

(Bi_{0.5}K_{0.5})TiO₃-BiFe_{1-x}M_xO₃-K(Nb_{0.5}Ta_{0.5})O₃ (M=Ni, Mn) における
強誘電特性と置換種および熱処理の関係と
平均・電子・局所構造解析

**Relationship among Ferroelectric Properties, Substitution Species, and Heat Treatment
of (Bi_{0.5}K_{0.5})TiO₃-BiFe_{1-x}M_xO₃-K(Nb_{0.5}Ta_{0.5})O₃ (M=Ni, Mn)
and Average, Electronic, and Local Structure Analysis**

東理大理工 ○衣笠友哉, 石橋千晶, 北村尚斗, 井手本康

Tokyo Univ. of Science, Y. Kinugasa, C. Ishibashi, N. Kitamura, Y. Idemoto

E-mail: idemoto@rs.tus.ac.jp

1. 緒言 当研究室では、非鉛材料として(Bi_{0.5}K_{0.5})TiO₃-BiFeO₃ (BKT-BF)系固溶体¹⁾に注目し、MPB組成である0.4BKT-0.6BFにKNbO₃, KTaO₃を固溶させることにより、強誘電特性の向上を報告してきた²⁾。本研究では0.6(Bi_{0.5}K_{0.5})TiO₃-0.375BiFeO₃-0.025K(Nb_{0.5}Ta_{0.5})O₃ (25KNT)に着目し、Feより低価数なNiあるいは高価数なMnで置換した試料の焼結体をスパークプラズマ焼結(SPS)により作製した。これらの試料について強誘電特性を評価するとともに、量子ビームを用いた平均・電子・局所構造解析を行った。

2. 方法 試料は固相法により合成した。難焼結性であるためSPSによる焼結を適用し、得られた焼結体について750°C/4h, 700°C/6h, 酸素雰囲気下でリカバリーアニールを行った。これらの試料について粉末X線回折測定により相の同定を行い、ICP発光分光分析により金属組成を算出した。また、焼結性を検討するため、真密度による密度測定とSEMによる形態観察を行った。強誘電特性についてはP-Eヒステリシス測定及び誘電率・誘電損失の温度依存を測定した。さらに平均・電子構造と強誘電特性の関係を検討するため、放射光X線回折測定により得られたデータを用いたRietveld解析とMEMによる電子密度分布解析を行った。また、他元素置換が局所構造に与える影響を検討するため、第一原理計算(DFT)を併用したPDF解析も行った。

3. 結果 XRDの結果よりNi, Mn置換において菱面体晶系(S.G.:R3c)で帰属できた。P-Eヒステリシスループ測定により、Ni, Mnを置換した試料では、残留分極の向上が確認された。以上のような特性変化の要因を特定するため、第一原理計算を併用したPDF解析を行い局所構造の観点から検討した(Fig. 1)。その結果、Ti-O歪みよりFe-O歪みの方が大きいことが分かった。

【参考文献】

- 1) H. Matsuo et al., *J. Appl. Phys.*, **108**, 104103 (2010).
- 2) 真家純一郎, 石田直哉, 北村尚斗, 井手本康, 日本セラミックス協会 2020 年年会予稿集, 14P-PB5-9 (2020).

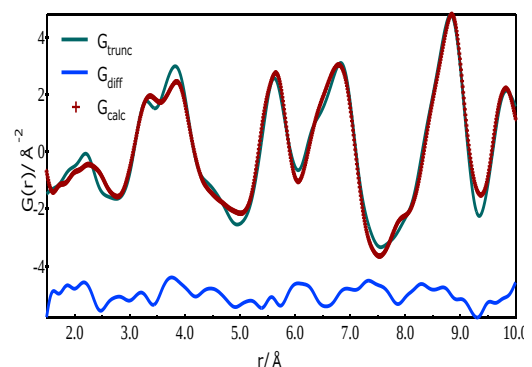


Fig.1 PDF fitting pattern of 25KNT.