チタン酸バリウムの酸素欠損の熱処理温度依存性

河東田研究室

1120193 道浦大樹

1. 実験背景・目的

チタン酸バリウムには、高い誘電性・圧電性・焦電性などがあり、セラミックコンデンサ、圧電素子、サーミスタなどへ応用されている。近年電子デバイスの小型化・高性能化に伴い、誘電体材料も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、小型化に伴い酸素欠損の影響が問題になっている。

本研究では酸素欠損が起こる最低温度が何℃なのかを明らかにする。

2. 実験方法

チタン酸バリウム(BTO)を水素雰囲気中で熱処理を行い、ラマン分光法により測定を行った。

3. 実験結果及び考察

3-1 偏光特性を測定し、酸素(B_1)モードを明らかにする。

偏光特性を測定することにより、A_1・B_1・E モードを分離することができる。縦偏光を測定することにより、横振動 E モードを A_1・B_1 モードから分離する。E モードはラマンピーク全体に混ざっており、E モードを分離することによりピークが減少するのが A_1 モードである。B_1 モードは酸素の変形八面体運動によりチタンやバリウムの含有量に依存しないのでピークが変化しない。よって B_1 モードを明らかにすることができる。偏光特性とは、以下の図のことである。

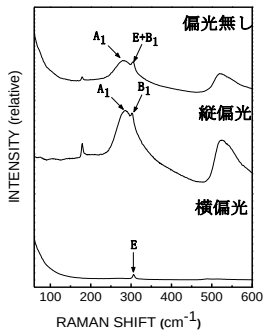

図1:500℃の偏光特性

3-2 熱処理を行ったBTOの縦偏光を比較する。

400~700℃で熱処理を行なった BTO の縦偏光を熱処理前の BTO の縦偏光と比較する。酸素欠損が起こっていると、B_1 モードのピークが低波数側にシフトする。シフトしていることで、酸素欠損を起こしていることがわかると考えられる。また、400、450℃で高波数側にシフトしているのは、熱処理によって結晶構造が変化した為だと考えられる。以下の図は熱処理前のBTOと熱処理を行なったBTOの比較とピーク位置の図である。

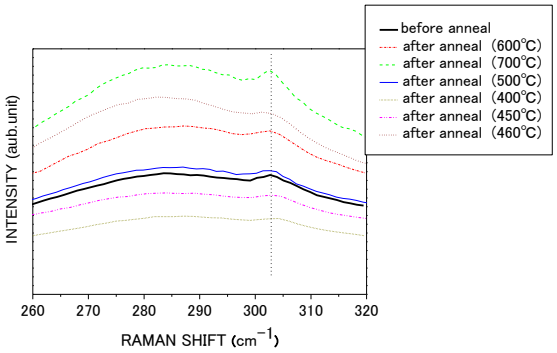

図2:縦偏光のラマンスペクトルの比較

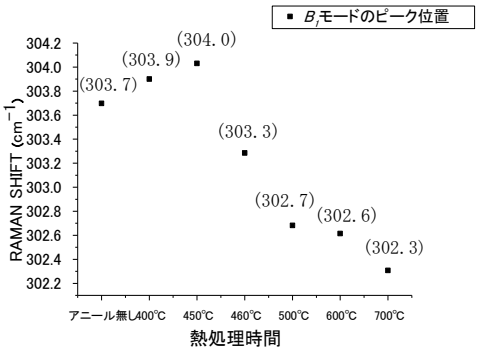

図3:酸素(B_1)モードのピーク位置

4.まとめ

本研究によりチタン酸バリウム(BTO)酸素欠損を起こす最低温度は460℃であることが明らかになった。