K(Ta, Nb)Si_2O_7 単結晶の作製と誘電特性の評価

Fabrication and Evaluation of Dielectric Property of K(Ta, Nb)Si_2O_7 Single Crystals

東工大物質理工 [1] ○(M1) 大沼 美穂 [1], 武田 博明 [1], 鶴見 敬章 [1], 保科 拓也 [1]

Tokyo Tech. [1], ○Miho Onuma[1], Hiroaki Takeda[1], Takaaki Tsurumi[1], Takuya Hoshina[1]

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

$KNbSi_2O_7$（KNS）はペロブスカイト構造の間に SiO_4 四面体が入り込んだ構造をとる新規強誘電体であり、その構造から優れた高温特性や絶縁破壊強度を有することが期待できる。その強誘電性は、NbO_6 八面体内で Nb^{5+}が [001]に変位するために起こることが第一原理計算によって明らかになっており、また単結晶を用いた評価によって *c* 軸方向に強誘電性を示すことが報告されている [1)]。本研究では、KNS の Nb イオンの一部を Ta で置換した $KTa_xNb_{1-x}Si_2O_7$ (KTNS, x = 0−0.3)の単結晶を作製し、その結晶構造や誘電・強誘電特性を評価した。

$KTa_xNb_{1-x}Si_2O_7$ 単結晶の作製方法を示す。KNO_3, Nb_2O_5, Ta_2O_5, SiO_2（石英）の原料粉末を化学量論組成で秤量・混合した。混合粉末をアルミナるつぼに充填し、500℃で 1h 保持して KNO_3 を完全に分解した。続いて 1200−1230℃で 20h 保持して完全に試料を溶融した後、室温まで冷却して均一なガラスを得た。このガラスを 1100−1115℃で 20h 保持して完全に再結晶化した後、融点 1180−1195℃で 3h 保持することで結晶核を残しながら部分的な溶融を行った。その後、再結晶化温度まで 2℃/h で降温し、結晶核を成長させた。さらに大きな結晶を作製するために、ガラス上に作製した結晶を乗せて溶融から降温までのプロセスを再度行った。

作製した結晶の写真を Fig .1 に示す。作製した結晶は劈開性があり、C 面を主面とする単結晶であることが分かった。Fig .2 は C 面についての XRD 測定結果である。Ta の置換率の増加に伴い、ピークが低角側にシフトしており、*c* 軸長が減少していることを示唆する。また、単結晶を粉砕して XRD 測定を行い、リートベルト法によって格子定数を算出したところ、Ta の置換率の増加に伴い、*a* 軸長が拡大し *c* 軸長が縮小することがわかった。この結果から自発分極の値が減少すると予測できる。分極反転特性の測定結果を報告する予定である。

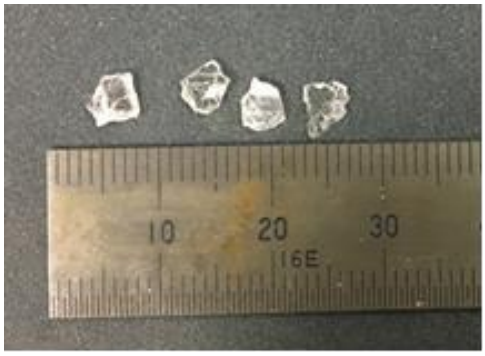

Fig .1 Plate-shaped $KTa_{0.1}Nb_{0.9}Si_2O_7$ crystal.

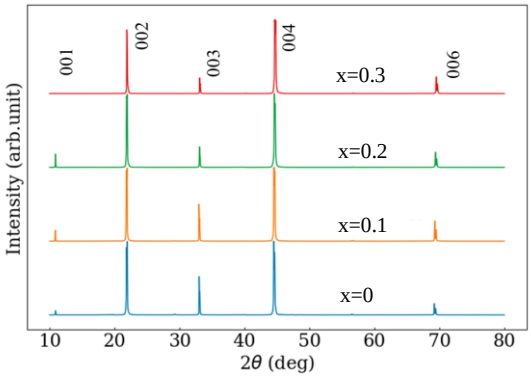

Fig .2 XRD patterns of plate-shaped $KTa_xNb_{1-x}Si_2O_7$ crystals with (001) principal surface.

1) A.Sahashi et al. *J. Ceram. Soc. Jpn.*, **122** 389-392 (2014).

© 2019年 応用物理学会