

Yttrium이 첨가된 BaTiO₃의 전기전도도 (Electrical Conductivity of Y-doped BaTiO₃)

성균관대학교 금속재료공학부 재료공학전공: 정지훈, 한영호

1. 서론

희토류산화물 중 Yttrium은 이온반경이 약 0.9Å으로 Ba²⁺이온(1.4Å)과 Ti⁴⁺이온(0.6Å)의 중간 크기에 해당하기 때문에, BaTiO₃ 격자 내에서 Ba/Ti비에 따라 Ba자리 또는 Ti자리를 치환할 수 있다. 과잉의 TiO₂(Ba/Ti<1)인 경우 Y이온이 Ba 자리를 치환하여 Y_{Ba}의 donor 불순물이 되고, 과잉의 BaO(Ba/Ti>1)인 경우 Y이온이 Ti 자리를 치환하여 Y_{Ti}의 acceptor 불순물로 거동한다. 또한 Ba/Ti=1.000인 화학 양론적 BaTiO₃에 Y₂O₃가 첨가될 경우 Ba 자리와 Ti자리를 동시에 치환하는 self-compensation의 특징적인 거동을 나타낸다. 본 연구에서는 acceptor로서 첨가된 Yttrium이 BaTiO₃에서 양이온 비화학양론과 첨가 불순물에 의한 결함밀도가 고온에서 평형상태 전기전도도에 미치는 영향과 용해도 한계를 고찰해 보았다.

2. 실험방법

원료분말은 Pechini가 개발한 액체 혼합법에 의하여 제조하였다. 하소가 끝난 분말을 전기전도도 측정용을 위해 103MPa의 압력하에 직육면체 bar형태로 성형하였고, 소결전 시편에 작은 구멍을 뚫어 백금선을 넣은 후 1320°C에서 5시간 동안 air 분위기에서 소결하였다. 소결된 시편을 900°C에서 1100°C까지 산소분압에 따른 전기전도도를 측정하였다. 산소분압은 N₂, O₂, CO 그리고 CO₂의 혼합가스를 이용하여 조절하였다.

3. 실험결과

1000°C에서 측정한 평형산소분압에 따른 전기 전도도를 통해 Yttrium이 B site에 doping된 경우 전형적인 acceptor 거동을 보임을 확인 할 수 있었다. Y₂O₃의 첨가량이 0.2-6 mol%로 증가함에 따라 전기전도도의 최소점이 낮은 산소분압으로 이동하였다. Y₂O₃의 첨가량이 6 mol% 이상인 경우 전기전도도의 최소점이 더 이상 이동하지 않았다. Y₂O₃의 첨가에 따른 산소 vacancies의 생성도 6 mol%까지는 증가하였으나 6 mol%이상에서는 산소 vacancies도 더 이상 증가하지 않았다. 따라서 Yttrium이 acceptor로 첨가되는 경우의 고용한계는 6 mol%임을 알 수 있었다.

4. 참고문헌

- 1) N. H. Chan, R.K. Sharma, AND D.M. Smith, J. Am. Ceram. Soc., Vol. 65, No.3, pp. 167-170 (1982)
- 2) L.A. Xue, Y. Chen and R.J. Brook, Materials Science and Engineering, B1(1988), pp. 193-201