

ナノテクノロジー基盤領域研究交流会

'08-4-17

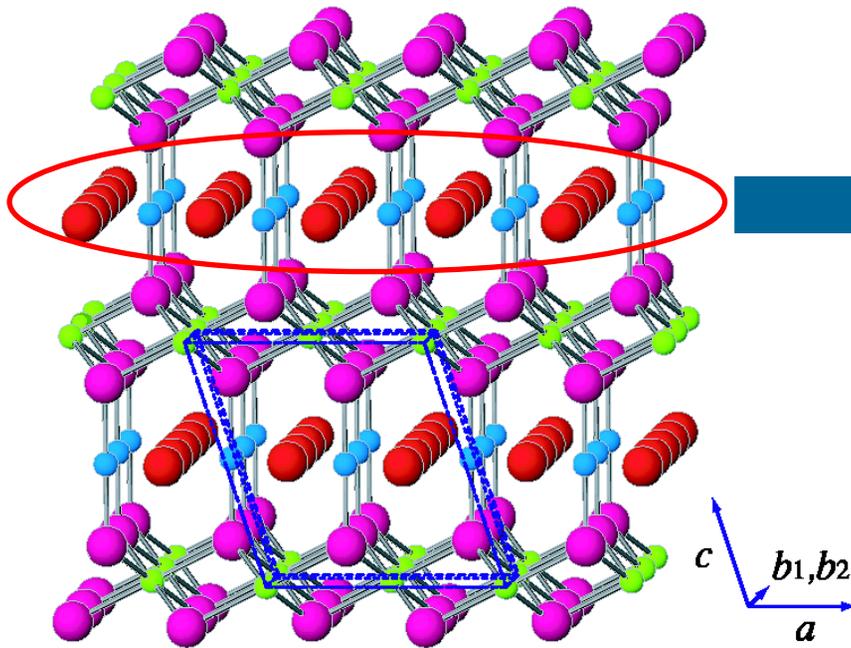
長周期・非周期構造の解析

道上勇一

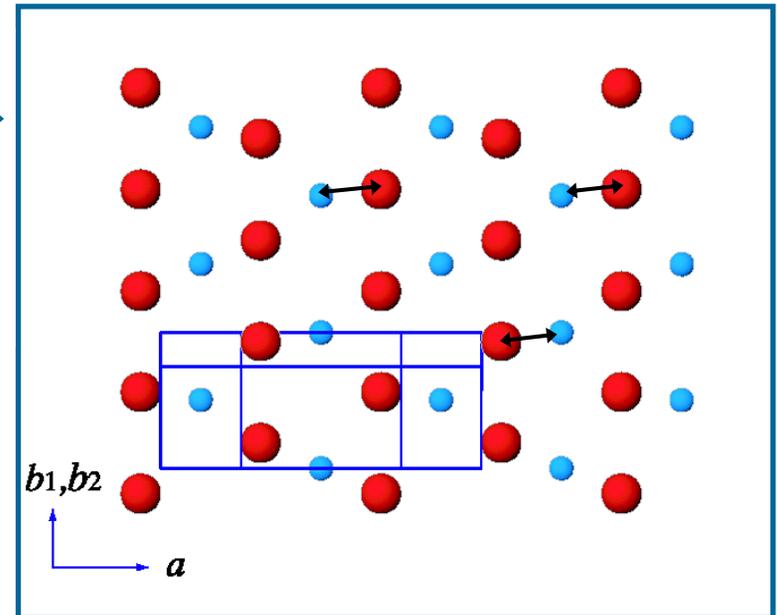
(量子ビームセンター 放射光解析グループ)

単斜晶系 (擬菱面体型) 構造の基本構造

(第一部分構造 + 第二部分構造)



M-O面 ($z=1/2$)の部分構造



第一部分構造($C_{2/m}$)に対して第二部分構造($C_{2/m}$)の原点を $(1/4, 1/4, 0)$ だけシフトして重ね合わせる

InO6八面体シートとMとO2の配列した面(M-O面)が c^* 軸方向に交互に積層

MとO2はb軸方向に異なった周期 (不整合)

