

放射光二体分布関数法で見る 物質中のナノスケール構造

Development of x-ray pair distribution function measurement
and its application to the local structural studies

綿貫 徹、町田 晃彦、前島 尚之



本グループでは、放射光を用いた高速原子二体分布関数(PDF)測定技術を開発し、通常の結晶解析では解けない不均質系や構造に乱れのある系などにおけるナノスケール領域の局所構造の解明を行っています。測定の高速度化により、時分割測定（最速15Hz）や系列試料など多数試料の測定が可能です。

最近のトピックス： 鉛系ペロブスカイト化合物で「電荷ガラス」を発見
クロム酸鉛は昔から知られている物質ですが、実は「電荷ガラス」という特異な状態が形成されていることが分かりました。PDF解析によって、2価と4価の鉛イオンが乱れた配列をとり、電荷配列の乱れた「電荷ガラス」状態であることが分かりました。

放射光を用いた高速原子二体分布関数(PDF)測定

ブラッグ回折

全散乱
ブラッグ回折+散漫散乱

周期平均構造
(通常の結晶解析)

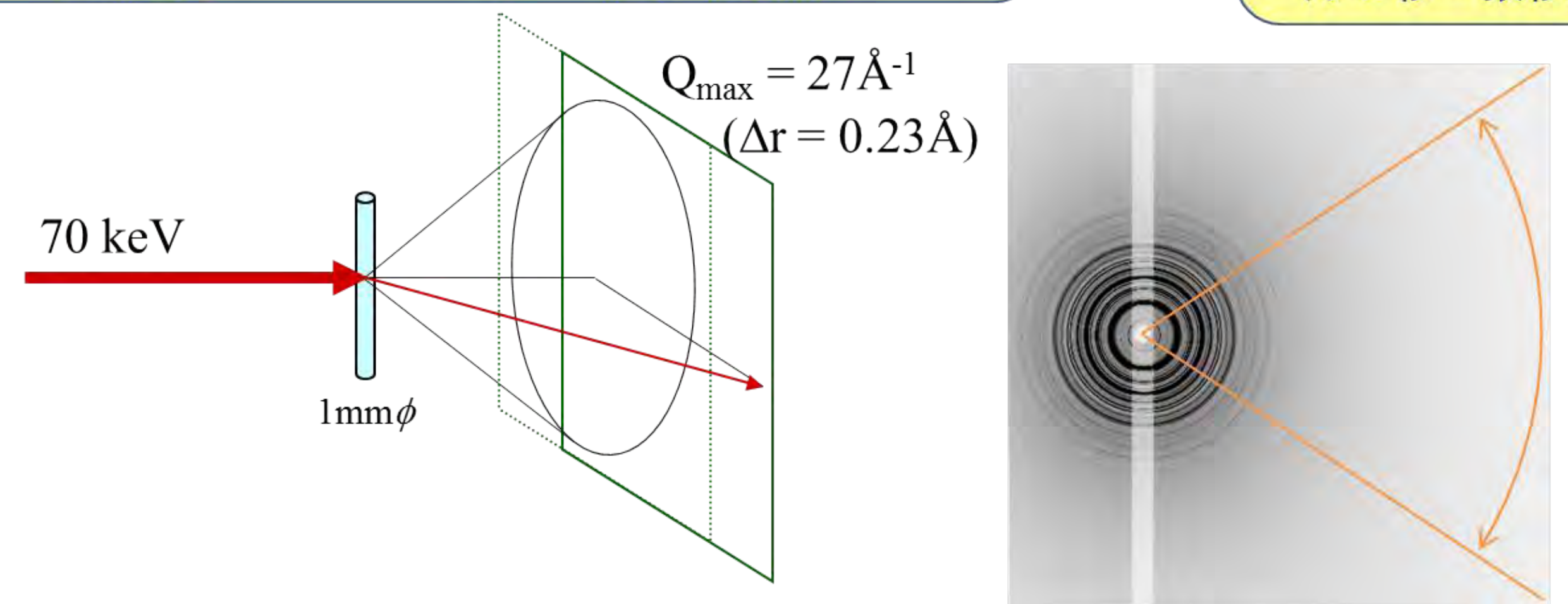
ナノスケール領域の
局所構造まで分かる
(PDF解析)

