

SMP044-08

会場:301B

時間:5月25日 12:00-12:15

## PbTiO<sub>3</sub>、PbZr(Ti)O<sub>3</sub> 強誘電体化合物と ATiO<sub>3</sub> 常誘電体化合物 (A=Mg,Ca,Sr) との Ti K 端 XAFS スペクトルの温度依存における比較 Comparison in temperature dependence of Ti K edge XAFS spectrum for PbTiO<sub>3</sub>,PZT, ATiO<sub>3</sub> compounds (A=Mg,Ca,Sr,)

仲谷 友孝<sup>1\*</sup>, 平床 竜矢<sup>1</sup>, 奥部 真樹<sup>2</sup>, 武田 隆史<sup>3</sup>, 村井 啓一郎<sup>4</sup>, 吉朝 朗<sup>1</sup>

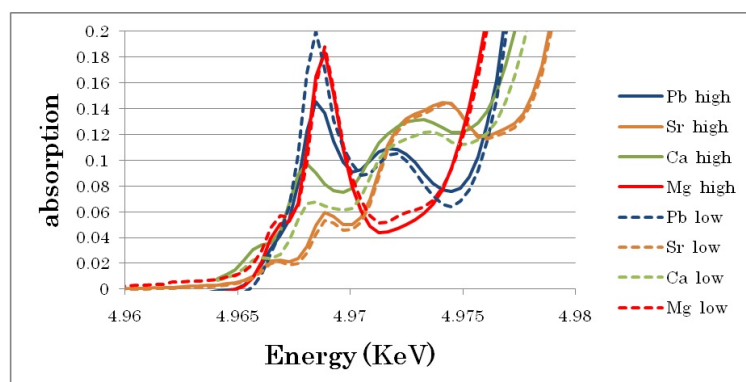
Tomotaka Nakatani<sup>1\*</sup>, Tatsuya Hiratoko<sup>1</sup>, Maki Okube<sup>2</sup>, Takashi Takeda<sup>3</sup>, Kei-ichirou Murai<sup>4</sup>, Akira Yoshiasa<sup>1</sup>

<sup>1</sup> 熊本大学, <sup>2</sup> 東京工業大学, <sup>3</sup> 産業技術総合研究所, <sup>4</sup> 徳島大学

<sup>1</sup>Kumamoto University, <sup>2</sup>Institute of Technology, <sup>3</sup>National Institute for Materials Science, <sup>4</sup>Tokushima University

様々なペロブスカイト型化合物は興味深い物性が発現することから、固溶組成、構造、相転移、物性発現機構に関して広く研究されている。陽イオンの XANES スペクトルは、広範囲の温度で測定され XANES スペクトルの組成、構造、相転移に関しても多くの研究がある。ATiO<sub>3</sub> ペロブスカイト型チタン酸塩のチタン原子は TiO<sub>6</sub> 八面体席を占有する。Ti K-edge の XANES スペクトルは A 席を占有する元素により大きく変化する [1]。一方で XANES スペクトルの温度依存性はたとえ構造相転移を経たとしても各々の化合物において小さいことが知られている [1]。温度依存性について、pre-edge の強度は幾つかのふるまいがある。例えば温度が増大すると、強度が減少する場合や、温度が増大すると強度が増大する等、化合物により温度依存性が異なる。優れた強誘電性特性を持つ強誘電体 PbTiO<sub>3</sub> と PZT は多くの研究が行われてきたが、オフセンターモデルや非調和熱振動モデル等提案されており、ペロブスカイト構造の局所構造の見地からの詳細は疑問がある。PbTiO<sub>3</sub> と PZT は、これまでの結晶構造研究や XANES による局所構造研究では、強誘電性特性発現と相転移のメカニズム等に幾つかの提案があるが他の化合物との比較研究は不十分であった。PbTiO<sub>3</sub> と PZT について XAFS 解析を使って吸収端近傍の局所歪みの温度依存を決定し、pre-edge の特徴について総合的な解釈を得るための比較研究をおこなったので報告する。今回に本研究では様々なチタン酸塩の Ti K-edge XANES スペクトルを 18K から 850K までの範囲で高精度で測定し、組成、物性変化、相転移、温度の変化に伴う XANES スペクトルの詳細変化を調べた。5 箇所の明瞭な pre-edge ピークが各種化合物で観測される。各強度がチタン原子近傍の歪みや電子軌道混成、A 原子を介した酸素の原子軌道変化、圧力等に大きく依存する。強誘電体相に特有の変化を発見し、回折法による構造解析結果と比較することで、ペロブスカイト型化合物の特異性を議論する。

[1] T.Hashimoto, et al. (2007) [2] J. P. Itie et al 2006



キーワード: ペロブスカイト, 強誘電体, 相転移

Keywords: perovskite, ferroelectric, phase transition