

CaTiO₃에서의 결함 화학 고찰 (Defect Chemistry of CaTiO₃)

성균관대학교 금속재료공학부 재료공학전공: 김현대, 한영호

1. 서론

CaTiO₃의 전기전도도 측정을 통한 억셉터 거동의 결함화학적 고찰은 BaTiO₃나 SrTiO₃와 달리 제한적인 연구가 수행되었다. CaTiO₃의 평형상태에서의 전기전도도 측정을 통한 양이온 비화학양론에 의한 연구결과, Han 등은 과잉의 CaO가 Ca_{Ti}⁺와 V_O^{••}를 생성하여 Ca이 억셉터 불순물 역할을 하게 된다고 제안하였다. 또한 Ti site에 외부적 억셉터 불순물의 역할을 하는 물질로 Mg⁺², Mn⁺³, Al⁺³등을 첨가하는 경우 억셉터 거동을 보이는 것으로 알려져 있다. 본 연구에서는 도핑되지 않은 CaTiO₃에서 Ca/Ti비에 따른 거동과 Ti site에 외부적 억셉터 불순물로 Mg⁺²을 첨가하였을 때 나타나는 현상을 고온에서의 전기전도도 측정을 통한 결함화학적 접근 방법을 통해서 고찰해 보고자 한다.

2. 실험방법

Undoped CaTiO₃분말은 Pechini가 개발한 액체 혼합법에 의해 제작하였고 acceptor doping을 하기 위해 Mg를 첨가하였다. 하소가 끝난 분말을 103MPa를 가하여 사각 시편을 성형하였으며, 소결 전 pt-wire를 넣은 후 1320°C에서 5시간 동안 air 소결 하였다. 소결이 끝난 시편을 900°C~1100°C 사이에서 산소분압에 따른 전기전도도를 측정하였다.

3. 실험결과

Ca/Ti의 비가 1보다 증가함에 따라 전기 전도도의 최소점이 낮은 산소 분압쪽으로 이동하였다. 따라서 과잉의 Ca이 A site는 물론 B site인 Ti자리를 점유하여 억셉터 불순물 역할을 한다는 것을 확인할 수 있었다. 또한 Mg⁺²를 0.1mol%~1mol%까지 doping함에 따라 전기 전도도의 최소점이 낮은 산소분압으로 이동하여 Mg⁺²가 억셉터 역할을 하는 것을 확인하였다. Mg⁺²을 0.5mol%이상 첨가하였을 경우 최소점의 이동에 큰 변화를 보이지 않았다.

4. 참고 문헌

- 1) Y.H. Han, Korean journal of Materials Research. Vol. 2, No. 3 (1992)
- 2) U. Balachandran, B. Odekirk, and N.G. Eror, Journal of Solid State Chemistry 41, 185-194 (1982)