酸フッ化物におけるアニオン秩序と機能の発現

The functional properties induced by anion order in oxyfluorides

近大理工　°岡　研吾

Kindai Univ., °Kengo Oka

E-mail: koka@apch.kindai.ac.jp

近年、 酸化物の特性をさらに引き出すアプローチとして、アニオンサイトを酸素とそれ以外の窒素やフッ素などで複合化させる手法が注目を集めている[1]。異種アニオンの化学的・電気的・幾何学的性質の違いにより、複合アニオン化合物では、金属イオンの価数状態の制御や、電気的・光学的な特性の変化が可能である。そして、価数の異なるアニオンを組み合わせることによって、酸化物では得られないカチオン/アニオン比を実現することができる。カチオン/アニオン比は無機イオン化合物の結晶構造を決定する支配的要因であり、単純イオン化合物ではあり得ないカチオン/アニオン比を実現することは、新物質探索のアプローチとして非常に有効である。本発表では、Pb と Ti を含む系について、アニオンサイトを酸素とフッ素で複合化することによって得られたパイロクロア型の新物質 $Pb_2Ti_2O_{5.4}F_{1.2}$ のアニオンが秩序配列した構造[2]とそれに由来する可視光応答光触媒特性などの機能[3]について紹介する。その中で、カチオン-アニオン結合の異方性と物質の機能開拓について議論したい。

[1] H. Kageyama *et al.*, *Nature Commun.*, *9*, 772 (2018).

[2] K. Oka *et al.*, *Chem. Mater.*, *28*, 5554 (2016).

[3] R. Kuriki *et al.*, *J. Am. Chem. Soc.*, *140*, 6648 (2018).

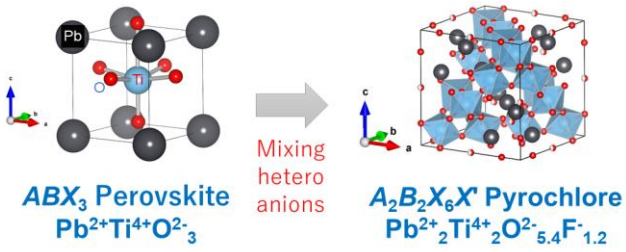

Figure 1 The schematic illustration of structural change induced by mixing hetero anions with O^{2-} and F^-. The cation/anion ratio changes from ABX_3 ($PbTiO_3$) to $A_2B_2X_6X'$ ($Pb_2Ti_2O_{5.4}F_{1.2}$) led to the structural change from perovskite to pyrochlore.

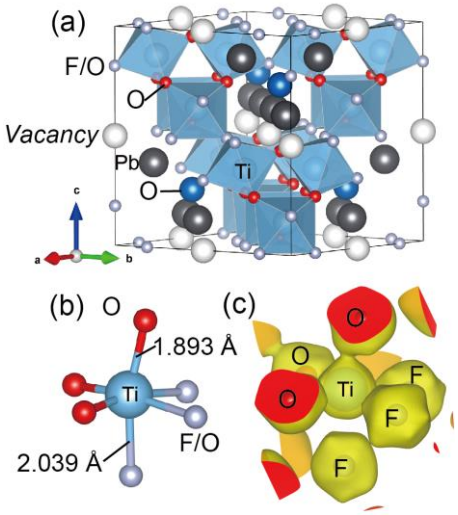

Figure 2 The illustrations of anion order in $Pb_2Ti_2O_{5.4}F_{1.2}$. (a) The crystal structure, (b) the local coordination around Ti^{4+} (b) and electron density distribution around Ti^{4+} visualizing the difference in ionic nature between O^{2-} and F^-.

© 2019年 応用物理学会