

# 顕微ラマン分光法によるチタン酸バリウム粉末のサイズ効果の評価

河東田研究室 1100195 川谷健太

## 1. 背景

強誘電体であるチタン酸バリウム( $\text{BaTiO}_3$ :BTO)はペロブスカイト構造を持ち、極めて高い比誘電率、強誘電性を有することから強誘電体材料や誘電体材料として広く使用されている。近年、強誘電体を微細化、薄膜化、集積化することで新たなデバイスを実現しようという試みが行われている。そして、強誘電体を用いたデバイス等の小型化に伴い、ナノメートルオーダーでの構造制御や微細結晶の特性向上が求められている。しかし、 $\text{BaTiO}_3$ には誘電特性などの物性が試料サイズによって変化する、いわゆる「サイズ効果」が存在することが知られている。しかし、 $\text{BaTiO}_3$ のサイズ効果の本質的な原因は、未だ解明されていない。

## 2. 研究目的

非接触かつ高温下での測定が可能であるラマン分光装置を用いて、粒子サイズによる物性の変化のみ捉えることができる $\text{BaTiO}_3$ 粉末試料を測定しサイズ効果を明らかにする。

## 3. 実験方法

BTO粉末を常温から高温域までラマン測定し、その結果から結晶構造の評価を行った。微粒子では常温時において立方晶であるのかXRDを用いて調査した。粒子複合構造モデルについてラマン測定の結果から調査した。

## 4. 結果

平均粒径500nmの結果はバルクと近い結果となったのに対し、50nmの結果は室温時から一般的なラマンスペクトルから逸脱した結果となった。微粒子をXRDで測定した場合、立方晶であることが分かると知られているが、ラマン測定では立方晶と異なる結果となった。500nm測定結果では $45^\circ$ 付近に[002]と[200]のダブルピークが見られたのに対し、50nmの $45^\circ$ 付近のピークは一本であった。これはa軸とc軸の長さが等しいことを表している。よって50nmのBTO粉末は立方晶だと言える。また100nmも同じ傾向であった。

三層が混在している200nmのラマンスペクトルから傾斜層が大半を占める50nmのラマンスペクトルを引いて立方晶のみのラマンスペクトルを求めたところ、500nmのラマンスペクトルと類似した結果が求められた。よって粒子複合構造モデルは信頼できると考えられる。

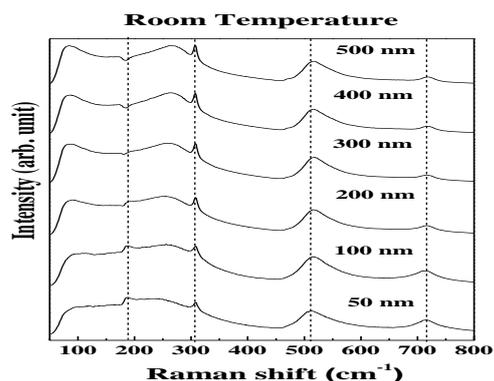


図 常温時での各粒径のラマンスペクトル

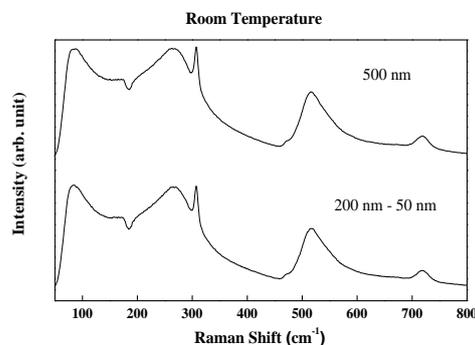


図 500 nm と 200-50 nm の比較

## 5. 考察

粒子複合構造モデルを踏まえると、500nmのラマンスペクトルは立方晶層が強く映し出され、50nmのものは傾斜層と立方晶層が強く示されているとわかる。

微粒子をXRDで測定した時、立方晶であるのは立方晶層よりも立方晶層が体積を占めているからであると考えられる。