

Sr_{2.5}Bi_{0.5}NiO₅ の電子状態と局所構造における Pb 置換効果

(都立大理¹・さがけ²・東北大理³) 夏井 健太¹、河底 秀幸^{1,2}、吉川 聡一¹、西村 花奈³、福村 知昭³、山添 誠司¹

Pb substitution effect on electronic state and local structure of Sr_{2.5}Bi_{0.5}NiO₅ (¹*Faculty of Science, Tokyo Metropolitan University*, ²*JST-PRESTO*, ³*Faculty of Science, Tohoku University*) Kenta Natsui¹, Hideyuki Kawasoko^{1,2}, Soichi Kikkawa¹, Kana Nishimura³, Tomoteru Fukumura³, Seiji Yamazoe¹

In Sr_{2.5}Bi_{0.5}NiO₅ (SBNO), composed of rock-salt Sr_{1.5}Bi_{0.5}O₂ and perovskite SrNiO₃ layers, the change of the Sr/Bi arrangement in the Sr_{1.5}Bi_{0.5}O₂ layers from a disordered to an ordered state results in 1/100-fold reduction of the electrical resistivity [1]. Also, in the Pb-substituted ordered Sr_{2.5}(Bi_{1-x}Pb_x)_{0.5}NiO₅ (Pb:SBNO), decreased degree of the Sr/Bi ordering leads to an increase in electrical resistivity [2]. However, the origin of the correlation between the Sr/Bi ordering and electrical resistivity remains unclear.

In this study, we evaluated the electronic states and local structures of these SBNO and Pb:SBNO using X-ray absorption fine structure (XAFS) analysis to elucidate the origin of the electrical resistivity change. In both the ordered and disordered SBNO, Ni was trivalent regardless of the Sr/Bi arrangement. The stronger pre-edge peak intensity at the Ni-K edge of the ordered SBNO suggests that the Sr/Bi ordering enhances the hybridization between Ni 3d and O 2p orbitals, resulting in the large decrease in electrical resistivity. In Pb:SBNO, Pb was tetravalent, and the valence state of Ni reduced with increasing the Pb amount. Thus, the electrical resistivity increase in Pb:SBNO can be attributed to not only the lower degree of Sr/Bi ordering but also smaller amount of hole carriers. On the presentation, we will discuss the results of local structural analysis using EXAFS.

Keywords : Layered Nickelate, Local atomic arrangement, X-ray Absorption Fine Structure

Sr_{1.5}Bi_{0.5}O₂ 岩塩層と SrNiO₃ ペロブスカイト層からなる Sr_{2.5}Bi_{0.5}NiO₅ (SBNO)では、Sr_{1.5}Bi_{0.5}O₂ 層の Sr/Bi 配列が無秩序状態から秩序状態に変化することで、電気抵抗率が 1/100 程度に減少する [1]。また、Pb 置換した秩序相 Sr_{2.5}(Bi_{1-x}Pb_x)_{0.5}NiO₅ (Pb:SBNO)では、Sr/Bi 配列の秩序度が低下し、電気抵抗率が増大する [2]。しかし、これらの Sr/Bi 配列の秩序度合いが電気抵抗率と相関する起源は明らかになっていない。

そこで本研究では、SBNO と Pb:SBNO について、X 線吸収微細構造解析により電子状態と局所構造を評価し、電気抵抗率の変調の起源を考察した。秩序相と無秩序相の SBNO では、Sr/Bi 配列によらず、Ni は 3 価であった。さらに、秩序相の方が、Ni K 端のプリエッジピークの強度が大きく、Sr/Bi 配列の秩序化により Ni 3d 軌道と O 2p 軌道が強く混成した結果、電気抵抗率の大幅な減少につながったと考えられる。また Pb:SBNO では、Pb は 4 価であり、Pb 置換量の増大に伴い、Ni の価数が低減した。したがって、Pb:SBNO の電気抵抗率の増大は、Sr/Bi 配列の秩序度の低下に加え、Ni の価数減少による伝導を担う正孔キャリアの減少に由来すると考えられる。当日は、EXAFS を用いた局所構造解析の結果も含めて議論する予定である。

[1] K. Matsumoto *et al.*, *Adv. Sci.* **2023**, 10, 2304978. [2] 西村 花奈 他, 第 84 回応用物理学会秋季学術講演会 (2023).