

強誘電体 BaTiO₃ における Ti K 共鳴 X 線ラマン散乱： Ti 2*p* 素励起の温度依存性

Resonant X-ray Raman Scattering study of Ferroelectric BaTiO₃: Temperature dependence of Ti 2*p* excitation.

弘前大院理工 ^A, 広島大院理 ^B, KEK-PF ^C, 大阪府大 ^D, 京大 ^E
手塚泰久 ^A, 中川伸一 ^A, 篠谷剛志 ^A, 惣山浩行 ^A, 大浦龍介 ^A, 山田匠 ^A,
中島伸夫 ^B, 野沢俊介 ^C, 岩住俊明 ^D, 五十棲泰人 ^E

BaTiO₃(以下 BTO)はペロブスカイト型構造の強誘電体であり、 $T_C \approx 120^\circ\text{C}$ で強誘電相転移する。通常は変位型の相転移に分類されるが、Ti-O 間に強い共有結合性を有するため[1]、相転移のメカニズムは未確定となっている。本研究では、単結晶 BTO の Ti K 共鳴 X 線ラマン散乱(XRS)の測定によって、BTO の電子構造の研究を行った。測定は KEK PF の BL-15B に X 線発光分光器(ESCARGOT)を設置して行った。

図 1 は BTO 粉末の Ti K 吸収スペクトル(XAS)である。主に、Ti 1*s*→4*p* 遷移に起因しているが、吸収端に Ti 1*s*→3*d* 四重極遷移による弱い構造が観測されている[2]。本研究では、吸収端直下の励起エネルギーで XRS の測定を行った。

図 2 は単結晶 BTO(100)で測定した XRS スペクトルの温度依存性である。励起光の偏光を試料の *c* 軸方向に合わせ、温度を室温(強誘電相)から 150°C (常誘電相)まで変化させている。図における $P_1 \sim P_4$ が Ti 2*p*→3*d* 励起に、 $P_5 \sim P_7$ が Ti 2*p*→4*p* 励起に対応するが、Ti-O の結合方向である 3*d* の e_g ピーク($P_2 \sim P_4$)変化が観測されている。本講演では、方位角依存性も含め詳細な解析結果を報告する予定である。

[1]R.E.Cohen, Nature, 358, 136(1992)、

[2]E.Beaurepaire, et al. Europhys. Lett. 22(1993)

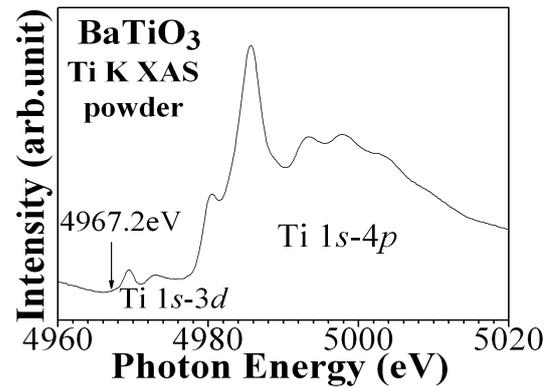


図 1: BTO の Ti K 吸収スペクトル

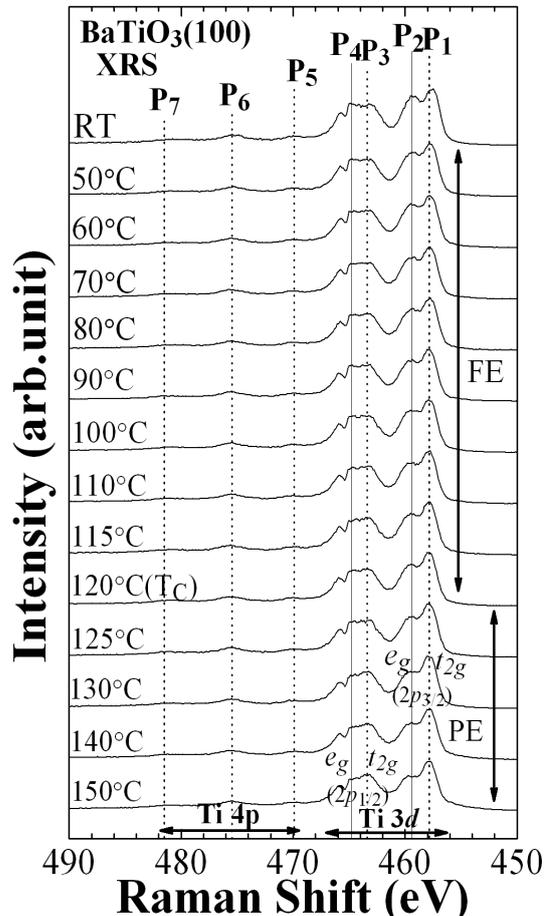


図 2: BTO の XRS の温度依存性