

# 中性子回折による新複合アニオン化合物の結晶構造解析

東京工業大学理学院 藤井孝太郎, 八島正知

## 1. 序論

機能性セラミック材料は電気伝導性, 強誘電特性, 触媒能, 蛍光特性など多彩な性質を示す産業上でも重要な化合物である. セラミック材料の機能は構成する元素の性質だけではなく, 結晶構造とも密接な関係がある. そのため, 機能性セラミック材料の結晶構造を正確にかつ詳細に知ることは, その機能の要因を明らかにし, 次世代の材料開発につながる知見を与える. セラミック材料の多くは, アニオン(陰イオン)が酸素で構成される酸化物である. 近年, 異種の陰イオンを含む「複合アニオン化合物」が, より多彩な性質を示し, 革新的な実用材料への展開が期待されている. 本申請では, 新規に作製した機能性複合アニオン化合物の中性子回折データを測定し, 結晶構造解析を行う. その機能と構造の関係を明らかにし, 次世代の革新的機能性複合アニオン化合物を創製するための知見を導くことを目的とする.

## 2. 実験と解析

合成した複合アニオン材料は, バナジウム製のサンプルホルダーに充填し測定に用いた. 大気中で不安定な化合物については, グローブボックス中にて試料を取り扱った. 測定は, MLF BL20 iMATERIAにてダブルフレームモードで実施した. 予備測定から各試料の回折強度を調べ, 必要な計数時間を見積もったのち, 本測定を実施した. 試料は, リボルバー式の自動試料交換機を利用して自動的に交換した. 得られたデータについては, Z-codeによりリートベルト解析を行い進める予定である.

## 3. 結果

図1にある複合アニオン化合物について処理条件を変えて調製した試料の回折パターンを示す. 概ね同じパターンを示しており, 結晶構造は大きく変化していない様子がわかる. しかし, 詳細に見ると反射の位置や強度にわずかな違いが観測され, 処理条件の違いに起因するものと考えられる. 精密な構造解析から, 構造の違いについて今後調べていく予定である.

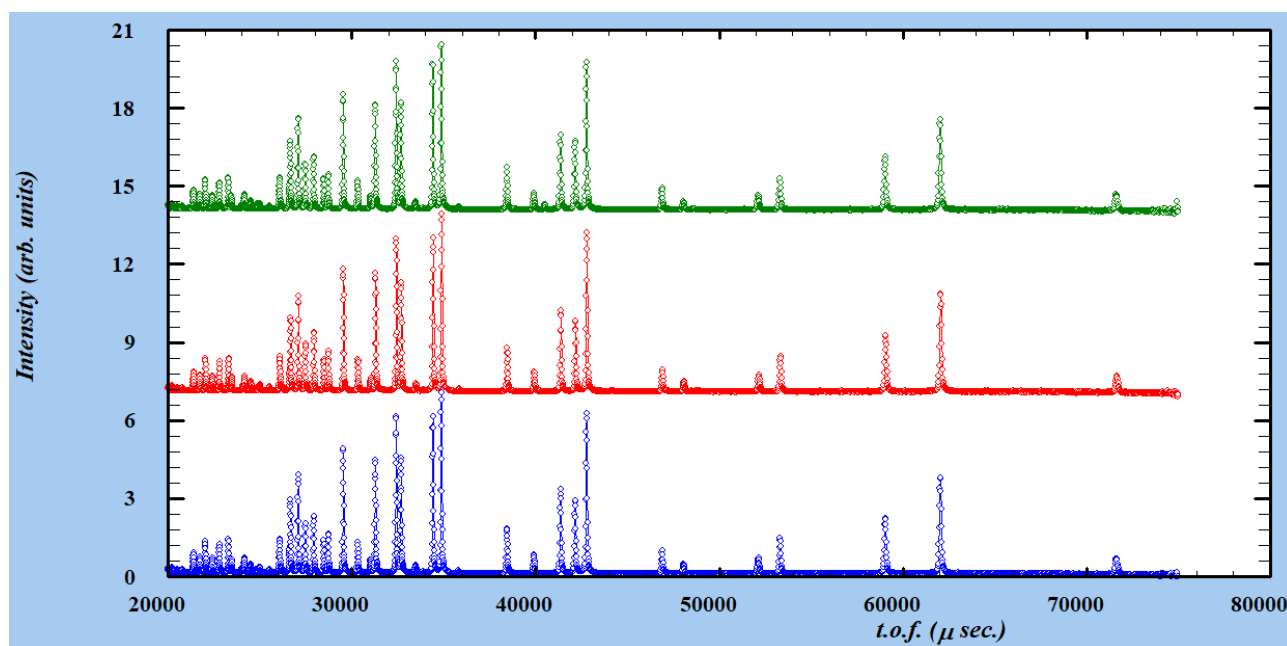


図1: 今回の実験で測定した複合アニオン化合物の回折パターン. 試料の調製条件に違いがある.