

BT-BMT-BF 強誘電体の結晶構造に対する急冷処理の影響 Effect of quenching on crystal structure of BT-BMT-BF ferroelectrics

広島大学¹, 山梨大学²

○(B)有賀 資起¹, Kim Sangwook¹, Nam Hyunwook², 上野 慎太郎²,

藤井 一郎², 和田 智志², 黒岩 芳弘¹

Hiroshima Univ.¹, Univ. of Yamanashi²

○(B) Motoki Aruga¹, Sangwook Kim¹, Hyunwook Nam², Shintaro Ueno²,

Ichiro Fujii², Satoshi Wada², and Yoshihiro Kuroiwa¹

E-mail: aruga-motoki@hiroshima-u.ac.jp

BaTiO₃ (BT), Bi(Mg_{0.5}Ti_{0.5})O₃ (BMT), および BiFeO₃ (BF)からなる固溶体 BT-BMT-BF は、鉛を含まない環境に優しい圧電材料として注目されている。BT-BMT-BF は室温で擬立方晶構造をもつ。格子ひずみが小さいにもかかわらず、Aサイトを占める Ba イオンと Bi イオンのうち、Bi イオンだけが理想的な原子位置からオフセンターすることにより BaTiO₃ よりも大きな自発分極を示す [1]。我々は、BT-BMT-BF を高温から急冷することにより、より優れた強誘電性を示すことを見出した [2]。本研究では、誘電特性に違いが生じる原因を明らかにするために、0.95(0.33BaTiO₃-0.67BiFeO₃)-0.05Bi(Mg_{0.5}Ti_{0.5})O₃ セラミックスについて、急冷試料と徐冷試料を準備し、大型放射光施設 SPring-8 の BL02B2 で粉末回折実験を行った。

実験は 300 K ~ 900 K の温度範囲で行われた。回折パターンの温度変化から、急冷試料と徐冷試料はどちらも強誘電相では菱面体晶

(擬立方晶)、常誘電相では立方晶であることがわかった。しかし、強誘電相において急冷試料では rhombicity が大きいことがわかった。急冷試料と徐冷試料について 530 K の強誘電相における結晶構造の比較を Fig. 1 に示す。Bi イオンが[100], [010], および[001]方向に等確率でオフセンターしている様子は同じであるが、分極方向である[111]方向のオフセンター量を見積もると、急冷試料の方が大きかった。その結果、電子密度分布も[111]方向により偏った形状になる。このような Bi イオンのオフセンター量の違いが急冷試料の優れた強誘電性の起源であることを明らかにした。

[1] Y. Kuroiwa *et al.*, *Commun. Mater.* **1** (2020) 71. [2] H. Nam *et al.*, *Ceram. Int.* **44** (2018) s119.

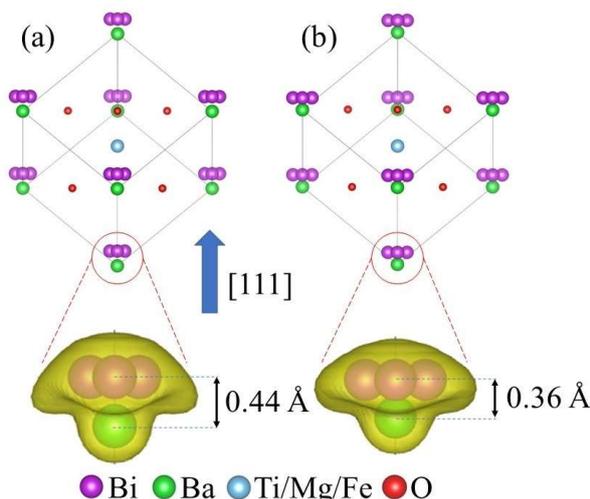


Fig. 1 Electron density distributions around A-site ions in BT-BMT-BF at 530 K with rhombohedral symmetry. (a) quenched and (b) as-sintered. Isosurface level is $20 \text{ e} \text{ \AA}^{-3}$.