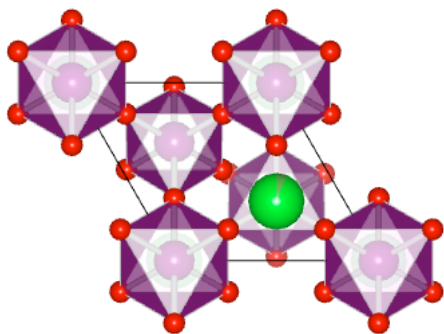


2012年1月5日(木) 作成

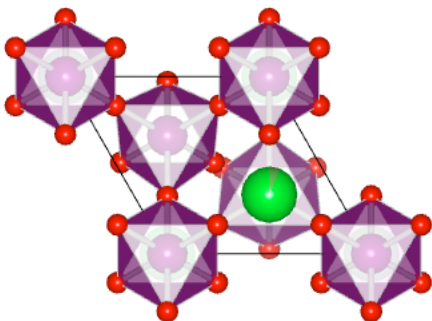
# 粒子統計理論の応用

## La<sub>0.03</sub>Sr<sub>0.97</sub>MnO<sub>3</sub> の構造

粒子統計理論を応用することにより粉末回折データから正確な結晶構造を推定できる新しい解析方法 (Ida-Izumi 法) が開発されました [1]。この方法を,  $\text{La}_x\text{Sr}_y\text{MnO}_3$  ( $x \sim 0.03$ ;  $y \sim 0.97$ ) という組成を持つ化合物の結晶構造解析に適用した結果の一部を紹介します。厳密な組成は確定していませんが, ここでは  $\text{La}_{0.03}\text{Sr}_{0.97}\text{MnO}_3$  と表記します。



(a)



(b)

Fig. 1 Projection of the crystal structure of  $\text{La}_{0.03}\text{Sr}_{0.97}\text{MnO}_3$  along  $c$ -axis optimized by (a) Rietveld and (b) Ida-Izumi methods.

Fig. 1 には  $\text{La}_{0.03}\text{Sr}_{0.97}\text{MnO}_3$  の粉末回折データから Rietveld 法と新しい構造解析法で導かれた結晶構造の投影図を比較しています。

この化合物中では Mn の価数は平均 +3.97 と考えられます。Rietveld 法で最適化された構造では、 $\text{MnO}_6$  配位八面体の大きさが不揃いで、二種類の Mn 原子に関する bond valence sum (BVS) が +2.97 と +4.39 という極端に不揃いな値になりました。一方で、Ida-Izumi法で最適化された原子座標から計算された BVS の値は二種類の Mn 原子について +3.82 と +3.90 という値で、形式的な価数とかなり良く一致しています。

## 参考文献

- [1] Ida, T. & Izumi, F. “Application of a theory for particle statistics to structure refinement

from powder diffraction data”, *J. Appl. Cryst.* **44**(5), 921-927 (2011)。

名古屋工業大学

セラミックス基盤工学研究センター

[井田 隆](#)