

K(Ta, Nb)Si₂O₇ 単結晶の作製と強誘電特性の評価

Fabrication and Evaluation of Ferroelectric Property of K(Ta, Nb)Si₂O₇ Single Crystals

東工大物質理工¹ ○(M2)大沼 美穂¹, 武田 博明¹, 鶴見 敬章¹, 保科 拓也¹

Tokyo Tech.¹, ○Miho Onuma¹, Hiroaki Takeda¹, Takaaki Tsurumi¹, Takuya Hoshina¹

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

KNbSi₂O₇ (KNS) はペロブスカイト構造の間に SiO₄ 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。我々は単結晶を用いた評価によって *c* 軸方向に強誘電性を報告した¹⁾。しかし強誘電性のメカニズムはまだ明らかでない。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}Si₂O₇ (KTNS-100*x*, *x*=0-0.3)の単結晶を作製し、その強誘電特性を評価した。また、単結晶構造解析及び第一原理計算により強誘電性の発現メカニズムの解明を試みた。

KTNS-*x* 単結晶はガラスの結晶化、再溶融、及び徐冷によって作製し、XRD 測定によって結晶の主表面が(001)であることを明らかにした。また KTNS 単結晶の *c* 軸方向の分極 (*P*) - 電界 (*E*) 曲線を測定した(Fig.1)。 *P*-*E* 曲線は強誘電性ヒステリシスループを示し、そのループは非対称であった。また、Ta 置換率の増加に伴い、残留分極、抗電界が増加していくことが確認できた。得

られた結晶の単結晶構造解析を行った。構造解析の結果から、NbO₆ 八面体内の Nb⁵⁺と SiO₄ 四面体内で Si⁴⁺が *c* 軸方向に変位し、その変位が Ta 置換率の増加に伴って減少していくことが分かった。さらに第一原理計算を行い、理論的な自発分極値と部分電荷密度、状態密度を計算した。KNS の価電子帯の部分電荷密度を Fig.2に示す。第一原理計算の結果から、Ta 置換によって酸素との共有結合性が減少し、自発分極値が減少することが推測できた。すなわち、Ta 置換が分極値に与える影響について、分極測定の結果と結晶構造解析・第一原理計算の結果が矛盾することが分かった。この傾向の違いは、空間電荷の存在に起因すると考えられる。当日は、高温での分極測定の結果や高温分極処理の結果を基に、KTNS が持つ本来の強誘電性に関して議論する予定である。

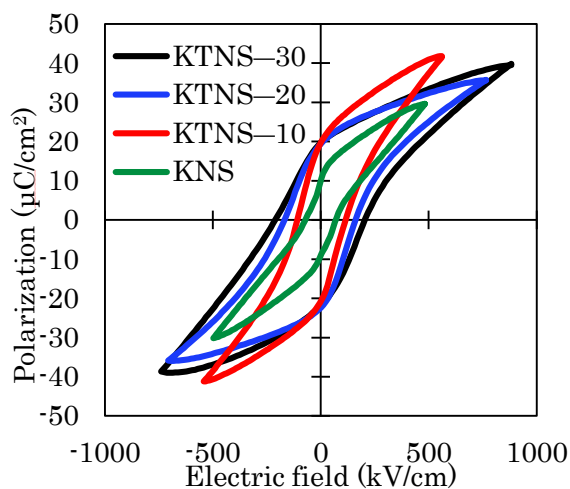


Fig. 1. *P*-*E* curves of KTNS single crystals.

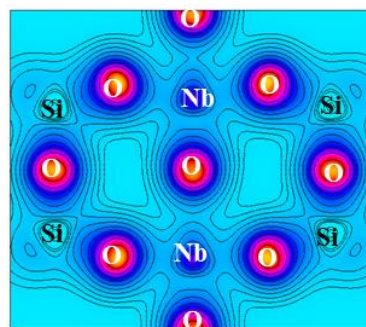


Fig. 2. Partial charge density of KNS.

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