

課題番号 : 2014B-E14  
 利用課題名 (日本語) : 圧電固溶体  $\text{PbZr}_{1-x}\text{Ti}_x\text{O}_3$  における Zr リッチ組成での局所構造解析  
 Program Title (English) : Local structure analysis on Zr-rich  $\text{PbZr}_{1-x}\text{Ti}_x\text{O}_3$   
 利用者名(日本語) : 横田 紘子<sup>1)</sup>, Nan Zhang<sup>2)</sup>, 米田 安宏<sup>3)</sup>  
 Username (English) : Hiroko Yokota<sup>1)</sup>, Nan Zhang<sup>2)</sup>, Yasuhiro Yoneda<sup>3)</sup>  
 所属名(日本語) : 1) 千葉大学大学院理学研究科, 2) Simon Fraser University, 3) JAEA/SPring-8  
 Affiliation (English) : 1) Department of Physics, Chiba University, 2) Simon Fraser University, 3) JAEA/SPring-8  
 キーワード :

1. 概要 (Summary)

PZTは強誘電性を示す $\text{PbTiO}_3$ (tetragonal相:T相)と反強誘電性を示す $\text{PbZrO}_3$ (rhombohedral相:R相)の固溶体であり、2次元相図におけるR相とT相との境界近傍には濃度相境界(MPB)と呼ばれる対称性の低下した領域が存在し、これが巨大圧電性や電気機械定数の増大を引き起こす起因であると考えられてきた。我々は、これまでにイギリスのISISにおいて中性子回折を用いた詳細な構造解析を行うことにより、PZTにおいてこれまで単一のR相だと考えられてきたZrリッチな領域が、実はR相とmonoclinic相との混晶系であることを明らかにしてきた。この考え方は、これまでのMPBの概念を見直す必要性があることを提案している。

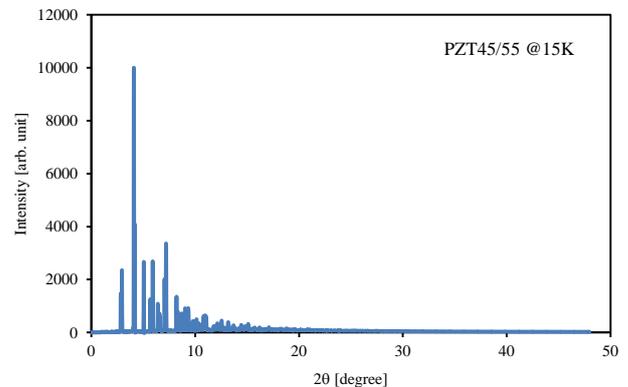
2. 実験(目的,方法) (Experimental)

今回は熱揺らぎが小さく、解析が容易と考えられる低温領域について測定を行った。このため、冷凍機を用いて実験を行った。試料としてPZT75/25, 70/30, 65/35, 60/40, 55/45, 45/55を用いて15K~300Kまでの温度領域で測定を行った。今回我々は放射光を用いて、ZrおよびTiイオンの局所構造に及ぼす影響を明らかにすることを目的に実験を行った。PZTにおける局所構造を明らかにすることで、局所構造および平均化構造と物性との関係性を明らかにし、それにより物質探索の新しい指針を確立することを目的とする。

3. 結果と考察(Results and Discussion)

図にPZT45/55における15KでのBragg回折プロファイルを示す。Zrによる吸収の効果が強く、高角側ではほとんどピークが散漫散乱に埋もれてしまっている様子がわかる。このことからTi濃度が高い組成から解析を行うことを検討している。現在RMCシミュレ

ーションを行うためのデータ変換などを行っているところである。



4. その他・特記事項 (Others)

なし