



BaTiO₃ ナノ結晶の誘電・触媒特性

早川知克, Gan Rongguang, 岡亮平

名古屋工業大学 工学専攻 生命応用化学系 環境セラミックスプログラム

キーワード：ペロブスカイト型結晶、ナノ結晶、BaTiO₃、表面改質、構造解析

1. 背景と研究目的

BaTiO₃ ナノ結晶を用いた誘電・電導・触媒材料の研究・開発が近年、ますます盛んになっている[1-3]。本研究では、BaTiO₃ ナノ結晶に Ca²⁺, Mg²⁺, Sr²⁺などを添加した材料の結晶構造と表面触媒反応特性や粒界誘電特性がマクロな材料性能に及ぼす影響を明らかにすることを目的としている。今回 BL5S2 ビームラインを用いて放射光 XRD データを取得しリートベルト解析により、高い触媒性能が報告されている Ca 添加 BaTiO₃ ナノ結晶[3]の格子定数や結晶相割合など詳細な構造情報を調べた。

2. 実験内容

試料には市販 BaTiO₃ ナノ結晶 (Aldrich, 平均粒径 102nm) を所定濃度の Ca 硝酸塩溶液に浸漬・乾燥させ、大気中 800°Cにて 4 時間加熱したものを用いた[3]。事前分析の結果、Ca 添加による比表面積及び粒径の変化は僅かであり、電子顕微鏡観察により Ca 成分は BaTiO₃ 表面に良好に分散していることを確認している[3]。実験では試料粉末を 0.3mm φ キャピラリーに充填し、BL5S2 ビームラインにてエネルギー 15.5 keV (波長 0.80 Å)、回折角 2θ=0.13~94.7°の条件で放射光 X 線回折 (SR-XRD) データを取得した。そして、BaTiO₃ 結晶情報等を参照し RIETAN-FP [4]にて、SR-XRD データのリートベルト解析を行った。

3. 結果および考察

Fig.1 に無添加 BaTiO₃(BTO)及び 3wt%Ca 添加 BaTiO₃(3CBTO)試料の SR-XRD データとその解析結果を示す。SR-XRD データのピークは立方晶 BaTiO₃のパターンを示すが、詳細な解析の結果、立方晶 Pm3m ($a=4.0068 \text{ \AA}$) と正方晶 P4mm ($a=3.9976 \text{ \AA}$, $c=4.0241 \text{ \AA}$) の共存系であること、その割合はおおよそ 1 : 1 であることがわかった。また、少ないながらも 2%程度の BaCO₃-Pnma に帰属されるピークが検出されたことから、表面が部分的に炭酸塩化していることが確認された。Ca 添加濃度の異なる試料についても同様に解析を行ったところ、(Ba,Ca)CO₃は 10%未満であるが、Ca 添加量の増加とともにその量が直線的に増加すること、BaTiO₃ は立方晶相が減り正方晶相が増える傾向を示すことが分かった。

4. 参考文献

[1] N. Mohamed-Noriega, J. Grothe, S. Kaskel, *Nanomaterials* **15** (2025) 1226. [2] H. Pawar, M. Khan, M. Kumari, U.K. Dwivedi, T. Prasad, R. Kumar, S. Rathore, *Appl. Phys. A* **127** (2021) 384. [3] R. Gan, A. Ziegler, B. Meyer, Y. Nishida, M. Haneda, T. Hayakawa, *Appl. Surf. Sci.* **713** (2025) 164164. [4] F. Izumi, K. Momma, *Solid State Phenom.* **130** (2007) 15–20.

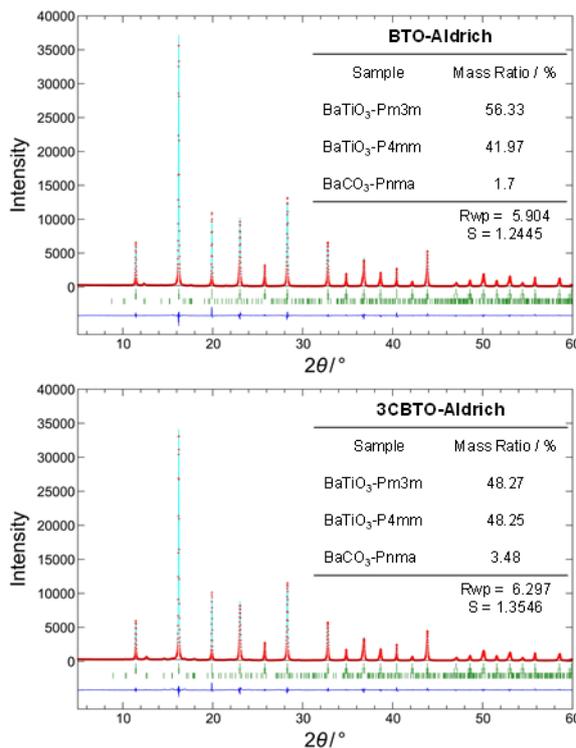


Fig.1 Results of Rietveld refinement for non-doped (BTO) and 3wt%Ca-doped BaTiO₃ (3CBTO) powders. BTO ($R_{wp}=5.904$, $S=1.2445$): cubic (Pm3m) $a=4.00689(9) \text{ \AA}$; tetragonal (P4mm) $a=3.99756(17) \text{ \AA}$, $c=4.02409(15) \text{ \AA}$. 3CBTO ($R_{wp}=6.297$, $S=1.3546$): cubic (Pm3m) $a=4.00683(13) \text{ \AA}$; tetragonal (P4mm) $a=3.99779(17) \text{ \AA}$, $c=4.2319(17) \text{ \AA}$.