

二重ペロブスカイト型 $\text{Ba}_2\text{NdSn}_{0.6}\text{Sb}_{0.4}\text{O}_{6-\delta}$ の結晶構造と酸化物イオン拡散経路

Crystal structure and the diffusion path of oxide ions of the ionic conductor $\text{Ba}_2\text{NdSn}_{0.6}\text{Sb}_{0.4}\text{O}_{6-\delta}$

○尾本和樹¹, 加藤浩輝¹, 八島正知^{1,2}, Paul J. Saines³, Brendan J. Kennedy³

1 東工大・院総理工 2 東工大・院理工 3 シドニー大・化学科

二重ペロブスカイト型酸化物 $A_2BB'O_6$ は、イオン伝導性などの多彩な物性を示す。 A はサイズが大きい陽イオン、 B と B' はサイズが比較的小さな陽イオンである。本研究では $\text{Ba}_2\text{NdSn}_{0.6}\text{Sb}_{0.4}\text{O}_{6-\delta}$ の放射光および中性子粉末回折測定を行い、 $\text{Ba}_2\text{NdSn}_{0.6}\text{Sb}_{0.4}\text{O}_{6-\delta}$ の結晶構造、および高温における構造変化を明らかにすることを目的とする。 $\text{Ba}_2\text{NdSn}_{0.6}\text{Sb}_{0.4}\text{O}_{6-\delta}$ の放射光粉末回折測定を PF の BL-4B₂ に設置された多連装粉末回折計により実施し、中性子粉末回折測定は JAEA の HERMES で行なった。測定した粉末回折データをリートベルト法(RIETAN-FP)により解析した。790 Kでの放射光回折パターンにおいて $2\theta = 46.5^\circ$ 付近の 440 反射の肩は $Fm\bar{3}m$ の単相で説明がつかず、2つの $Fm\bar{3}m$ 相の共存を示している (図 1 の x)。リートベルト解析は空間群 $Fm\bar{3}m$ の 2 相に基づいて行い、観測データと計算強度はよく一致した。 $\text{Ba}_2\text{NdSn}_{0.6}\text{Sb}_{0.4}\text{O}_{6-\delta}$ は二重ペロブスカイト型構造を有し、 $\text{Nd}_{0.915}\text{Sn}_{0.051}\text{Sb}_{0.034}\text{O}_{6-\delta}(\text{BO}_6)$ 八面体(黒色)および $\text{Nd}_{0.085}\text{Sn}_{0.536}\text{Sb}_{0.379}\text{O}_6(\text{B}'\text{O}_6)$ (灰色)八面体が a_p 軸、 b_p 軸および c_p 軸に沿って交互に規則配列している(図 2)。ここで下付添え字の p は擬ペロブスカイト格子を示す。790 K より高い温度域の格子定数の温度依存性を図 3 に示す。放射光 X 線粉末回折によって得られた格子定数と中性子粉末回折実験によって得られた格子定数は標準偏差 $\pm 3\sigma$ の範囲で一致した。

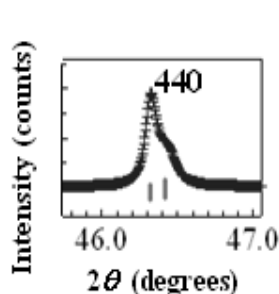


図 1. $\text{Ba}_2\text{NdSn}_{0.6}\text{Sb}_{0.4}\text{O}_{6-\delta}$ の放射光回折パターン (790 K)の一部

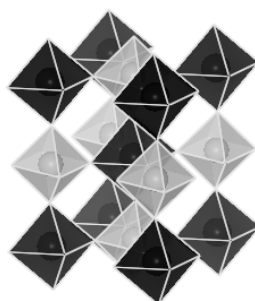


図 2. $\text{Nd}_{0.915}\text{Sn}_{0.051}\text{Sb}_{0.034}\text{O}_{6-\delta}(\text{BO}_6)$ (黒色)および $\text{Nd}_{0.085}\text{Sn}_{0.536}\text{Sb}_{0.379}\text{O}_6(\text{B}'\text{O}_6)$ (灰色)八面体を使って描いた $\text{Ba}_2\text{NdSn}_{0.6}\text{Sb}_{0.4}\text{O}_{6-\delta}$ の結晶構造(297 K)

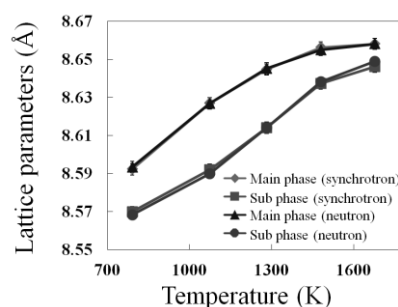


図 3. $\text{Ba}_2\text{NdSn}_{0.6}\text{Sb}_{0.4}\text{O}_{6-\delta}$ の格子定数の温度依存性

記入例

BL-0A

放射光 Synchrotron Radiation

表題は必ず英語表記も記入

筑波太郎¹、筑波次郎²

1 KEK-放射光、2 KEK-放射光 II

本文(14 ポイント)