全散乱の高速測定

放射光・高エネルギー
X線 (70 keV)
高強度

大面積2D検出器
(IP, フラットパネル)
高い統計性

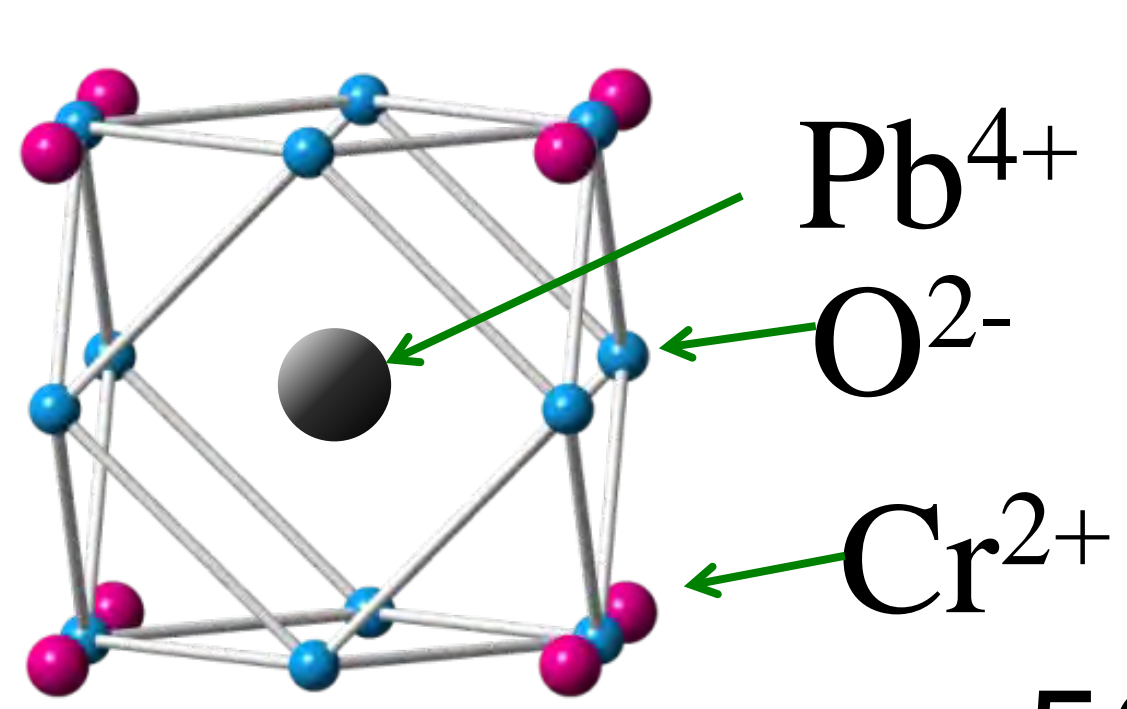
高Qまでの
全散乱測定
迅速な測定
(サブ秒~数秒)



