林 亮¹, 石神悠太¹, 長田 実^{1,2}

1 名古屋大学 未来材料・システム研究所,

2 名古屋大学 未来社会創造機構量子化学イノベーション研究所

キーワード：層状ペロブスカイト，酸フッ化物，八面体回転

1. 背景と研究目的

Dion-Jacobson (DJ) 型といわれる層状ペロブスカイトは、近年、新しい機構での酸化物イオン伝導や強誘電性発現が確認され注目を集めている^[1,2]。その新しい機構の根源はペロブスカイト層を構成する配位八面体の回転にあり、層状化合物であることが特有の機能発現に寄与している^[3]。一方で、粉末に対するシンクロトロン X 線を利用した詳細な解析により、DJ 型層状ペロブスカイトの局所構造の再検討が進められている^[4]。本申請課題では、DJ 型層状ペロブスカイト $RbLnNb_2O_6F$ ($Ln = La, Pr, Nd$) の精密構造解析を試みた。これらの化合物は $P4/mmm$ に属するとして報告されているが^[5]、近年のほかの化合物に対する詳細な構造解析の結果からは、八面体が回転したより対称性の低い構造を有している可能性が示唆されている。さらに、酸フッ化物の構造を詳細に明らかにすることで、フッ化物イオンが局所構造に与える影響を解明し、今後の未踏材料探索への展開が期待される。

2. 実験内容

既報^[5]を参考に合成した $RbLnTiNbO_6F$ をキャピラリーチューブに充填し、BL5S2 において 15.0 keV の X 線を用いた回折測定を行った。

3. 結果および考察

対象試料は層状化合物であり、板状結晶として得られる。反射測定では配向の影響が強く観測されるが、本測定においては配向が見られないデータが得られていることが、二次元データにより確認された。Fig. 1 に、 $RbLaTiNbO_6F$ のリートベルトプロファイルを示す。既報の $P4/mmm$ での構造精密化を試みたところ、 R_{wp} は 10 % を下回ることはなく、 S も 3 以上と高い値を示した。ほかの試料においても同様であり、予想されるブラック反射位置にアサインしきれないピーク (図中矢印) があることから、これらの化合物が $P4/mmm$ に属していないことが示された。さらなる詳細な構造解析は現在実施中である。

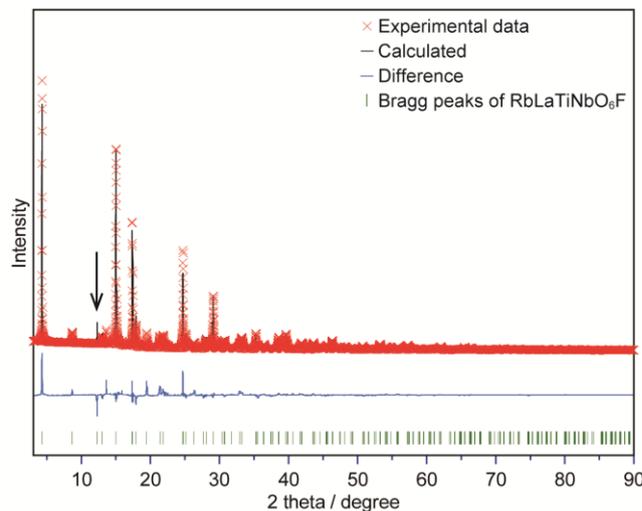


Fig. 1 Rietveld profile of $RbLaTiNbO_6F$.

4. 参考文献

1. W. Zhang, M. Yashima, *et al.*, *Nat. Commun.*, 11, 1224 (2020).
2. S. Morita, M. Osada, *et al.*, *J. Am. Chem. Soc.*, 146, 25211 (2024).
3. N. A. Benedek, M. A. Hayward, *Annu. Rev. Mater. Res.*, 52, 331 (2022).
4. Z.-T. Lu, H. Akamatsu, *et al.*, *Inorg. Chem.*, 63, 23914 (2024).
5. G. Caruntu, L. Spinu, J. B. Wiley, *Mater. Res. Bull.*, 37, 133 (2002).