

BaTiO₃ 多面体粒子の相転移と結晶構造

Phase transitions and crystal structure of BaTiO₃ polyhedra

広大院¹, 山梨大院²

○(M2) 山内 礼士¹, Kim Sangwook¹, 森吉 千佳子¹, 黒岩 芳弘¹

藤井 一郎², 上野 慎太郎², 和田 智志²

Hiroshima Univ.¹, Univ. of Yamanashi.²

°Reiji Yamauchi¹, Kim Sangwook¹, Chikako Moriyoshi¹, Yoshihiro Kuroiwa¹,

Ichiro Fujii², Shintaro Ueno², and Satoshi Wada²

E-mail: reiji-yamauchi@hiroshima-u.ac.jp

【はじめに】

代表的なペロブスカイト型強誘電体であるチタン酸バリウム (BaTiO₃: BT) の誘電特性は結晶のサイズにより大きく変化する。粒径が 100 nm 程度を下回るナノ微粒子では、結晶全体に占める表面の立方晶成分の割合が大きくなり、誘電率が低下するというサイズ効果の存在はよく知られている[1]。一方、外形が菱形 12 面体のような特徴的な形状のチタン酸バリウム粒子 (BT 多面体微粒子) の合成についての報告がある[2]。合成された BT 多面体粒子は、3 μm 程度の大きな粒径に揃っているにも関わらず、室温で立方晶系の対称性をもつことが示唆された。本研究の目的は、このような特異な結晶外形の BT 多面体粒子に対して、放射光粉末 X 線回折実験を行い、一粒子の構造モデルを提案することで、構造相転移のしくみについて議論することである。

【実験】

放射光粉末 X 線回折実験は SPring-8 BL02B2 で行われた。検出器には 1 次元半導体検出器 (MYTHEN) (Dectris 社) を用いた。回折パターンは温度変化は、窒素吹付装置を用いて 100 K から 473 K の範囲で行われた。

【結果】

BT 多面体粒子で観察された 330 K の (200) 反射の回折プロファイルを Fig. 1 に示す。通常のパルク BT では、この温度において正方晶構造であり、(200)ピークは 2 本に分離して観測される。しかし、BT 多面体粒子では、2 本のピークの間に、立方晶構造からの強い回折ピークが観測された。このことは、よく知られた微粒子の構造モデルとは異なり、多面体粒子内に存在する構造相転移しない立方晶成分の割合が極めて大きいことを示唆している。

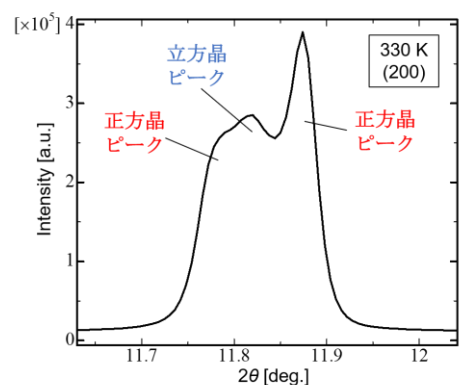


Fig 1. BT 多面体微粒子の(200) 回折プロファイル

【参考文献】

[1] T. Hoshina, J. Ceram. Soc. Jpn. **121** (2013) 156.

[2] J. Yang et al., Cryst. Eng. Comm. **14** (2012) 2959.