

# KNbSi<sub>2</sub>O<sub>7</sub> 単結晶の作製と強誘電特性

## Fabrication and Ferroelectricity of KNbSi<sub>2</sub>O<sub>7</sub> Single Crystal

東工大院理工 ○保科拓也, 佐橋明, 武田博明, 鶴見敬章

Tokyo Tech., ○Takuya Hoshina, Akira Sahashi, Hiroaki Takeda, Takaaki Tsurumi

E-mail: thoshina@ceram.titech.ac.jp

シリケート化合物 ABSi<sub>2</sub>O<sub>7</sub> は近年強誘電性を見出された新しい強誘電体物質群である。類似の組成を持つペロブスカイト型強誘電体 ABO<sub>3</sub> と構造を比較すると, ABSi<sub>2</sub>O<sub>7</sub> は構造中に存在する BO<sub>6</sub> 八面体の間に, SiO<sub>4</sub> 四面体が入り込んだ構造をとる (図 1)。構造中に共有結合性の強い SiO<sub>4</sub> 四面体を含むことから, 優れた高温特性や絶縁破壊強度を有することが予想される。また, SiO<sub>4</sub> 四面体が強誘電性や誘電特性に対してどのような役割を果たすのか理解することは新規強誘電体を探索する上で有用な知見になると考えられる。本研究では, 新規強誘電体 KNbSi<sub>2</sub>O<sub>7</sub> の単結晶を作製し, その誘電特性, 強誘電特性, 結晶構造, 格子振動の評価を通して, KNbSi<sub>2</sub>O<sub>7</sub> の強誘電性の起源について議論を行なった。

KNbSi<sub>2</sub>O<sub>7</sub> 単結晶は以下のようなプロセスで作製した。まず, KNO<sub>3</sub>, Nb<sub>2</sub>O<sub>5</sub>, SiO<sub>2</sub> を目的組成となるように混合し, 1200°C で保持後, 室温まで冷却して, 目的組成のガラスを作製した。得られたガラスを 1100°C で保持して結晶化した後, 1180°C で部分的に再溶融し, その後 1100°C まで 2°C/h の条件で徐冷して結晶を成長させた。このようなプロセスを経ることで, 10×10×1 mm<sup>3</sup> 以上の大きさの C 面を主面とする板状結晶を得ることができた。

図 2 は c 軸方向の分極反転特性である。KNbSi<sub>2</sub>O<sub>7</sub> 単結晶の測定により c 軸方向に強誘電性を有することが初めて明らかになった。室温での比誘電率は 20 程度であった。また, 密度汎関数理論に基づく Projector-augmented wave (PAW) 法, 交換相関ポテンシャルに局所密度近似 (LDA) を用いて KNbSi<sub>2</sub>O<sub>7</sub> について第一原理計算を行なった。得られた結果は, NbO<sub>6</sub> 八面体内で Nb<sup>5+</sup> が c 軸方向に振動するような振動モードがソフトモード, すなわち強誘電性の起源となっていることを示唆した。また, 同振動モードにおいて SiO<sub>4</sub> 四面体は Nb<sup>5+</sup> と逆方向に振動することから, SiO<sub>4</sub> 四面体の存在は強誘電性や誘電率を低下させる要因になっていると考えられる。

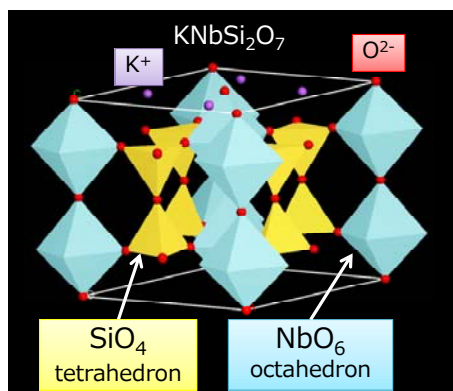


Fig. 1. Crystal structure of KNbSi<sub>2</sub>O<sub>7</sub>.

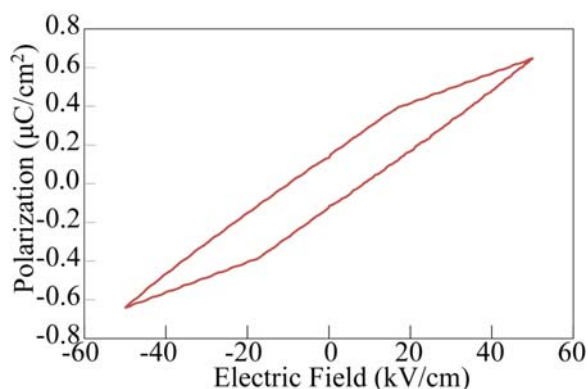


Fig. 2. P-E curve of KNbSi<sub>2</sub>O<sub>7</sub> single crystal.