อทิพงศ์ บุตรชานนท์ : โครงสร้างเฉพาะบริเวณและสมบัติไดอิเล็กทริกของวัสดุรีแลกเซอร์เฟร์โรอิเล็กทริกตระกูลแบเรียมไททาเนต (LOCAL STRUCTURE AND DIELECTRIC PROPERTIES OF BARIUM TITANATE-BASED RELAXOR FERROELECTRICS). อาจารย์ที่ปรึกษา : รองศาสตราจารย์ ดร.รัตติกร ยิ้มนิรัญ, 211 หน้า.

วิทยานิพนธ์นี้มุ่งศึกษาความสัมพันธ์ของโครงสร้างเฉพาะบริเวณที่นำไปสู่การเปลี่ยนสมบัติทางไดอิเล็กทริกของวัสดุ เพื่อให้สามารถเข้าใจกระบวนการการเปลี่ยนสมบัติทางไดเล็กทริกได้ดีมากยิ่งขึ้น ในงานนี้วัสดุที่สนใจคือวัสดุประเภทรีแลกเซอร์ตระกูลแบเรียมไททาเนตคือ วัสดุแบเรียมเซอร์โคเนียมไททาเนต (BZT) วัสดุแบเรียมสแตนเนียมไททาเนต (BST) และวัสดุผสมระหว่างแบเรียมไททาเนตกับบิสมัทซิงค์ไททาเนต (BT-BZnT) เพราะมีการนำไปประยุกต์ใช้อย่างแพร่หลาย เช่น ตัวเก็บประจุ ทรานซิสเตอร์ ตัวแปลงสัญญาณ เป็นต้น

ในระบบของวัสดุแบเรียมเซอร์โคเนียมไททาเนต (BZT) ได้ตรวจสอบโครงสร้างผลึกด้วยเทคนิคการเลี้ยวเบนรังสีเอกซ์ (XRD) และการดูดกลืนรังสีเอกซ์ (XAS) ผลการตรวจสอบจากเทคนิคการเลี้ยวเบนรังสีเอกซ์ไม่พบการเปลี่ยนโครงสร้างเฟสของผลึกที่ชัดเจน ส่วนผลการตรวจสอบจากเทคนิคการดูดกลืนรังสีเอกซ์ในขอบ L_3 ของเซอร์โคเนียม พบว่าเซอร์โคเนียมเข้าไปแทนที่ไทเทเนียมในแบเรียมไททาเนตและพบโครงสร้างเฉพาะบริเวณค่อยๆ เปลี่ยนรอบๆ อะตอมเซอร์โคเนียม ผลการดูดกลืนรังสีเอกซ์ในขอบ K ของไทเทเนียม พบว่าการเพิ่มขึ้นของเซอร์โคเนียมในแบเรียมไททาเนตส่งผลต่อการเปลี่ยนพฤติกรรมแบบรีแลกเซอร์ (Relaxor) ไปสู่พฤติกรรมแบบกลุ่มขั้ว (Polar cluster) แบบฉับพลัน ซึ่งสอดคล้องกับการคำนวณสเปกตรัมโดยโปรแกรม FEFF8.2 และการหาแนวโน้มของกราฟ EXAFS ซึ่งสามารถยืนยันด้วยผลของการวัดสมบัติไดอิ-เล็กทริก

ในระบบของวัสดุแบเรียมสแตนเนียมไททาเนต (BST) ได้ตรวจสอบโครงสร้างผลึกด้วยเทคนิคการเลี้ยวเบนรังสีเอกซ์และการดูดกลืนรังสีเอกซ์ ผลการตรวจสอบจากเทคนิคการเลี้ยวเบนรังสีเอกซ์ไม่พบการเปลี่ยนโครงสร้างเฟสของผลึกที่ชัดเจน ส่วนผลการตรวจสอบจากเทคนิคการดูดกลืนรังสีเอกซ์ในขอบ L_3 ของสแตนเนียมพบว่าสแตนเนียมเข้าไปแทนที่ไททาเนียมในแบเรียมไททาเนตและพบโครงสร้างเฉพาะบริเวณค่อยๆ เปลี่ยนรอบๆ อะตอมของสแตนเนียม ผลการ

ดูดกลืนรังสีเอกซ์ในขอบ K ของไทเทเนียมพบว่าการเพิ่มขึ้นของสแตนเนียมในแบเรียมไททาเนต ส่งผลต่อการเปลี่ยนพฤติกรรมแบบรีแลกเซอร์ (Relaxor) ไปสู่พฤติกรรมแบบกลุ่มขั้ว (Polar cluster) อย่างฉับพลัน ซึ่งสอดคล้องกับเทคนิคการรวมกันเชิงเส้นและการคำนวณสเปกตรัมโดยโปรแกรม FEFF8.2 ซึ่งสามารถยืนยันด้วยผลของการวัดสมบัติไดอิเล็กทริก

ในระบบของวัสดุผสมระหว่างแบเรียมไททาเนตกับบิสมัทซิงค์ไททาเนต (BT-BZnT)ได้ตรวจสอบโครงสร้างผลึกด้วยเทคนิคการเลี้ยวเบนรังสีเอกซ์และการดูดกลืนรังสีเอกซ์ ผลการตรวจสอบจากเทคนิคการเลี้ยวเบนรังสีเอกซ์พบการเปลี่ยนโครงสร้างเฟสของผลึกที่ชัดเจนจากโครงสร้างแบบเตตระโกนอลไปสู่โครงสร้างแบบรอมโบฮีดอล ส่วนผลการตรวจสอบจากเทคนิคการดูดกลืนรังสีเอกซ์ในขอบ K ของซิงค์ พบว่าซิงค์เข้าไปแทนที่ไทเทเนียมในบิสมัทไททาเนตและผลการดูดกลืนรังสีเอกซ์ในขอบ K ของไทเทเนียม พบว่าการเพิ่มขึ้นของบิสมัทซิงค์ไททาเนตในแบเรียมไททาเนตส่งผลต่อการเปลี่ยนพฤติกรรมแบบเฟร์โรอิเล็กทริกไปสู่พฤติกรรมแบบรีแลกเซอร์ (Relaxor) แต่การดูดกลืนรังสีเอกซ์ในขอบ K ของซิงค์พบการเปลี่ยนแปลงเล็กน้อยของโครงสร้างเฉพาะบริเวณ ซึ่งสามารถยืนยันด้วยผลของการวัดสมบัติไดอิเล็กทริก

