



M-BaTaO₂N の酸素 K 吸収端軟 X 線吸収スペクトル

曾田一雄^{1,2,3}, 茨木俊貴¹, 加藤政彦¹, Mirabbos Hojamberdiev¹, 丹羽健¹,
長谷川正¹, 高倉将一^{2,3}, 仲武昌史³
¹名古屋大学工学研究科, ²名古屋大学 SR 研究センター, ³あいち SR センター

キーワード：酸素 K 吸収端軟 X 線吸収スペクトル, perovskite 型 BaTaO₂N

1. 背景と研究目的

ペロブスカイト型酸窒化物 BaTaO₂N は、可視光応答型光触媒の母材として期待されている[1]。我々は、触媒性能の向上を目指して金属 $M = \text{K, Mg, Al, Ga}$ を 5% 添加した M -doped BaTaO₂N の触媒性能と電子構造との関係を明らかにするため、光電子分光および軟 X 線吸収分光で M -doped BaTaO₂N の電子構造を調べている。今回、 M -doped BaTaO₂N の酸素 K 吸収端軟 X 線吸収スペクトル O K-XAS を測定した。

2. 実験内容

試料は、NH₃ アシストフラックス法[2]で作製した後、6 GPa で大きさ $\phi 2 \times t 1$ 程度に加圧成型した。この試料を導電性接着剤で測定用試料台に取り付け、超高真空中でダイヤモンドやすりにより表面層を除去した。空気中に放置した試料表面は、黒色であるが、ダイヤモンドやすりにより、作製試料本来の赤みがかった色となった。試料は、バルク電気伝導率が低く、帯電効果が大きいため、室温にて全蛍光収量法 TFY で O-K XAS スペクトルを得た。

3. 結果および考察

Fig.1 に O K-XAS スペクトルの測定結果をまとめた。スペクトル強度は、光子エネルギー 580 eV 付近のエッジジャンプ強度で規格化した。今回の測定では、触媒能が他のものより高い Mg 添加の試料[3]で吸収端が大きく低エネルギー側にシフトしている。N K-XAS でも同様の傾向がみられたが、シフト量は小さい。これらのシフトの原因として N 1s および O 1s 内殻準位の化学シフトと価電子帯電子構造の変化が考えられる。今後、光子エネルギーの較正を含んだ再現性のチェックとともに内殻準位光電子分光測定を試みる。また、第一原理計算によって価電子帯電子構造に対する金属添加効果を明らかにする。これらによって電子構造と触媒能との相関を解明する。

今回、前回[4]同様、計数率が小さいにもかかわらず、新しく開発された測定プログラムを用いた TFY 法は、絶縁性の高い試料に対して有効な測定法であることが示された。

4. 参考文献

- [1] S. Balaz *et al.*, Chem. Mater. 25 (2013) 3337.
- [2] M. Hojamberdiev *et al.*, Cryst. Growth Des. 15 (2015) 4663.
- [3] M. Hojamberdiev, *private communication*.
- [4] K. Soda *et al.*, あいち SR 成果報告書 201804002.

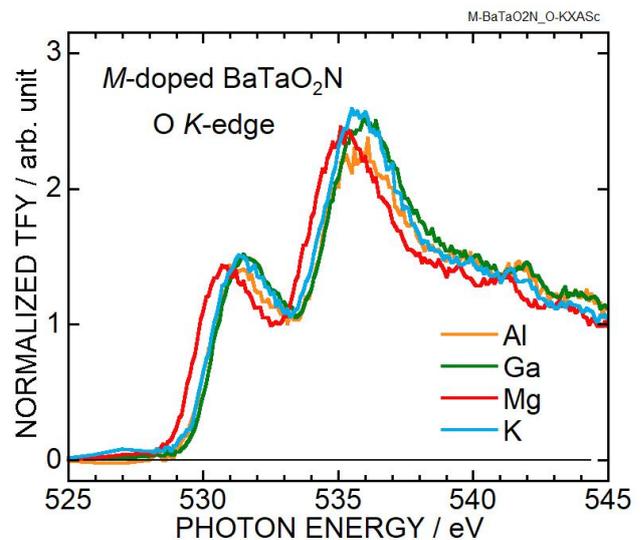


Fig.1 Total fluorescence yield spectra near O K-edges of M -doped BaTaO₂N; $M = \text{K, Mg, Al, Ga}$.