

(0.4-x)(Bi_{0.5}K_{0.5})TiO₃-0.6BiFeO₃-xK(Ta_{0.97}Mo_{0.03})O₃の強誘電特性 および平均・局所・電子構造

Ferroelectric properties, average, local, and electronic structures of

(0.4-x)Bi_{0.5}K_{0.5}TiO₃-0.6BiFeO₃-xK(Ta_{0.97}Mo_{0.03})O₃

東理大理工¹, °近藤 真輝¹, 石橋 千晶¹, 北村 尚斗¹, 井手本 康¹

Tokyo Univ. of Sci.¹, °Masaki Kondo¹, Chiaki Ishibashi¹, Naoto Kitamura¹, Yasushi Idemoto¹

E-mail: 7222527@ed.tus.ac.jp

1. 目的 正方晶-菱面体晶の結晶相境界(MPB)を形成し、高い強誘電・圧電特性を示す(Bi_{0.5}K_{0.5})TiO₃-BiFeO₃(BKT-BF)系固溶体が精力的に研究されている¹⁾。当研究室では、MPBである0.4BKT-0.6BFにKTaO₃を固溶させ、さらにMoを固溶することにより、強誘電特性の向上を報告してきた²⁾。本研究では(Bi_{0.5}K_{0.5})TiO₃-BiFeO₃-K(Ta_{0.97}Mo_{0.03})O₃系固溶体に新たに着目し、組成比の変化による強誘電特性の向上を目的とする。また、放射光X線・中性子回折測定によるRietveld解析、マキシマムエントロピー法による電子密度分布解析、XAFSを用いた局所・電子構造解析によって、強誘電特性との詳細な関係性を検討した。

2. 実験 Taを置換した0.375(Bi_{0.5}K_{0.5})TiO₃-0.6BiFeO₃-0.025KTaO₃ (25KT)、Ta, Moを置換した0.3875(Bi_{0.5}K_{0.5})TiO₃-0.6BiFeO₃-0.0125K(Ta_{0.97}Mo_{0.03})O₃ (12.5KMT)、0.375(Bi_{0.5}K_{0.5})TiO₃-0.6BiFeO₃-0.025K(Ta_{0.97}Mo_{0.03})O₃ (25KMT)を固相法により合成した。これらは難焼結性であるため、SPSにより焼結した。また、仮焼後にボールミル処理5hを行った試料も作製した(25KTb, 12.5KMTb, 25KMTb)。各試料について粉末X線回折測定により相の同定を行った。また真密度測定とSEMにより試料の焼結性を評価した。強誘電特性についてはP-Eヒステリシスループ、比誘電率・誘電損失の温度依存、キュリー温度および相転移温度を測定した。電気特性の変化を、放射光X線・中性子回折を用いてRietveld解析を行い、結晶構造の観点から検討した。

3. 結果と考察 粉末X線回折パターンより、全ての試料は菱面体晶R3cで帰属することができた。SEMによる観察と密度測定から、SPSを用いることで、緻密な焼結体が得られたことが分かった。P-Eヒステリシスループの測定により、Ta, Moを置換することにより、強誘電特性の向上がみられた(Fig. 1)。また、ボールミル処理を行った試料は焼結性、絶縁性の向上が確認された。以上のような特性変化の要因を明らかにするため、Rietveld法による結晶構造解析を行い、結晶電子構造の観点から検討した。また、XAFSにより電子構造や各原子周辺の局所構造を検討した。

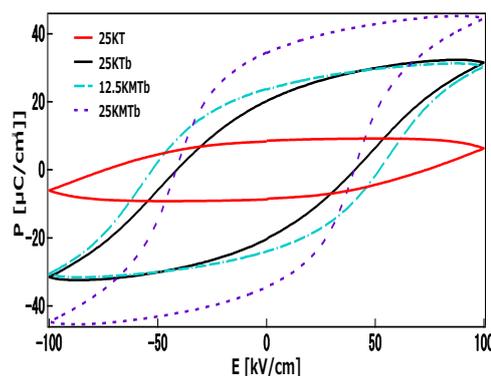


Fig. 1 P-E ヒステリシスループ

参考文献 1) X.X. Wang, *et al. Appl. Phys. Lett.*, **85**, 91 (2004).

2) 河本 剛, 井手本他, 第 67 回応用物理学会春季学術講演会要旨集 14a-D519-3(2020).