

課題番号 : 2014B-E16
 利用課題名 (日本語) : 高エネルギーX線回折を用いた Bi,Mn 共添加 BaTiO₃ の局所構造解析
 Program Title (English) : Local structure of Bi,Mn co-doped BaTiO₃ by means of high energy x-ray diffraction
 利用者名 (日本語) : 藪田 久人¹⁾, 久保田 純¹⁾, 米田 安宏²⁾
 Username (English) : H. Yabuta¹⁾, M. Kubota¹⁾, Y. Yoneda²⁾
 所属名 (日本語) : 1) キヤノン株式会社, 2) 原子力機構
 Affiliation (English) : 1) Canon Inc., 2) Japan Atomic Energy Association
 キーワード : 二体相関分布関数、PDF、局所構造、チタン酸バリウム、強誘電体

1. 概要(Summary)

Bi,Mn を共添加したチタン酸バリウム(BaTiO₃)セラミックスの誘電特性と局所構造の相関を見出す目的で、Bi,Mn 共添加 BaTiO₃ の高エネルギーX線回折を実施し、二体相関分布関数解析を行った。そのパターンはほとんどが平均構造である正方晶ペロブスカイト構造で説明できるのであったが、Ti-O 結合に対応する局所構造において添加物による変化が見られた。

2. 実験(目的,方法) (Experimental)

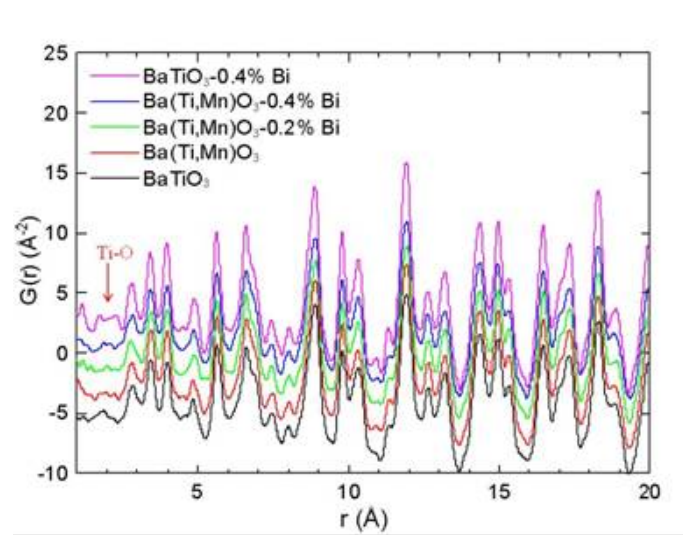
BaTiO₃ は BiFeO₃ など Bi ペロブスカイト物質との固溶により特異な振舞いを示すことに興味を持ち、新たな電子材料開発への足掛かりにすべく研究を開始した。今回の実験では、BaTiO₃ の添加元素として最もポピュラーな Mn を選択し、Bi と Mn の共添加 BaTiO₃ を研究対象とした。局所構造の観点から、Bi,Mn 共添加 BaTiO₃ の強誘電物性変化と局所構造の相関を見出すことを目的とした。

今回の実験に用いた試料は Bi(0.2/0.4mol%)および Mn(0.5mol%)を共添加した BaTiO₃、それぞれ Bi(0.4mol%)のみ、Mn(0.3mol%)のみを添加した BaTiO₃、および無添加の BaTiO₃ セラミックス試料の5種である。それらの試料を粒度の細かい粉末にしてカプトンチューブに充填した。BL14B1 においてサジタルフォーカスベンダーによって集光した 60keV の高エネルギーX線を試料に照射し、ディフラクトメータにより 2θを 48° までスキャンすることで、高い波数までの粉末X線回折パターンを得た。なお、スキャン範囲を4分割し、高角度側の測定時の計数時間を長くすることで、強度の弱い高波数でのノイズの影響を極力排除した。得られた回折データに対し、吸収補正と多重散乱補正を行ったのちにフーリエ変換をすることで二体相関分布関数(PDF)を得た。

3. 結果と考察(Results and Discussion)

Bi(0.2/0.4mol%),Mn(0.5mol%)共添加、Mn(0.3mol%)添加、Bi(0.4mol%)添加、および無添加の BaTiO₃ 試料の PDF を

下図に示す。横軸 $r \approx 3 \text{ \AA}$ にあるピークはBa-O結合を示しており、それ以上のrにあるPDFはすべての試料でほぼ同じパターンを示していることがわかる。このパターンは粉末X線回折 Rietveld 解析から得られた平均構造でおおよそ説明できるものである。しかし、2 Å 近傍に存在する Ti-O に起因するピークは試料により異なっていることが見て取れる。無添加の BaTiO₃ は Ti-O ピークも含めて平均構造である正方晶ペロブスカイト構造とおおよそ一致するが、Bi 添加ではその形状が変化し、Mn 添加および Bi,Mn 共添加ではその強度も減衰している。すなわち Bi,Mn 添加により BaTiO₃ の局所構造、特に TiO₆ 酸素八面体の局所構造が何らかの変化が生じたものと推察される。



4. その他・特記事項 (Others)

- [1] I. Fujii et al., Jpn. J. Appl. Phys. 50, 09ND07(2011).
- [2] H. Yabuta et al., Jpn. J. Appl. Phys. 51, 09LD04(2012).