



層状ペロブスカイト化合物の構造相転移

漆原 大典
名古屋工業大学

キーワード：層状ペロブスカイト，強誘電体，構造相転移

1. 背景と研究目的

イオン変位が直接的な自発分極の起因となる直接型強誘電体の他に金属 - 酸素八面体の回転など非極的な歪みを起因とした間接型強誘電体が存在する。特に層状ペロブスカイト化合物では複数の八面体の回転により強誘電性を示すハイブリッド間接型強誘電体が新たな強誘電性発現機構として注目を集めている[1]。結晶学的な知見から強誘電性の発現機構を理解するためには、強誘電相だけでなく常誘電相の結晶構造を明らかにする必要がある。

本研究では $n=3$ の Dion-Jacobson 相である $\text{CsBi}_2\text{Ti}_2\text{NbO}_{10}$ [2] およびペロブスカイト層の積層数を制御した層状ペロブスカイト化合物($n=4, 5$)を研究対象とし、放射光粉末 X 線回折法により構造解析を行った。Rietveld 法により強誘電相および常誘電相の結晶構造を決定し、相転移機構について調査した。

2. 実験内容

$\text{CsBi}_2\text{Ti}_2\text{NbO}_{10}$ および積層数を制御した試料を固相反応法により作製し、内径 0.1 mm の石英ガラスキャピラリーに充填した。実験は BL5S2 ビームラインを用い、12.4 keV の波長で X 線回折強度測定を行った。2 θ 範囲 2-90° のデータを用いて格子定数の精密化および初期構造の導出を行い、結晶構造の精密化には RIETAN-FP [3] を使用した。また、高温吹付け装置を用いて 25°C から 600°C の範囲における構造の変化を調査した。

3. 結果および考察

Figure 1 に $\text{CsBi}_2\text{Ti}_2\text{NbO}_{10}$ の 25°C および 600°C の X 線回折パターンを示す。25°C の格子定数は $a:30.7613(4)\text{\AA}$ 、 $b:5.44900(7)\text{\AA}$ 、 $5.49937(7)\text{\AA}$ であり、既報と同様な空間群 $Ima2$ の構造モデル[2]を用いることで良好な解析結果を得た。600°C に加熱することで直方晶から正方晶への構造相転移が生じた。この変化は既報の強誘電相から常誘電相に対応する構造相転移と考えられる。一方、積層数を調整した試料では明確な構造相転移を観察することができず、測定温度の変更等の検討が必要である。

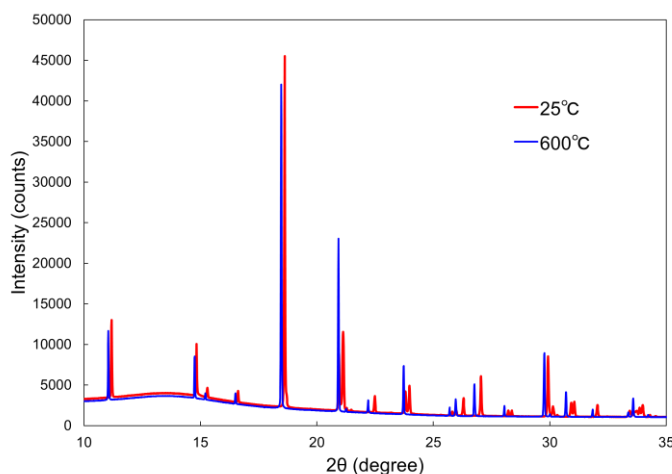


Fig. 1 $\text{CsBi}_2\text{Ti}_2\text{NbO}_{10}$ の 25°C および 600°C における X 線粉末回折パターン

4. 参考文献

1. Y. S. Oh *et al.*, *Nat. Mater.* **14** (2015) 407-413.
2. E. E. McCabe *et al.*, *Chem. Mater.* **27** (2015) 8298-8309.
1. F. Izumi *et al.*, *Solid State Phenom.*, **130** (2007) 15-20.