

## [MDABCO]K(PF<sub>6</sub>)<sub>3</sub>系ペロブスカイト固溶体の合成

(九州工大院工) ○下岡 弘和・山下 功輝・岡内 辰夫・北村 充  
 Synthesis of [MDABCO]K(PF<sub>6</sub>)<sub>3</sub>-based perovskite solid solutions (*Graduate School of Engineering, Kyushu Institute of Technology*) ○Hirokazu Shimooka, Koki Yamashita, Tatsuo Okauchi, Mitsuru Kitamura

ABX<sub>3</sub>-type organic-inorganic perovskite [MDABCO](NH<sub>4</sub>)I<sub>3</sub> (MDABCO = N-methyl-N'-diazabicyclo[2.2.2]octonium) with a large spontaneous polarization comparable to that of barium titanate has been reported.<sup>1)</sup> It is attracting attention as one of the flexible and lightweight ferroelectric and piezoelectric materials. In this study, we attempted to substitute the X-site with the polyatomic PF<sub>6</sub><sup>-</sup> ion in order to expand the unit cell volume. As a result, we obtained a lighter organic-inorganic perovskite solid solution [MDABCO]K[I<sub>0.01</sub>(PF<sub>6</sub>)<sub>0.99</sub>]<sub>3</sub> with a 28% larger unit cell volume and 11% lower density than those of [MDABCO](NH<sub>4</sub>)I<sub>3</sub>. In contrast to [MDABCO](NH<sub>4</sub>)I<sub>3</sub>, belonging to the trigonal crystal system at room temperature, [MDABCO]K[I<sub>0.01</sub>(PF<sub>6</sub>)<sub>0.99</sub>]<sub>3</sub> was confirmed to belong to the cubic crystal system.

*Keywords* : Organic-inorganic perovskite; Solid solution

チタン酸バリウムに匹敵する大きな自発分極を有する ABX<sub>3</sub> 型有機-無機ペロブスカイト [MDABCO](NH<sub>4</sub>)I<sub>3</sub> (MDABCO : N-メチル-N'-ジアザビシクロ[2.2.2]オクトニウム) が報告され<sup>1)</sup>、柔軟で軽量な強誘電体、圧電体材料の一つとして注目されている。本研究では、単位胞を拡大して A サイトカチオンの選択の幅を広げるために、X サイトを多原子イオンである PF<sub>6</sub><sup>-</sup>イオンに置換し、B サイトをカリウムイオンに置換することを試みた。その結果、[MDABCO](NH<sub>4</sub>)I<sub>3</sub> に比べ、格子体積が 28%大きく、密度が 11%小さい、より軽量な有機-無機ペロブスカイト固溶体 [MDABCO]K[I<sub>0.01</sub>(PF<sub>6</sub>)<sub>0.99</sub>]<sub>3</sub> が得られた。室温で三方晶である [MDABCO](NH<sub>4</sub>)I<sub>3</sub> に対して、[MDABCO]K[I<sub>0.01</sub>(PF<sub>6</sub>)<sub>0.99</sub>]<sub>3</sub> では歪みが解消され立方晶となることを確認した。

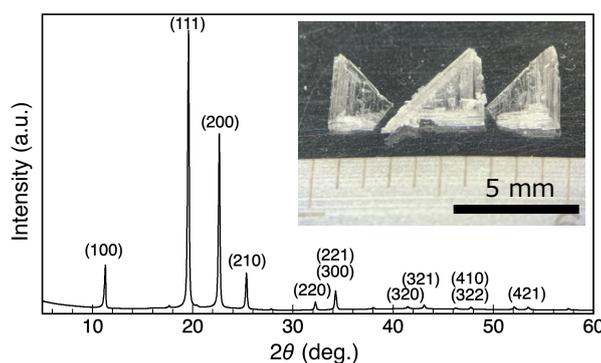


Fig. 1. XRD pattern of [MDABCO]K[I<sub>0.01</sub>(PF<sub>6</sub>)<sub>0.99</sub>]<sub>3</sub>

1) H.-Y. Ye *et al.*, *Science* **2018**, *361*, 151.