กล่าวโดยสรุป ในวัสดุทั้ง 3 ระบบจะแสดงการเปลี่ยนสมบัติไดอิเล็กทริกจากพฤติกรรมรีแลกเซอร์ไปสู่พฤติกรรมแบบกลุ่มขั้วและพฤติกรรมแบบเฟร์โรอิเล็กทริก ซึ่งสอดคล้องกับโครงสร้างเฉพาะบริเวณของอะตอมไททาเนียมจากโครงสร้างแบบคิวบิกเทียม (pseudo-cubic) หรือเกือบจะเป็นโครงสร้างรอมโบฮีดอล เมื่อจะเปลี่ยนไปสู่พฤติกรรมแบบกลุ่มขั้ว อะตอมไททาเนียมจะเคลื่อนที่กลับไปอยู่บริเวณตรงกลางของโครงสร้างเพอรอพสไกต์ และโครงสร้างจะลู่เข้าสู่โครงสร้างแบบคิวบิกที่สมบูรณ์ นอกจากนี้การเปลี่ยนสมบัติไดอิเล็กทริกไปสู่พฤติกรรมแบบเฟร์โรอิเล็กทริก จะสอดคล้องกับโครงสร้างรอมโบฮีดอลเปลี่ยนไปเป็นโครงสร้างเตตระโกนอล

สาขาวิชาฟิสิกส์ ลายมือชื่อนักศึกษา_____

ปีการศึกษา 2557 ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษา_____

ลายมือชื่ออาจารย์ที่ปรึกษาร่วม_____

ATIPONG BOOTCHANONT : LOCAL STRUCTURE AND DIELECTRIC PROPERTIES OF BARIUM TITANATE-BASED RELAXOR FERROELECTRICS. THESIS ADVISOR : ASSOC. PROF. RATTIKORN YIMNIRUN, Ph.D. 211 PP.

LOCAL STRUCTURE/XANES/$BaTiO_3$/RELAXOR/FERROELECTRIC

The relationship between local structure and phase information of dielectric materials has been studied in this thesis for understanding the process of phase transition. In this work, the materials of interest are $BaTiO_3$-based relaxor ferroelectrics; i.e., $BaTi_{1-x}Zr_xO_3$ (BZT), $BaTi_{1-x}Sn_xO_3$ (BST) and (1-x)$BaTiO_3$-x$BiTi_{0.5}Zn_{0.5}O_3$ (BT-BZnT) systems because they are used widely in electronic devices, such as capacitor, transistor and actuator.

In BZT system, the phase information was investigated by XRD and XAS. XRD technique did not clearly show the phase transition in BZT. The Zr L_3-edge XANES spectra showed that Zr atoms substituted in Ti sites in $BaTiO_3$ and local structure gradually changed around Zr atoms. The Ti K-edge XANES spectra showed that an increase of Zr content in $BaTiO_3$ affected suddenly the phase transition from relaxor ferroelectrics to polar cluster behavior which corresponded well with simulated spectrum by FEFF8.2 program and EXAFS fitting. The phase transition was also confirmed by the dielectric measurements.

In BST system, the phase information was investigated by XRD and XAS. XRD technique did not clearly show the phase transition in BST. The Sn L_3-edge XANES spectra indicated that Sn atoms substituted in Ti sites in $BaTiO_3$ and local structure gradually and linearly changed around Sn. The Ti K-edge XANES spectra

showed that an increase of Sn content in $BaTiO_3$ affected suddenly the phase transition from relaxor ferroelectrics to polar cluster behavior which corresponded well with the linear combination fit and simulated spectrum by FEFF8.2 program, and the phase transition was confirmed by the dielectric measurements.

In BT-BZnT system, the phase information was investigated by X-ray Diffraction and X-ray Absorption Spectroscopy. The results of X-ray diffraction technique clearly showed the phase transition from tetragonal to rhombohedral perovskite structure. The results of Zn K-edge XANES spectra indicated that Zn atoms substituted in Ti sites in $BiTi_{0.5}Zn_{0.5}O_3$ and the local structure around Zn atoms changed very little. The Ti K-edge XANES spectra showed that an increase of $BiTi_{0.5}Zn_{0.5}O_3$ content in $BaTiO_3$ affected gradually the phase transition from normal to relaxor ferroelectric behavior which corresponded well with the dielectric measurements.

In conclusion, the 3 systems exhibited the phase transition of dielectric properties from relaxor to polar cluster and normal ferroelectric behavior, which corresponded to the local structure of Ti atoms from pseudo-cubic or almost rhombohedral. In the change to polar cluster behavior, the Ti atoms gradually moved to central perovskite and the crystal structure changed to almost perfect cubic phase. Moreover, the change to normal ferroelectric behavior corresponded to the transition from pseudo-cubic or rhombohedral to tetragonal structure.

School of Physics
Academic Year 2014

Student's Signature_____
Advisor's Signature_____
Co-advisor's Signature_____