

B11 チタン酸バリウムにおける正方晶-立方晶相転移の研究

(名古屋工業大学¹・産業技術総合研究所中部センター²) ○八反大貴¹・井田隆¹・野村勝裕²

E-mail: 28411129@stn.nitech.ac.jp

【諸言】チタン酸バリウムは常温で強誘電性の正方晶に属し、120°C-130°C付近では常誘電性の立方晶に相転移すると言われている。正方晶から立方晶への相転移は強誘電的なイオン位置の変位が特定の温度で失われる変位型相転移と言われるが、秩序無秩序型の性格を持つと指摘されている[1]。本研究では粉末X線回折を用いて、チタン酸バリウムの粉末回折図形が正方晶から立方晶への相転移の際にどのように変化するかを調査した。

【実験方法】市販のチタン酸バリウムを乳棒とすり鉢で粉砕したものを試料として用いた。あいちシンクロトロン光センターのBL5S2 ビームラインで二次元X線検出器(Dectris, Pilatus-100K)を用いて高温その場回折測定を実施した。毎分1.5°Cの昇温速度で試料の温度を連続的に変化させ、1分毎に強度を記録した。また、実験室型の粉末X線回折装置(PANalytical, X'pert PRO MTD)を用いて、温度を段階的に変化させて回折図形を記録した。測定した粉末回折図形に逆畳み込み-畳み込み処理を施し、装置収差の影響を除去した[2]。二次元回折強度データの変換により得られた一次元回折強度データと、実験室型回折計による一次元強度データに逆畳み込み-畳み込み処理を施した結果は、いずれも装置収差によるピーク形状の非対称な変形の効果が含まれていないとみなせる。

【結果・考察】Fig.1は、チタン酸バリウムの正方晶-立方晶相転移における粉末回折図形の温度変化をカラスケール図に示したものである。相転移付近で比較的広い温度領域にわたり連続的に変化しているように見える。学術発表会ではさらに詳細な解析結果を発表する予定である。

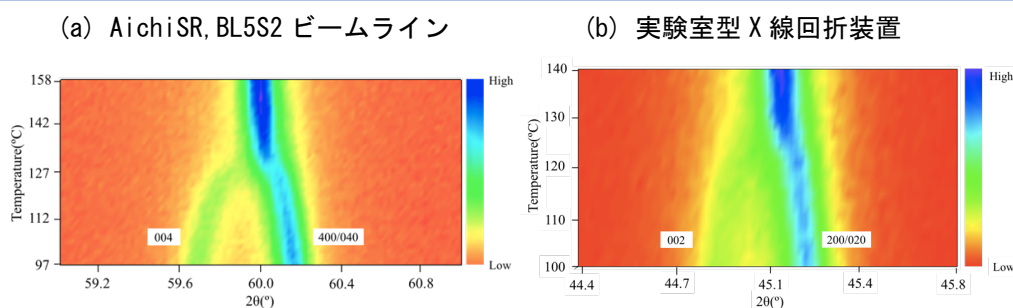


Fig.1 回折強度の温度依存性および回折角依存性

[1] K. Tsuda and M. Tanaka, Appl. Phys. Express 9, 071501 (2016)

[2] T. Ida and H. Toraya, J. Appl. Cryst. 36, 58-68 (2002)