



XAFS を用いたヒドリド含有酸化物の局所構造解析

野澤 俊介¹, 金澤 知器¹, 春木 理恵¹

¹ 高エネルギー加速器研究機構

キーワード：自発分極，強誘電体，光触媒，ヒドリド含有酸化物

1. 背景と研究目的

本研究は XAFS 測定によりヒドリド含有酸化物の局所構造解析を行うことを目的とする。

2. 実験内容

本報告書では参照データとして用いる BaTiO₃ の加熱条件下での XANES 分析の結果について示す。測定ではサンプル温度を昇温セルも用いて制御することで、Ti XANES スペクトルの正方晶から立方晶への相転移の影響を調査した (Fig. 1A,B)。

3. 結果および考察

BaTiO₃ の立方晶/正方晶の転移温度は 393 ~ 403 K と報告されているが^[1]、Ti-K 端およびプリエッジ領域のスペクトルはともに転移温度前後で変化がないことから、Ti 周りの局所構造は、相転移の影響をほとんど受けていないことが分かる。これは、BaTiO₃ において提案されている、秩序・無秩序型の強誘電体相転移を支持する^[2]。

今後は、本参照データを利用して、ヒドリド含有酸化物における局所構造変化について議論する予定である。

4. 参考文献

1. H. Vogt, J. A. Sanjurjo, and G. Rossbroich, Phys. Rev. B **26**, 5904 (1982).
2. K. A. Müller and W. Berlinger, Phys. Rev. B **34**, 6130 (1986).

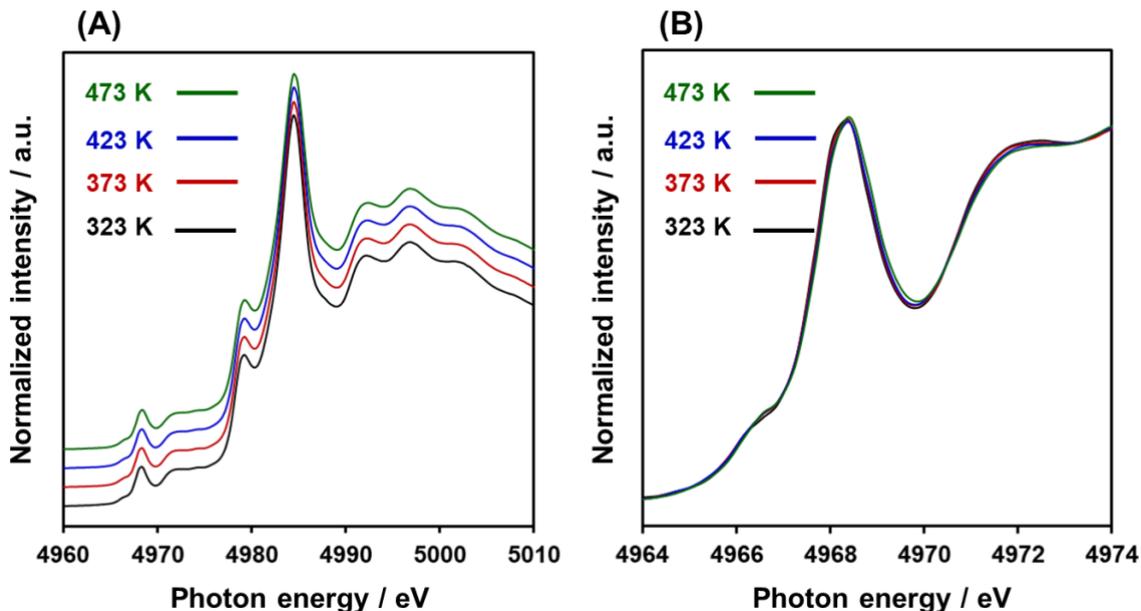


Figure 1. Ti-K edge XANES spectra of BaTiO₃ under various temperature condition. (A) Ti-K edge absorption region and (B) pre-edge region.