



XANES による ランタン化合物の局所構造解析

朝倉博行
名古屋大学シンクロトロン光研究センター

1. 測定実施日

平成 26 年 5 月 28 日 10 時 – 18 時 30 分 (2 シフト), BL5S1
平成 26 年 5 月 29 日 10 時 – 18 時 30 分 (2 シフト), BL5S1

2. 概要

あいち SR 硬 X 線ビームライン BL5S1 にて, 各種のランタン酸化物の La L_1 , L_3 -edge XANES スペクトルの測定を行った. その結果, La L_1 -edge XANES スペクトルに見られる特徴的なプレエッジピークの大きさ, La L_3 -edge XANES スペクトルのホワイトラインの半値幅と La の局所構造に一定の相関があることが示唆された. ⁽¹⁾

3. 背景と研究目的

Ti, V, Cr, Mn などの 3d 遷移金属元素の XANES スペクトルはその局所構造を反映して大きく変化することが知られている. 一方で, 希土類元素の XANES スペクトルは互いに似通ったスペクトルを示すことが多く XANES スペクトルと局所構造の相関についての系統的な検討はなされてこなかった. そこで, 我々は La 酸化物を例として, 希土類元素の XANES と局所構造に関する基礎的な検討を行った.

4. 実験内容

La 化合物の例として La_2CuO_4 , LaSrAlO_4 , La_4PdO_7 , LaCoO_3 , LaAlO_3 を固相法により合成し, XRD パターンから目的の化合物が得られていることを確認した. あいち SR 硬 X 線ビームライン BL5S1 において, これらの試料の La L_1 , L_3 -edge

XAFS スペクトル測定を行った。

5. 結果および考察

Figure 1 に各種ランタン化合物の La L_1 -edge XANES スペクトルを示す。いずれの化合物も 6275 eV 付近にプレッジピークを示し、 LaAlO_3 は比較的小さなピークを示すのに対して、 La_4PdO_7 は大きなピークを示した。また、Figure 2 に各種ランタン化合物の La L_3 -edge XANES スペクトルを示す。スペクトル形状にほとんど変化は見られないが、5490 eV 付近のホワイトラインにおいて、 LaAlO_3 の場合は比較的シャープなピークを示しているのに対して、 La_4PdO_7 はややブロードなピークを示した。これらのピークを定量的に解析した結果、La の配位数が大きくなるにつれて、La L_1 -edge のプレッジピーク面積および La L_3 -edge のホワイトラインの半値幅が共に減少していることがわかった。

6. 今後の課題

他の希土類元素の L-edge XANES スペクトルについても局所構造との関係を明らかにしていきたい。

7. 参考文献

- (1) H. Asakura *et al.*, *Inorg. Chem.*, 2014, 53, 6048–6053.

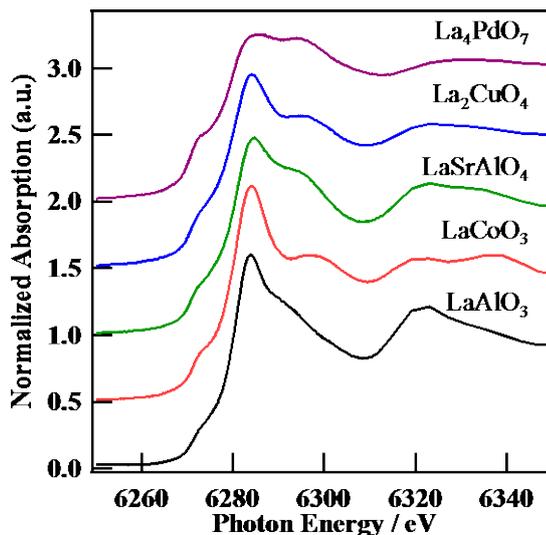


Figure 2 La L_1 -edge XANES spectra of various La oxides

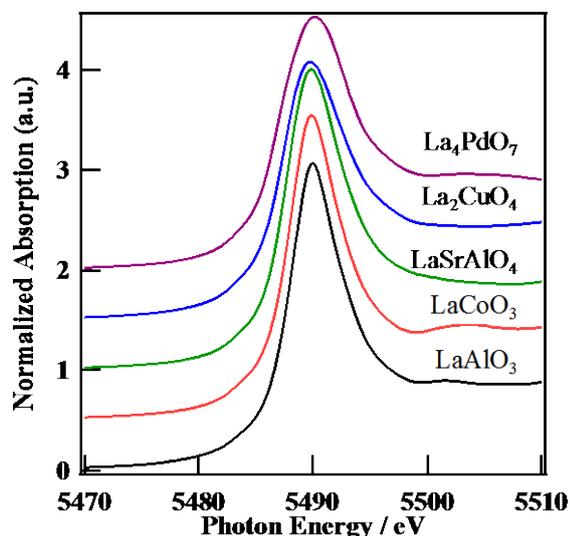


Figure 1 La L_3 -edge XANES spectra of various La oxides