課題番号　　:2020A-E06
利用課題名（日本語）　　:YO_xH_yエピタキシャル薄膜における XAFS 構造解析
Program Title (English)　:Structural analysis of YO_xH_y epitaxial thin films using X-ray absorption fine structure
利用者名（日本語）　　:清水亮太 [1], 小松遊矢 [1], 松村大樹 [2], 辻卓也 [2]
Username (English)　　:Ryota Shimizu, Yuya Komatsu, Daiju Matsumura, Takuya Tsuji[2]
所属名（日本語）　　:1）東京工業大学物質理工学院, 2）日本原子力開発機構
Affiliation (English)　　:1) School of Materials and Chemical Technology, Tokyo Institute of Technology, 2) JAEA
キーワード：XAFS, Metal hydride, Photochromism, Metal-insulator transition

1. 概要（Summary ）

薄膜状のイットリウム酸水素化物(YO_xH_y)は太陽光照射により可視光透過率･電気抵抗率が低減するフォトクロミック特性を示すことから、スマートウィンドウや光メモリなどへの応用が期待されている。先行研究ではガラス上に堆積した多結晶薄膜が用いられていたが、我々は光誘起による物性変化を強化するため、エピタキシャル薄膜を作製した。すると、従来の多結晶薄膜の抵抗率変化(~1 桁)を大きく上回る 3 桁の抵抗変化の観測に成功した。さらに、光源を紫外レーザーに変更することで、光誘起の絶縁体-金属転移を実現した。

本研究では、このような YO_xH_y エピタキシャル薄膜における光誘起絶縁体-金属転移のメカニズムを調べるため、XAFS による Y の電子状態(価数)と Y-O の局所配位構造の解析を行った。

2. 実験（目的,方法）（Experimental）

ビームライン BL-14B1 にて、Y-K 端の吸収(~17.3 keV)近傍における XAFS 測定(蛍光収量法)を行った。膜厚が 150 nm の YO_xH_y エピタキシャル薄膜は東工大で作製し、Spring-8 に持ち込んだ。リファレンス用に、イットリア安定化ジルコニア(YSZ)単結晶の測定を行った。

3. 結果と考察（Results and Discussion）

図 1(a)-(c)に Y-K 端の EXAFS スペクトルと、$k^2\chi(k)$ プロットおよびそのフーリエ変換パターンを示す。YSZ と同様のピーク構造を有していることから、fcc 副格子をもつ Y から四面体配位のみを O が占有していることがわかった。イオンビームを用いた元素分析から、Y1 原子当たりに対して H と O の総アニオン数(~2.6)は全ての四面体サイト(=2)を上回っており、水素が四面体サイトだけでなく八面体サイトにも存在することが強く示唆される結果である。この八面体サイト水素のフォトクロミズムへの寄与について、さらに考察を深めていく予定である。

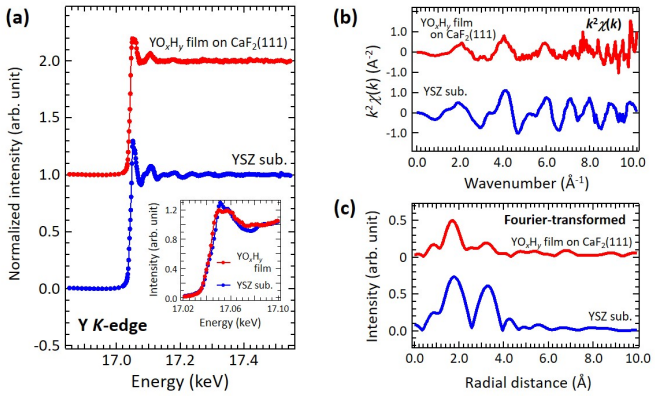

図 1: YO_xH_y エピタキシャル薄膜における(a): EXAFS スペクトル、(b): $k^2\chi(k)$プロット、(c): $k^2\chi(k)$のフーリエ変換パターン。

4. その他・特記事項（Others）

特になし。