

La K-edge XAFS による $\text{Sr}_{0.95}\text{La}_{0.05}\text{TiO}_3$ の局所構造解析

Local structure analysis of $\text{Sr}_{0.95}\text{La}_{0.05}\text{TiO}_3$ by means of La K-edge XAFS

尾崎 徹^{1*}, 戎 佳宏¹, 仁谷浩明², 八方直久³, 細川伸也⁴, 林 好一⁵

¹広島工大院工, ²KEK/PF, ³広島市大院情報, ⁴熊本大院先端科学, ⁵名工大院工

T. Ozaki^{1*}, Y. Ebisu¹, H. Nitani², N. Happo³, S. Hosokawa⁴, K. Hayashi⁵

¹Graduate School of Science and Technology, Hiroshima Institute of Technology

²Photon Factory, KEK

³Graduate School of Information Sciences, Hiroshima City University

⁴Department of Physics, Graduate School of Science and Technology, Kumamoto University

⁵Department of Materials Science and Engineering, Nagoya Institute of Technology

1 はじめに

チタン酸ストロンチウムに La をドーブした $\text{Sr}_{1-x}\text{La}_x\text{TiO}_3$ の構造相転移温度 T_a は, x の増加と共に大きく上昇して, $x=0$ での $T_a=105$ K から $x=0.05$ での $T_a=200$ K になる. T_a が大きく上昇する原因は, La をドーブしたことによる高温相構造の変化, 特に La の周りの局所構造が相転移において果たす役割を調べることによって明らかになることが期待される[1, 2]. そこで, $\text{Sr}_{0.95}\text{La}_{0.05}\text{TiO}_3$ の La K-edge XAFS の実験を試みた.

2 実験

実験に使用した試料は, $\text{Sr}_{0.95}\text{La}_{0.05}\text{TiO}_3$ の単結晶板から得た粉末を BN と混ぜてペレット状にしたものである.

XAFS 実験はビームライン AR-NW10A において透過法で行った. $\text{Sr}_{0.95}\text{La}_{0.05}\text{TiO}_3$ の La K-edge XAFS の吸収スペクトルの測定は, 相転移温度 $T_a=200$ K を挟む, 300 K から 100 K の 6 つの温度で行った.

EXAFS の解析プログラムとして Athena と Artemis を使用した. また, 後方散乱強度と位相シフトの計算には FEFF6 を使用した.

室温で測定した吸収スペクトルから抽出した $\text{Sr}_{0.95}\text{La}_{0.05}\text{TiO}_3$ の La K-EXAFS 振動を Fig. 1 に示す. 光電子の波数 k が大きい領域の EXAFS 振動を強調

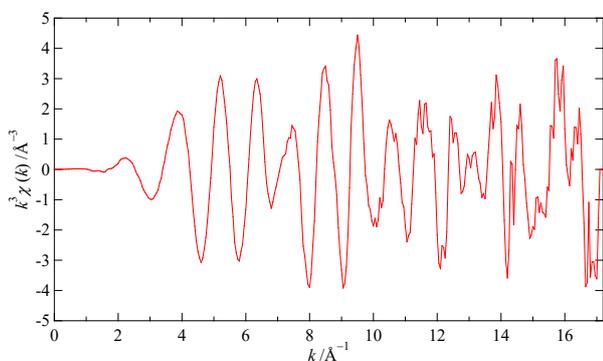


Fig.1 La K-edge EXAFS oscillation of $\text{Sr}_{0.95}\text{La}_{0.05}\text{TiO}_3$ at 300 K.

するために, EXAFS 振動に k^3 を重みとして掛けている. それを基にして, La-O, La-Ti, La-Sr 原子間距離 $R_{\text{La-O}}$, $R_{\text{La-Ti}}$, $R_{\text{La-Sr}}$ を得た (Fig. 2). 本報告書では, 室温の結果について報告する.

3 結果および考察

$\text{Sr}_{0.95}\text{La}_{0.05}\text{TiO}_3$ の La K-edge XAFS から $R_{\text{La-O}}=2.68\text{Å}$, $R_{\text{La-Ti}}=3.414(6)\text{Å}$, $R_{\text{La-Sr}}=3.92(1)\text{Å}$ が得られた. $R_{\text{La-O}}$ は XRD から得られた原子間距離よりも小さい値を示した. 一方, $R_{\text{La-Ti}}$ と $R_{\text{La-Sr}}$ は XRD から得られた原子間距離よりも大きい値を示した. とくに, $R_{\text{La-Sr}}$ は $a=3.907\text{Å}$ よりも 0.01Å 大きい.

以上から, $\text{Sr}_{0.95}\text{La}_{0.05}\text{TiO}_3$ の La を含む単位胞は, La を含まない単位胞よりも大きいことが明らかになった. このことから, Sr^{2+} が La^{3+} に置換されて, La^{3+} を含む 8 個の単位胞内の Ti が Ti^{4+} からイオン半径の大きい $\text{Ti}^{3.88+}$ になり, TiO_6 八面体が大きくなったと考えられる. 現在, SPring-8 において進行中の La K, Sr K, Ti K-edge XAFS の実験結果と合わせて, La の周りの局所構造が $\text{Sr}_{1-x}\text{La}_x\text{TiO}_3$ の相転移温度を上昇させる役割を解明したい.

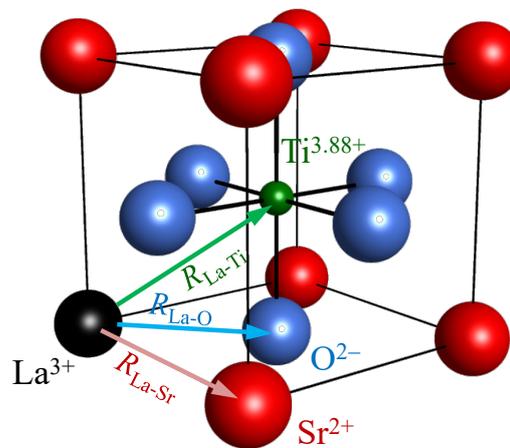


Fig.2 Interatomic distances in a unit cell containing a La atom in $\text{Sr}_{0.95}\text{La}_{0.05}\text{TiO}_3$.

参考文献

- [1] T. Ozaki *et al.*, *Ferroelectrics* **462**, 14 (2014).
- [2] Y. Ebisu *et al.*, *Trans. Mat. Res. Soc. Jpn.* **40**, 355 (2015).

* ozaki@cc.it-hiroshima.ac.jp