

Eu_{0.8}Sr_{0.2}NiO₃ の放射光 X 線回折による精密構造解析 Structural analysis of Eu_{0.8}Sr_{0.2}NiO₃ by using synchrotron X-ray diffraction

赤堀迅, 小澤晴信, 宮武知範, 上原政智*

横浜国立大学大学院工学研究院

〒240-8501 神奈川県横浜市保土ヶ谷区常盤台 79-5

Jin AKAHRI, Harunobu OZAWA, Tomonori MIYATAKE and Masatomo UEHARA*

Department of Physics, Yokohama National University

79-5 Tokiwadai, Hodogaya-ku, Yokohama, Kanagawa 240-8501, Japan

1 はじめに

ニッケル酸化物は、その結晶構造・電子構造が銅酸化物高温超伝導体と似ていることから新超伝導体の候補物質として探索されている物質群である。2019年にはNd_{0.8}Sr_{0.2}NiO₂薄膜で超伝導が観測されたことが報告されている[1]。この報告を機に、Pr_{0.8}Sr_{0.2}NiO₂[2]、La_{0.8}Sr_{0.2}NiO₂[3]など様々な組成のニッケル酸化物において超伝導が観測された。しかし、これらの超伝導はすべて薄膜で観測されており、バルク体では超伝導化に至っていない現状である。

R_{0.8}A_{0.2}NiO₂ (R=La, Pr, Nd, Sm, Eu : A=Ca, Sr)は前駆体である R_{0.8}A_{0.2}NiO₃ を還元し、頂点酸素を脱離することで得られる。この際に、頂点酸素が残存することは超伝導化を妨げる要因であると考えている。現に薄膜では、基板によって生じる応力によって頂点酸素が脱離しやすいことが指摘されている[4]。

そこで、頂点酸素を効率的に脱離することを目的に(R_{0.8}A_{0.2})サイトの平均イオン半径を変化させ構造変化を調べた。(R_{0.8}A_{0.2})サイトの平均イオン半径の違いにより、NiO₆八面体の歪みや回転が引き起こされ、面内酸素と頂点酸素にポテンシャル差が生じることを期待している。本研究では、放射光を用いた構造解析により、Eu_{0.8}Sr_{0.2}NiO₃の面内酸素と頂点酸素のサイトポテンシャルを評価した。

2 実験

KEK-PFのBL-4B2に設置されている検出器多連装型軌道放射光粉末回折計を用い回折データを得た。実験は室温、波長λ=1.196524 Åの条件下で行った。

得られた回折データについて、プログラムRIETAN-FP[5]を用いてリートベルト解析を行い、VESTA[6]付属のプログラムMADELよりサイトポテンシャルを算出した。

3 結果および考察

図1に粉末回折パターンとリートベルト解析の結果を示す。この時、空間群はPbnm(No.62)であり、最終的にR_{wp}=10.276%でフィットしたデータが得られた。

また、精密化した原子座標を用いてVESTAでサイトポテンシャルを算出した。頂点酸素と面内酸素のサイトポテンシャルはそれぞれ、1.614 eVと1.640 eVであった。よって、頂点酸素が面内酸素よりも約0.03 eV高いサイトポテンシャルを有していることがわかった。このサイトポテンシャルの差が有意であるかを判断するには様々な(R_{0.8}A_{0.2})サイトのサイズの異なる物質の構造を調べる必要がある。

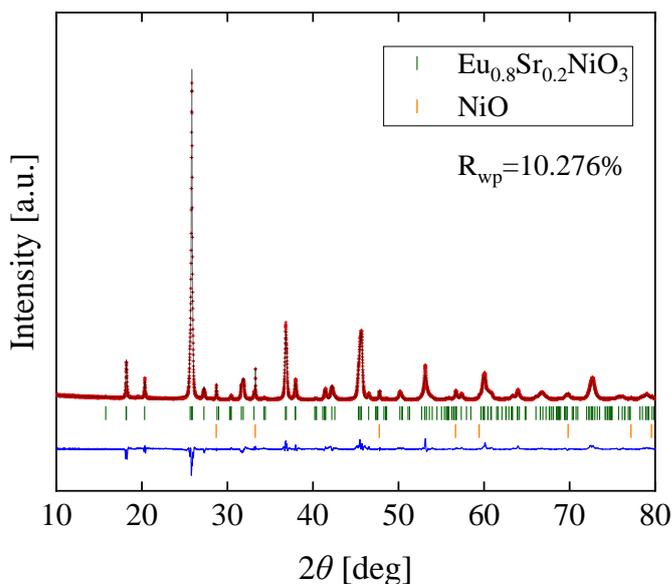


図1. Eu_{0.8}Sr_{0.2}NiO₃のリートベルト解析結果
赤のプロットは実測データ、黒の実線はフィッティング、青は残差を示す。

参考文献

- [1] D. Li *et al.*, Nature **572**, 624 (2019)
- [2] M. Osada *et al.*, Nano Lett. **20**, 5735 (2020)
- [3] M. Osada *et al.*, Adv. Mater. **33**, 2104083 (2021)
- [4] 長田礎, 固体物理 **57** 6, 345 (2022)
- [5] F. Izumi and K. Momma, Solid State Phenom. **130**, 15 (2007)
- [6] K. Momma and F. Izumi, J. Appl. Crystallogr. **44**, 1272–1276 (2011)

* uehara-masatomo-cf@ynu.ac.jp