

BaTiO<sub>3</sub> 八面体結晶の構造相転移Structural phase transition of BaTiO<sub>3</sub> octahedral crystal広島大学<sup>1</sup>, 山梨大学<sup>2</sup>,○(B)白川 皓介<sup>1</sup>, 福島 凧世<sup>1</sup>, Kim Sangwook<sup>1</sup>, Nam Hyunwook<sup>2</sup>藤井 一郎<sup>2</sup>, 上野 慎太郎<sup>2</sup>, 和田 智志<sup>2</sup>, 黒岩 芳弘<sup>1</sup>Hiroshima Univ.<sup>1</sup>, Univ. of Yamanashi.<sup>2</sup>,○Kosuke Shirakawa<sup>1</sup>, Nagise Fukushima<sup>1</sup>, Sangwook Kim<sup>1</sup>, Hyunwook Nam<sup>2</sup>,Ichiro Fujii<sup>2</sup>, Shintaro Ueno<sup>2</sup>, Satoshi Wada<sup>2</sup>, and Yoshihiro Kuroiwa<sup>1</sup>

E-mail: shirakawakousuke@hiroshima-u.ac.jp

チタン酸バリウム BaTiO<sub>3</sub> は優れた強誘電性を示すことから、誘電体材料として広く用いられてきた。通常 BaTiO<sub>3</sub> は、高温の立方晶から、正方晶、斜方晶、菱面体晶の順で強誘電相に逐次相転移する。しかし、粒径が数十 nm 程度の BaTiO<sub>3</sub> 微結晶では相転移しない領域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を示す[1]。一方、数 μm 程度の大きさであるにも関わらず、室温で立方晶構造をもつ BaTiO<sub>3</sub> 多面体結晶の存在が報告されている[2]。本研究ではこのような特別な形状をもつ BaTiO<sub>3</sub> に注目し、粒径 0.5 μm 程度の BaTiO<sub>3</sub> 八面体結晶を合成し、構造相転移を調べた。

八面体形状の BaTiO<sub>3</sub> 結晶は、水熱合成法により合成された。放射光粉末解析実験は SPring-8 の BL02B2 で行われた。100 ~ 573 K の温度範囲で回折プロファイルを測定し、Rietveld 法により構造解析を行った。比較のための試料として、粒径 500 nm の標準試料（堺化学工業 BT05）を用いて、同様の実験を行った。Fig. に、(200) 反射付近の回折プロファイルの温度変化を示す。

BT05 では、温度変化に伴ってピークがスプリットし、正方晶、斜方晶、菱面体晶に相転移することがよく確認できる。一方、八面体結晶では、正方晶や斜方晶といった中間相構造が顕わには観測されず、広い温度範囲で相転移が起こり菱面体晶に構造相転移しているように見える。また回折ピークの非対称性から、八面体結晶は、一粒子の中に複数の構造が共存するコンポジット構造をもつと考えられる。

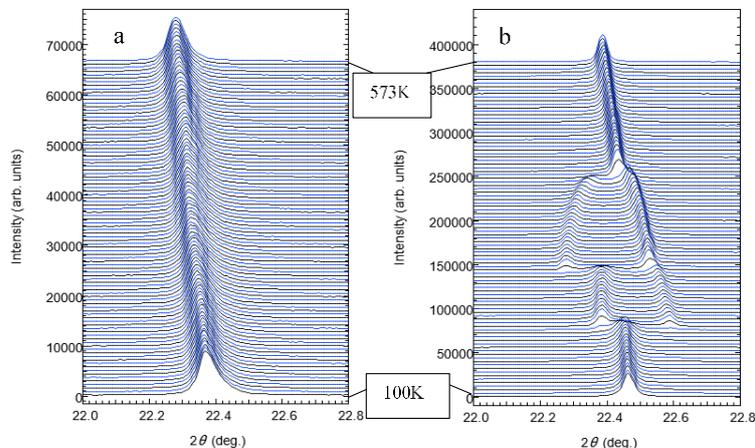


Fig. Temperature dependence of diffraction patterns around (200) peak of BaTiO<sub>3</sub> octahedra and BT05 from 100 to 573 K (a) BaTiO<sub>3</sub> octahedra and (b) BT05

[1] T. Hoshina, J.Ceram. Soc. Jpn. **121** (2013) 156. [2] J. Yang et al., Cryst. Eng. Comm. **14** (2012) 2959