

**X-선과 중성자 회절을 이용한 BaO-Re<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-TiO<sub>2</sub> (Re = La, Nd, Y)계  
고주파 유전체의 결정구조 분석  
( Analysis of the crystal structure in BaO-Re<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-TiO<sub>2</sub>(Re=La, Nd, Y)  
microwave dielectric ceramics)**

호서대 재료화학공학부 김 정석\*, 강 현주, 심 해섭, 이 창희, 천 채일

### 1. 서론

BaO-Re<sub>2</sub>O<sub>3</sub>-TiO<sub>2</sub>계(Re = 희토류) 세라믹은 콘덴서 및 고주파 유전체로 사용되고 있다.<sup>1,2)</sup> 이 재료는 공업적 유용성이 많음에도 불구하고, 결정구조적 특징이 확실히 밝혀지지 않고 있다. 본 연구에서는 Re(희토류)자리에 이온 반경이 서로 다른 La, Nd, Y(1.18Å, 1.12Å, 1.01Å: 8배위 시 effective ionic radii based on  $r(\text{VI}O^{-2}) = 1.40\text{Å}$ ) 등을 치환하였을 때, 결정구조의 변화를 분석하였고, 이를 유전상수의 온도계수( $\tau_{\epsilon_r}$ ) 변화와의 관련성을 조사하였다. 산소이온 위치에 대한 정확한 분석을 위해 중성자 산란과 X-선 산란을 병행하였다. 또한 Colla등이 제안한<sup>9)</sup> 복합페롭스카이트계에서 Ti-O6 산소 팔면체의 tilting과  $\tau_{\epsilon_r}$  과의 관계가 본 텅스텐 브론즈계 재료에도 적용되는지 여부를 고찰하였다.

### 2. 실험방법

고순도의 BaCO<sub>3</sub>, TiO<sub>2</sub>, La<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, Nd<sub>2</sub>O<sub>3</sub>, Y<sub>2</sub>O<sub>3</sub> 분말을 사용하여, BaOLa<sub>2</sub>O<sub>3</sub>4TiO<sub>2</sub>과 BaO(Nd<sub>0.77</sub>Y<sub>0.23</sub>)<sub>2</sub>O<sub>3</sub>4TiO<sub>2</sub>의 두 시료를 제조하였다. 결정구조 분석은 Rietveld 정밀화법을 사용하였다. X-선 회절 데이터는 Rigaku Dmax-100 회절기를 사용하여 다음 조건에서 회절하였다 : CuK $\alpha$ , 40kV - 40mA, 0.04° /step, 2sec fixed time, DS=1.0°, SS=1.0°, RS=0.15mm 중성자회절은 한국 원자력연구소 내 하나로센터의 ST2-channel의 HRPD (high resolution powder diffractometer)를 이용하였다.

### 3. 실험결과 및 고찰

Mateeva등이 처음 제시한 결정구조의 결정학적 모순점을 해결하였다. Ti-O6팔면체는 tilted 및 변형된 구조를 갖고 있고, 이에 의해 같은 z-층에 있는 Ba 및 Re 이온이 변위되어 초격자 ( $c \approx 7.6\text{Å}$ )를 형성한다. Re 이온반경이 작은 B(NY)T의 Ti-O6팔면체가 tilting 및 변형이 큰 것으로 나타났다. 유전상수  $\epsilon_r$  과 온도계수  $\tau_{\epsilon_r}$  은 BLT의 경우 각각 109.5, -180ppm/°C였고, B(NY)T 경우 76, +40ppm/°C이었다. Re 이온 크기가 작은 시료의  $\tau_{\epsilon_r}$  이 +값을 나타내었다. 복합 페롭스카이트에서 관찰되는  $\tau_{\epsilon_r}$  과 팔면체 tilting과의 관계를 본 텅스텐 브론즈 구조재료에서 고찰하였다.