所属：沼津工業高等専門学校・教養科

研究タイトル：

不定比性希土類マンガナイト化合物の創製



氏名：	小林美学 ／ KOBAYASHI Migaku	E-mail：	m.kobayashi@numazu-ct.ac.jp
職名：	教授	学位：	博士（工学）
所属学会・協会：	日本化学会		

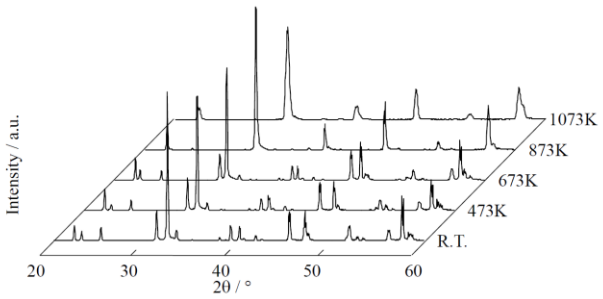
キーワード：	結晶，X 線回折，構造解析，構造相転移，不定比性化合物，無機化合物，セラミックス
技術相談 提供可能技術：	・X 線回折による構造解析（Rietveld 法） ・固相反応を利用したセラミックス化合物の新規合成

研究内容：不定比性希土類マンガナイト化合物の創製

技術分野：基礎物性

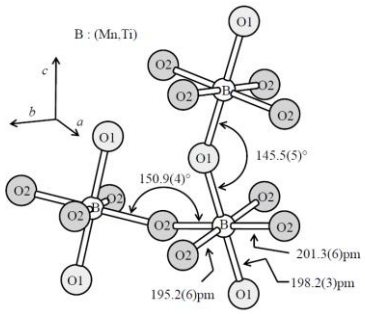
希土類元素とマンガンの酸化物である希土類マンガナイトは、Mn が混合酸化数をとりやすく、その構造も比較的自由度の高いペロブスカイト型構造をとりやすいため、比較的容易に一部に欠陥が生じた化合物や、原子の一部をイオン半径の近い他の原子に置換することができる。このようにして生じた化合物は、その化学式が簡単な整数比で表せないため、不定比性化合物と呼ばれる。

不定比性化合物では、組成を連続的に変化させることで、構造相転移温度や電気伝導度などの物性も連続的に変化させることができる。本研究では、組成を変化させた不定性化合物を合成し、粉末 X 線回折データを用いてその試料の構造解析（Ritveld 解析）を行うことで、磁性材料や電極材料に使われることが多いペロブスカイト型構造の組成と構造の関係について知見を得ることを目的としている。あわせて、その諸物性を調査することによって、新規材料の可能性も検討している。



Powder X-ray diffraction patterns of $La_{0.94}MnO_{2.91}$.

温度変化に伴う粉末 X 線パターン変化の例。この試料においては 673K から 873K の間に構造相転移が存在する事が，このパターン変化から読み取れる。



Distorted octahedron of $Ca_{0.67}Yb_{0.33}Mn_{0.33}Ti_{0.67}O_3$ around Mn and Ti ions.

構造解析した結果の例。酸素と Mn を含む B サイトの原子がジグザグに結合している様子や，B サイトを中心とする酸素八面体が歪んでいる様子がわかる。

研究者 PR・自己紹介

結晶構造を解析する際は、結晶モデルを片手に、パソコンが計算した値を見ながらあれこれと思いを巡らせます。地味な作業ではありますが、目では直接見えない世界が様々な手法で少しずつ姿を現してくることは、パズルを解くのに似たおもしろさがあります。

提供可能な設備・機器：

名称・型番（メーカー）	
X 線回折装置 X'Pert Powder (Panalytical)	
シリコニット炉 TM-K30 (シリコニット高温工業)	

教養科