マイクロオーダーの粒サイズをもつ $BaTiO_3$ 多面体粒子の構造相転移

Structural phase transitions of $BaTiO_3$ polyhedral particles with dimensions in the order of micrometers

広島大学 [1]，山梨大学 [2]
○(B)福島　凪世 [1]，山内 礼士 [1]，Kim Sangwook [1]，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]
°(B)Nagise Fukushima[1], Reiji Yamauchi[1], Kim Sangwook [1], Chikako Moriyoshi [1], Yoshihiro Kuroiwa[1],
Ichiro Fujii [2], Shintaro Ueno [2], and Satoshi Wada [2]
E-mail:nagise-fukushima@hiroshima-u.ac.jp

[はじめに]　強誘電体チタン酸バリウム $BaTiO_3$ はその高い誘電率により、積層セラミックコンデンサをはじめとする電子部品の誘電体材料として広く使われている。一般のバルク相当の $BaTiO_3$ は、高温から温度を下げると 400 K 付近で立方晶から正方晶に相転移する。しかし、数 10 nm程度のナノ粒子は、相転移せず、誘電率が低下するというサイズ効果を示す[1]。一方、粒径が数マイクロメートル程度と比較的大きいにも関わらず、一見しただけでは室温で立方晶構造を示す多面体 $BaTiO_3$ の存在も報告されている[2]。本研究では、粒径 1~3 μm程度の多面体 $BaTiO_3$ を独自に合成し、構造相転移を詳細に調べることを目的とした。そのために大型放射光施設 SPring-8 の BL02B2 で粉末回折実験を行った。

[実験方法・結果] 菱形 12 面体形状の $BaTiO_3$ 粒子を水熱合成法により合成した。1 次元半導体検出器(MYTHEN)を用いて、100 ~ 573 K の温度範囲で回折プロファイルを得た。比較のため粒径 500 nm の標準試料(堺化学工業 BT05)についても同様の実験を行った。Fig.1 に室温における(200)反射付近の回折プロファイルを示す。標準試料ではスプリットした二つの正方晶ピークが観測されるのに対し、多面体 $BaTiO_3$ では正方晶ピークの間に立方晶由来のピークが観測された。また 573 K では、3 種類の格子定数の異なる立方晶成分が共存することを見出した。これら 3 つの立方晶成分の電子密度分布から強誘電相転移をするプロトタイプ構造の化学結合の特徴を明らかにすることができた。

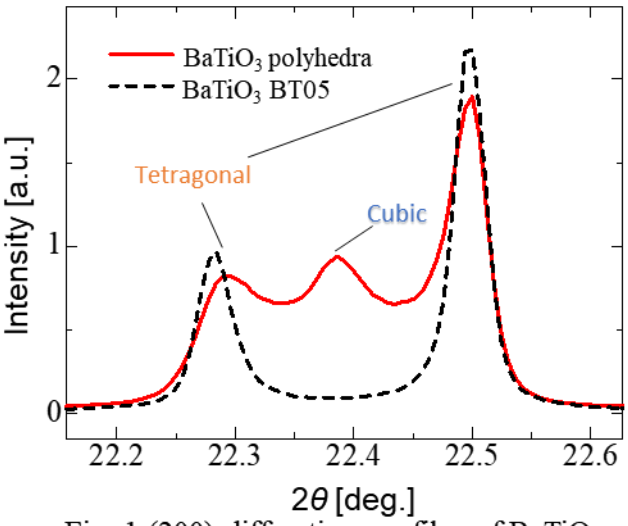

Fig. 1 (200) diffraction profiles of $BaTiO_3$ polyhedra and BT05 at room temperature

【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.

© 2022年 応用物理学会