

課題番号 : 2016A-E12
 利用課題名 (日本語) : 高エネルギーX線回折を用いた BaTiO₃の局所構造解析
 Program Title (English) : Local structure analysis on BaTiO₃ by high-energy X-ray diffraction
 利用者名 (日本語) : 塚田真也¹⁾, 米田 安宏²⁾
 Username (English) : S. Tsukada¹⁾, Y. Yoneda²⁾
 所属名 (日本語) : 1) 島根大学教育学部, 2) 日本原子力研究開発機構
 Affiliation (English) : 1) Faculty of Education, Shimane University, 2) Japan Atomic Energy Agency
 キーワード :

1. 概要 (Summary)

不均一構造がしばしば創る巨大な外場応答の理解は、物理だけでなく工業的にも価値がある。強誘電体では、 $10^{-6} \sim 10^{-3}$ m の分域(電気分極したマイクロ～ミリ領域)や $\sim 10^{-9}$ m のポーラーナノリジョン(電気分極したナノ領域)という不均一構造が存在し、電場が外場に相当する。電場を印加した際、分域やポーラーナノリジョンが再配列する・そして電場を除くと元に戻る場合、巨大な電気応答が現れる。本研究では、ペロブスカイト型強誘電体における不均一性の影響を明らかにするために二体相関関数を求めて、微視的～巨視的な構造を丁寧につなぐ。そして、構造から物性(主に誘電性・圧電性)の発現機構に関して知見を得る。

今回は、チタン酸バリウム(BaTiO₃)と二チタン酸バリウム(BaTi₂O₅)を調べる。同じ元素で構成されているが構造や誘電率(図 1)が異なる 2 種類の物質を対象とすることで、構造の階層性と巨視的な性質の関係を明らかにする。角度分解変更ラマン分光により、振動・緩和といった動的な情報は得ており、この実験を行うこ

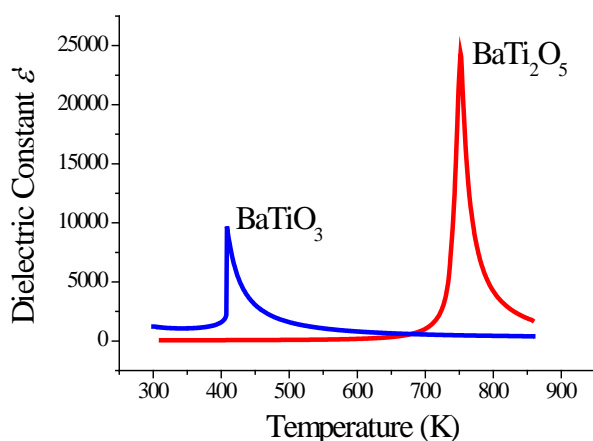


図 1. BaTiO₃ と BaTi₂O₅ における電場に対する電荷応答(誘電率)の温度依存性。(文献[1]から抜粋)

とで時空間の揺らぎが明らかになる。将来的には、ここで得られた知見を試料合成に活かす。

2. 実験 (目的,方法) (Experimental)

試料名、実験方法、使用装置・実験測定条件

BaTiO₃ と BaTi₂O₅, 粉末回折測定, BL14B1・入射エネルギー~60 keV

3. 結果と考察 (Results and Discussion)

BaTiO₃では、温度を変えて PDF 解析・Rietveld 解析を行い、巨視的な構造と微視的な構造の比較を行った。構造相転移(巨視的な変化)をしても微視的な構造が変化せず、 10 \AA 程度の不均一性の平均構造として、巨視的な性質が現れていると考える。ラマン分光の結果と比較して、不均一性の点群は菱面体の $3m$ で矛盾なく説明できることが分かり、その不均一構造の臨界緩和により、相転移(巨視的な性質の変化)を引き起こすことが分かった。

BaTi₂O₅では、300K で PDF 解析・Rietveld 解析を行った。その結果、巨視的な構造と微視的な構造が一致した。ラマン分光法でも不均一構造の存在は認められなかった。これらの結果を図 2 にまとめる。

2 種類の物質は構成元素は同じだが、強誘電性相転移温度・誘電率など多くの違いがある(図 1)。特に、大きな誘電応答には不均一構造が不可欠であると理解されてきたが、均一な BaTi₂O₅の強誘電性相転移で、不均一な BaTiO₃よりも大きな誘電応答を示すことが明らかになった。均一な緩和現象だけでも十分に大きな誘電率が出現するという事は、非常に興味深い。これまでの秩序・無秩序型の相転移機構を深く理解することでさらに大きな外場応答を発言できる可能性を示している。

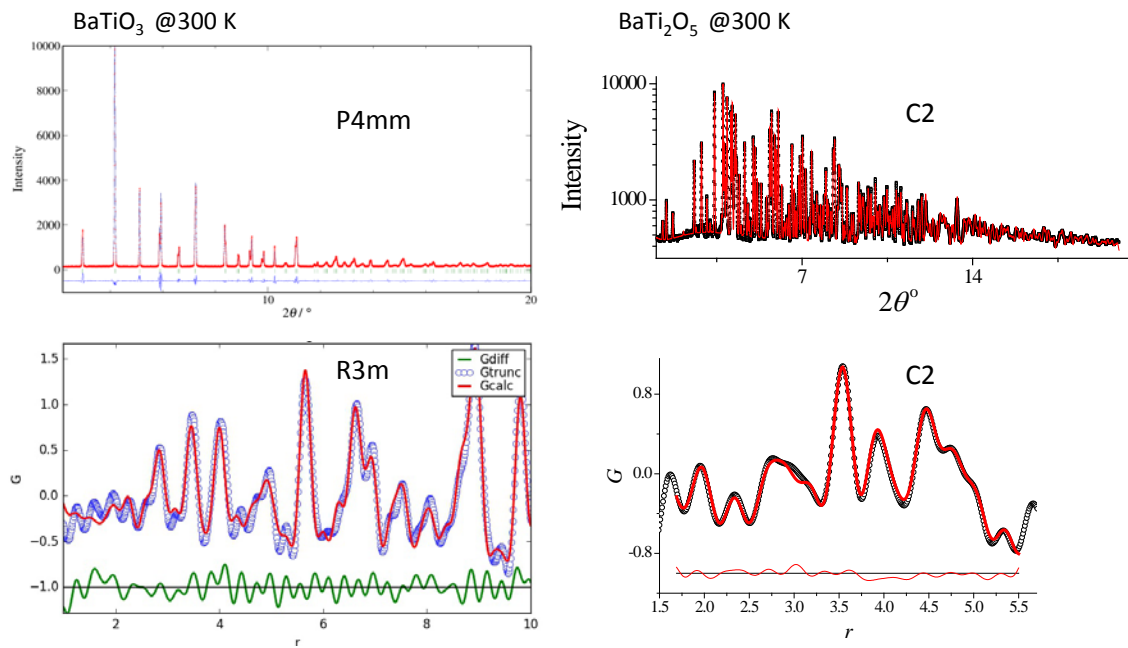


図 2. BaTiO₃ と BaTi₂O₅ における Rietveld 解析と PDF 解析. BaTiO₃ では平均構造と微視的な構造が異なり, BaTi₂O₅ では平均構造と微視的な構造が一致することが分かった.

4. その他・特記事項 (Others)

引用文献

- [1] S. Tsukada and Y. Akishige, Jpn. J. Appl. Phys. **51**, 09LC01/1-4 (2012).

競争的資金

科研費基盤(C), 16K04931