



## 層状ペロブスカイト化合物の構造精密化

小林 亮<sup>1</sup>, 石神悠太<sup>1</sup>, 安江寛太郎<sup>1</sup>, 長田 実<sup>1,2</sup>

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，酸化物，酸フッ化物，八面体回転

### 1. 背景と研究目的

層状ペロブスカイト化合物は、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<sup>[1,2]</sup>。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<sup>[3]</sup>。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、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<sup>[4]</sup>。本課題では、層状ペロブスカイト  $K_2La_2Ti_3O_{10}$  および  $RbSr(Nb,Ta)_2O_6F$  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<sup>[5,6]</sup>が、多角的な解析から、八面体の回転に伴う対称性のより低い構造を有している可能性が示唆された。一連のより詳細な局所構造を達成することにより、今後の未踏材料探索への新たな展開が期待される。

### 2. 実験内容

既報<sup>[5]</sup>を参考に合成した層状化合物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が、本測定においては配向が見られないデータが取得できていることが、二次元データにより確認された。Fig. 1 に、 $K_2La_2Ti_3O_{10}$  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、 $R_{wp}$ : 8.86,  $R_p$ : 6.61,  $S$ : 1.67,  $R_B$ : 6.14,  $R_F$ : 3.93 と一定の良好なフィッティング結果が得られた。一方で精密化した構造では、 $TiO_6$  八面体の歪みが既報よりも大きくなっており、局所構造に違いがみられた。このことから本化合物の真の構造は、より対称性の低い空間群に属していることも考えられる。さらなる詳細な構造解析は現在実施中である。

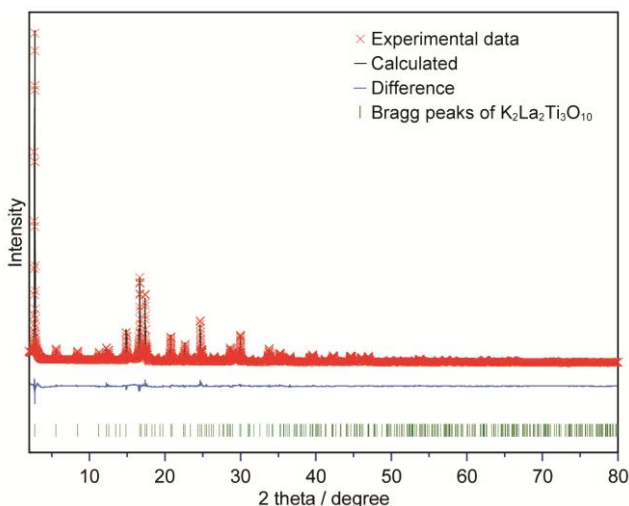


Fig. 1 Rietveld profile of  $K_2La_2Ti_3O_{10}$ .

### 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. Z. S. Gönen, B. W. Eichhorn, *et al.*, *Inorg. Chem.*, 45, 8736 (2006).
6. T. C. Ozawa, T. Sasaki, *et al.*, *Inorg. Chem.*, 52, 415 (2013).