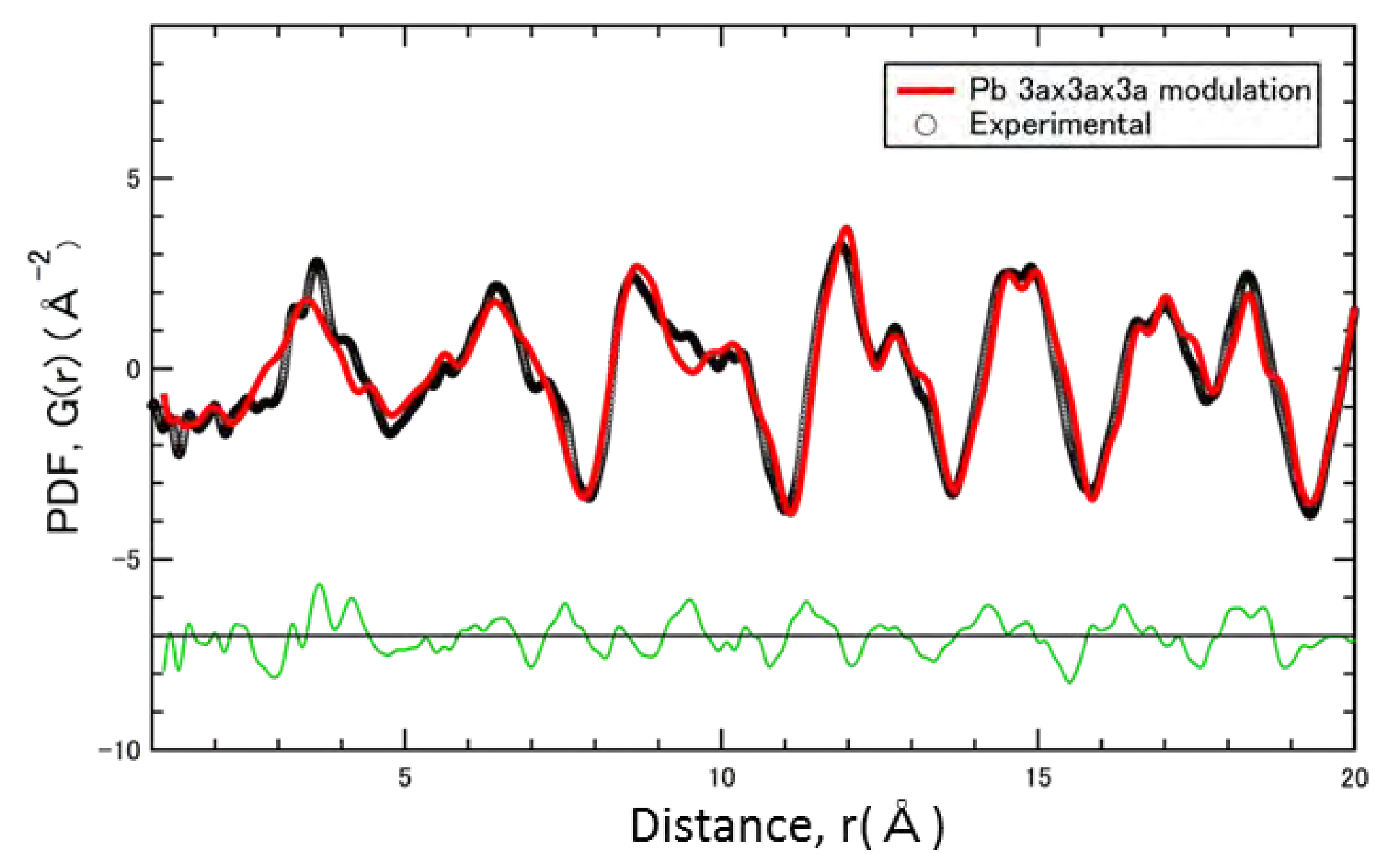
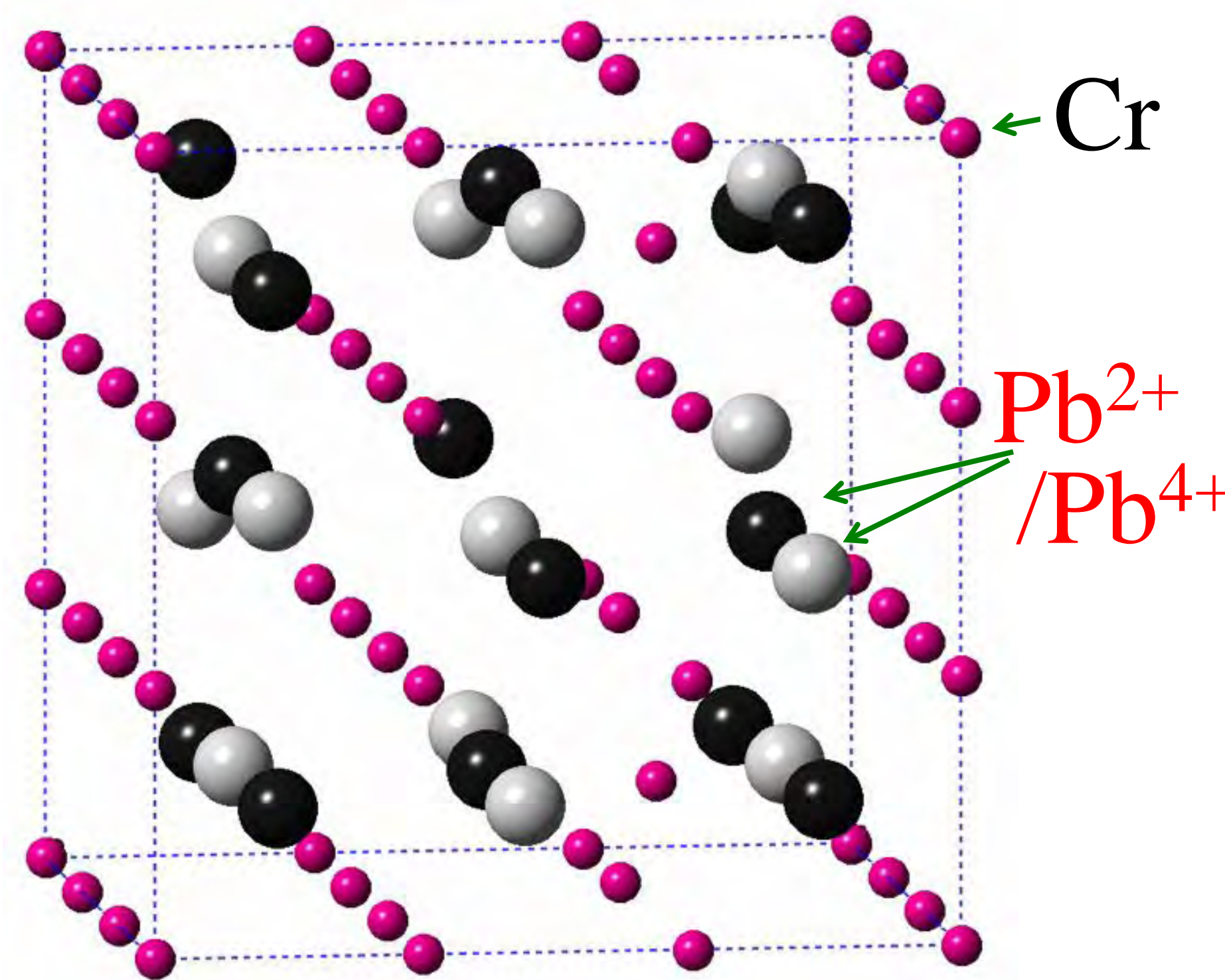
@SPRING-8 BL22XU

