18p-A9-3

$(1-x)\{Li_{0.06}(Na,K)_{0.94}\}NbO_3+xBaZrO_3(0.035 \leq x \leq 0.075)$の立方晶構造での電子密度分布の特徴

Electron Density Distribution Characteristics of $(1-x)\{Li_{0.06}(Na,K)_{0.94}\}NbO_3+xBaZrO_3$ $(0.035 \leq x \leq 0.075)$ in Cubic Structure

株式会社村田製作所[1]，○岩堀禎浩[1]，野口博司[1]

Murata Manufacturing. Co., Ltd.[1], ○Yoshihiro Iwahori[1], Hiroshi Noguchi[1]

E-mail: iwahori@murata.co.jp

§１はじめに:人体や環境に優しい鉛フリー圧電材料として$(Na,K)NbO_3$を母材としたセラミックス材料が注目され研究されている。

母材の電気特性は$LiNbO_3$や$BaZrO_3$を添加することで PZT 材と同様な圧電特性を示すことが報告されている[1-2]。PZT 材では高温相(Cubic 相)の電子密度分布の異方性(Disorder)と室温での相転移温度や結晶系との対応が研究されている[3]。本材料でも Cubic 相の電子密度分布の特徴を調べることは材料デザインに有効であると考える。そこで我々は，本材料の結晶構造解析から Cubic 相の電子密度分布の特徴を調査した。

§２実験方法:固相法により圧電性セラミックス $(1-x)\{Li_{0.06}(Na,K)_{0.94}\}NbO_3+xBaZrO_3$($x$=0.035, 0.045, 0.055, 0.065, 0.075)(以下 LNKN+BZ と略す)を作製し，高輝度放射光施設 SPring-8 にて粉末 X 線回折パターンを取得した。また，MEM/Rietveld 法を用いて Cubic 相(800K)の結晶構造と電子密度分布を求めた。

§３結果:MEM/Rietveld 法により求めた Cubic 相の電子密度分布を図 1 に示す。図 1(a)は x=0.035 で図 1(b)は x=0.075 の時の[100]と[200]の等電子密度面(0.5e Å^{-3})である。また”A”は”Li, Na, K, Ba”固溶サイトを表し，”B”は”Nb, Zr”固溶サイトを表す。(a)x=0.035 の A サイトは等方的な分布を示すが，(b)x=0.075 の時は<110>または<111>方向へ異方的な分布を示す。これは A サイトの Disorder に起因すると考えられる。また(b)B サイトはx=0.075 で B-O 結合が弱くなり<100>方向にわずかに異方性を示す。

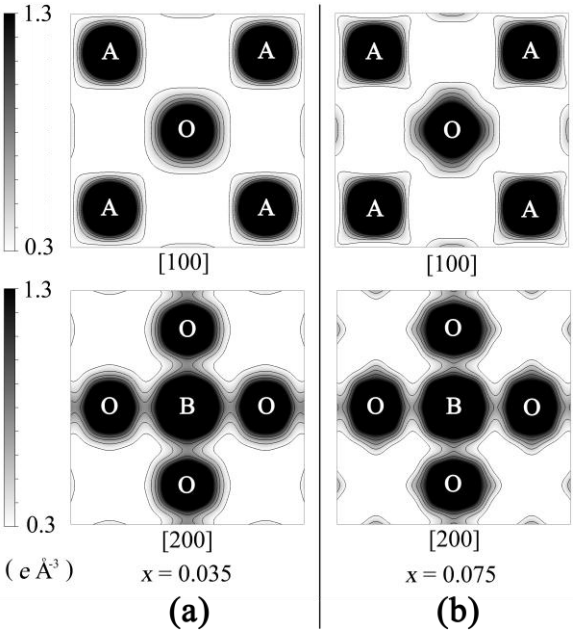


Fig. 1. Electron density distributions determined by MEM at x=0.035, 0.075 in LNKN+BZ. The equidensity contour lines are drawn from 0.3e to 1.3e Å^{-3} with 0.2e Å^{-3} intervals. (a) x = 0.035, (b) x = 0.075.

本発表では，これらの結果に基づき Cubic 相の電子密度分布と Disorder の特徴について，相転移温度や圧電特性との関係を報告する。

§４文献

1)R. Wang et al,: PSS RRL **3**(2009)142.
2)Y. Guo et al,: APL **85**(2004)4121.
3)Y. Kuroiwa et al.: JJAP **44**(2005) 7151.

© 2014 年　応用物理学会