

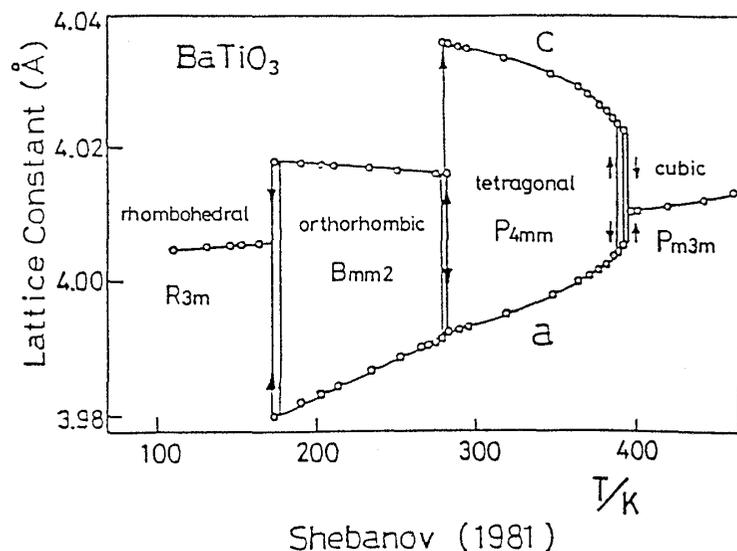
10. BaTiO<sub>3</sub> の高分解能 X線回折

大西伸幸

ロッシエル塩の強誘電性の発見に始まった強誘電体の研究は、今日までに実に多くの結晶を提供し進展をみせた。そしてその過程で種々の構造相転移が明らかになってきた。

これらの構造相転移はおおまかに分類して一次転移、二次転移、及び二次に近い一次転移に分けられる。氷と水の間相転移のように潜熱を伴う相転移が一次転移で、転移温度においてエントロピーが不連続となる。それに対して、潜熱は伴わず、比熱に不連続ないし発散が見られるのが二次転移である。一般的に秩序の度合を示す変数（たとえば格子定数）が転移温度において不連続なものが一次転移、連続的なものが二次転移と考えることができる。

今世紀の半ばに強誘電性が発見された BaTiO<sub>3</sub> は、これまでに発見されている強誘電体の中で最も多くの研究が行われ、様々な話題を提供してきた。一次の構造相転移を示すこの物質は、ロッシエル塩や KDP と比べて構造が比較的簡単であるため研究の対象としやすい。そこで一次転移における格子定数の温度依存性を調べるにあたって、この物質をサンプルに採用した。構造相転移に伴ってドメイン構造が出現したりあるいはドメイン構造に変化が現れる場合、回折法による格子定数測定は極めて有用であり、結晶学的にも有意義である。

Fig.1 BaTiO<sub>3</sub>の相転移