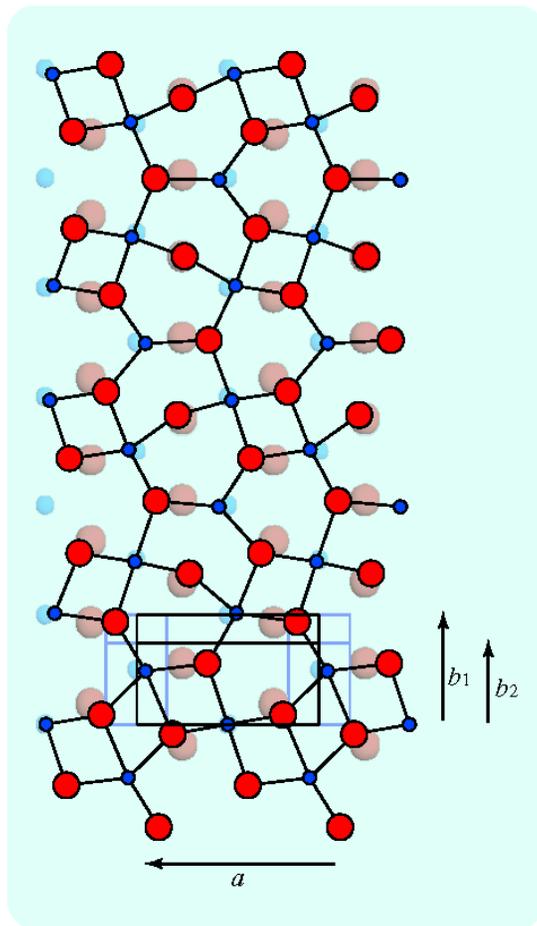
→ b軸方向の周期性なし

M-O2間の極めて短い部分が出現

→ 変調によってより安定な構造に緩和

M-O面の構造

変調構造と基本構造の比較



O2の変位が顕著

Mの変位は少ない ← Mは第一部分構造の3次元骨格の一部

例2: シアー型変調構造

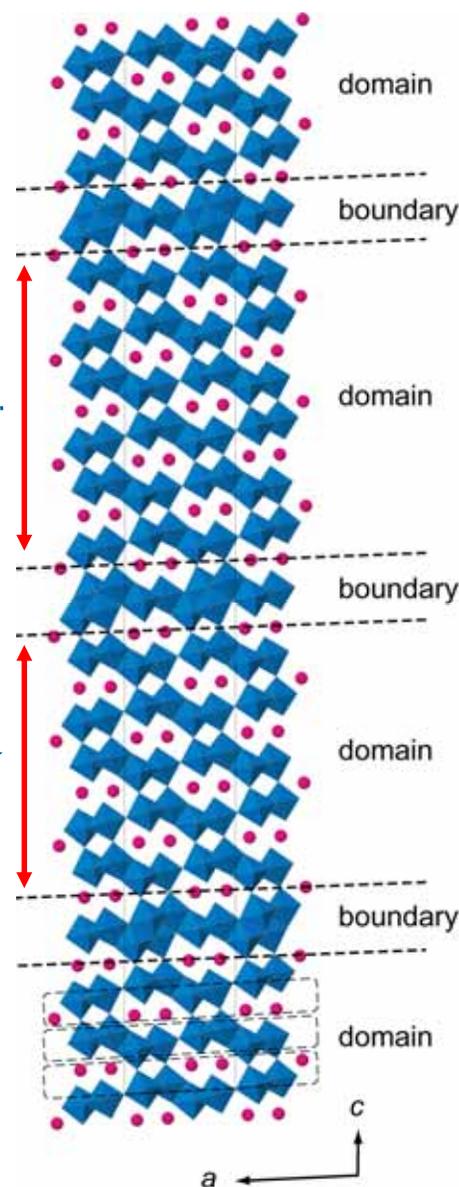
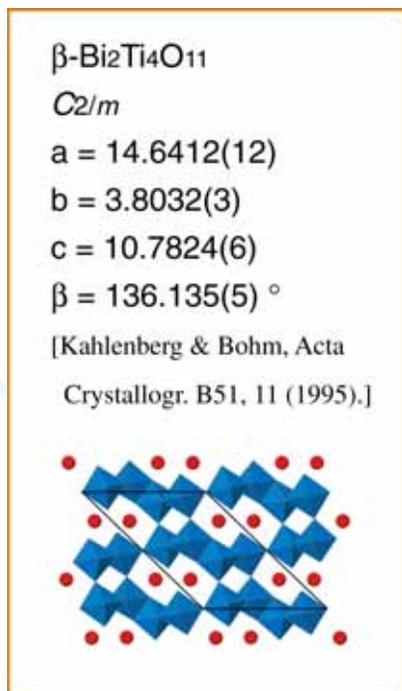
- 東北大学との共同研究



β - $\text{Bi}_2\text{Ti}_4\text{O}_{11}$ 型領域(domain)

+ シアー型境界(boundary)

境界が非周期的に導入



$\text{Ga}_4\text{Ti}_{13}\text{O}_{32}$ の基本格子

$$(\text{Ga}_4\text{Ti}_{m-4}\text{O}_{2m-2}, m=17)$$

- 3次元解析

$$a=34.113, b=2.976, c=10.298 \text{ \AA}, \beta=96.99^\circ$$

m : 増加 $\Rightarrow a$: 増加
 C 格子 $\Leftrightarrow I$ 格子

- 4次元解析

$$a=4.090, b=2.976, c=4.736 \text{ \AA}, \beta=90.29^\circ$$

m : 増加 \Rightarrow ルチルに変調波ベクトル $|q|$: 減少