鉛系ペロブスカイト化合物で「電荷ガラス」を発見

クロム酸鉛 $PbCrO_3$



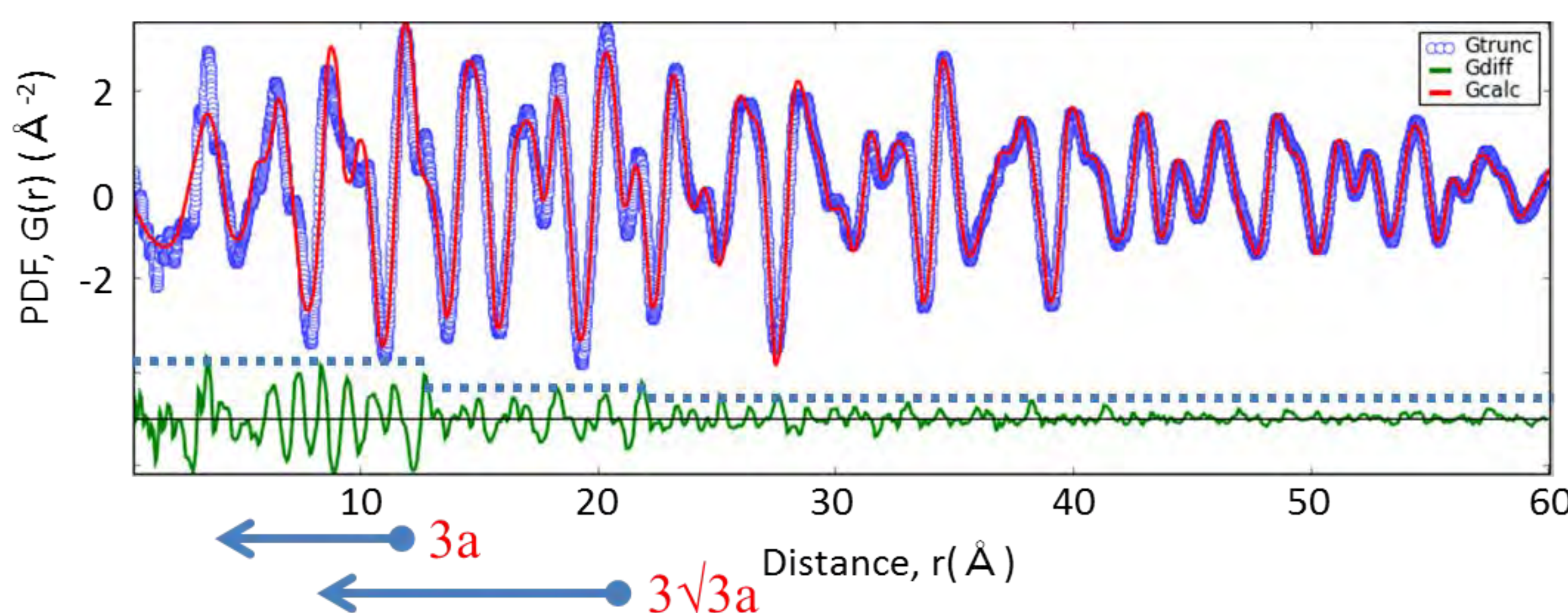
50年ぶり
に更新



従来の構造モデル

新規解明の電荷ガラス構造
20 Å程度の領域で短距離秩序を形成

電荷ガラス構造での
PDF解析結果



従来の構造モデル（通常の結晶解析結果）
と実際のPDFとの不一致

短距離秩序を形成する20 Å程度以下で顕著に

R. Yu, H. Hojo, T. Watanuki, M. Mizumaki, M. Azuma, et al., J. Am. Chem. Soc. 137, 12719 (2015).