

ドメインを導入した BaTiO₃ 単結晶の異方的電気伝導性と局所電子状態

Anisotropy of electric conductivity and local electronic states

in a domain-incorporated BaTiO₃ single crystal

○大澤 健男¹, 廣瀬 左京^{1,2}, 上田 茂典¹, 大橋 直樹^{1,3}

(1. 物材機構, 2. 村田製作所, 3. 東工大・元素戦略)

○Takeo Ohsawa¹, Sakyo Hirose^{1,2}, Shigenori Ueda¹, Naoki Ohashi^{1,3}

(1. NIMS, 2. Murata Manu., 3. TITech/TIES (MCES))

E-mail: ohsawa.takeo@nims.go.jp

【はじめに】 チタン酸バリウム (BaTiO₃) に異種イオンをドーピングすることによって、物性制御に自由度を提供し、積層セラミックコンデンサやサーミスタ素子として応用できる。それらは主に、多結晶セラミックスで用いられるため、その複雑さから応用に不可欠な基礎物性を計測することは難しい。その点を鑑みて、本研究では BaTiO₃ 単結晶を用いることにより、意図的に導入したドメイン構造に基づく電気伝導性と局所的な電子状態を調べ、ドメイン境界での状態変化を引き起こす要因を検証した。

【実験】 実験には BaTiO₃ 単結晶 (Neotoron Co., Ltd.) を用い、導電性を付与するため、窒素-水素雰囲気下において 1120°C で 12 時間還元処理を施した。還元処理後、1 軸異方性を有するドメイン構造が導入された。このドメイン構造に注目し、電気特性についてはホール効果、電子状態については光電子分光 (XPS) 測定を行った。特に、ドメイン境界でのポテンシャル変調を検出するために、ビーム径を ~20 μm に集光させ、試料に電圧を印加しながら、ドメインに垂直方向にラインスキャンを行った。(図 1(a))

【結果】 ドメインに平行 ($R_{//}$) と垂直 ($R_{\perp}$) 方向について、抵抗の温度依存性を測定した。正方晶ではドメインが一様であるため、 $R_{//} \leq R_{\perp}$ の異方性が明瞭に観測できる。さらに、転移温度での急激な抵抗上昇に加えて、温度低下による対称性の低下に伴い、抵抗の異方性が減少した。これらの結果は、ドメイン方向およびその温度依存性が関連していると考えられる。次に、ドメイン境界での局所的ポテンシャル変調を観測した結果を図 1(b) に示す。電圧分布にしたがって、線形にエネルギーシフトすることに加えて、複数箇所ピークの不連続性が見られた。これは O 1s だけでなく、Ti 2p, Ba 3d ピークにおいても同様であった。これらの結果は、ドメイン境界で局所的に存在するポテンシャル障壁を可視化したものと考えられる。当日は、XPS, ホール効果測定の詳細と DFT 計算結果と併せて議論する。

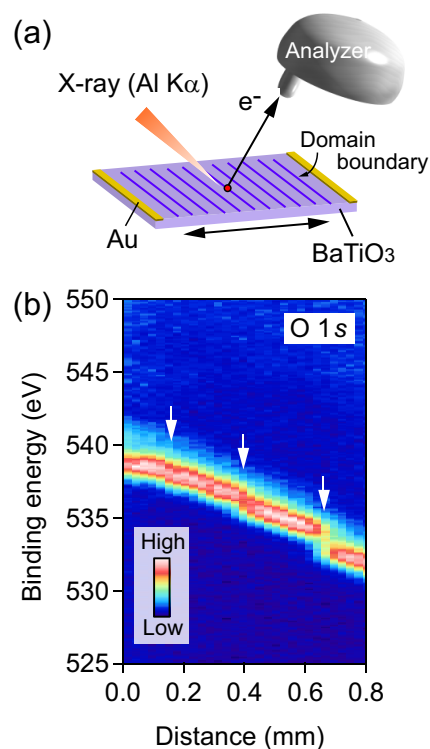


図 1: (a) 本実験における XPS 測定概念図. (b) +15 V 印加時の O 1s ラインスキャン結果. ピークの不連続性が複数観察されている (矢印).