

課題番号 : 2015A-E08
 利用課題名 (日本語) : 高エネルギーX線回折を用いた 0.95(Bi_{1/2}Na_{1/2})TiO₃-0.05Ba(Mn_{1/3}V_{2/3})O₃ 固溶体の局所構造解析
 Program Title (English) : Local structure analysis of 0.95(Bi_{1/2}Na_{1/2})TiO₃-0.05Ba(Mn_{1/3}V_{2/3})O₃ solid solutions using high-energy X-ray diffraction
 利用者名(日本語) : 小舟正文¹⁾, 永本健留¹⁾, 中井友晃¹⁾, 米田安宏²⁾
 Username (English) : M. Kobune¹⁾, T. Nagamoto¹⁾, T. Nakai¹⁾, Y. Yoneda²⁾
 所属名(日本語) : 1) 兵庫県立大学大学院工学研究科, 2) 原子力研究開発機構
 Affiliation (English) : 1) Graduate School of Engineering, University of Hyogo, 2) Japan Atomic Energy Agency
 キーワード : 非鉛圧電体, 圧電特性, 局所構造解析, PDF

1. 概要 (Summary)

錯体重合法により(Bi_{1/2}Na_{1/2})TiO₃ (BNT)の A サイトを Ba で, B サイトを Mn, V で共置換した 0.95BNT-0.05Ba(Mn_{1/3}V_{2/3})O₃ (0.95BNT-0.05BMV)固溶体を作製し, 圧電特性評価と放射光利用による局所構造解析を行い, それらの関係を明らかにする.

2. 実験(目的,方法) (Experimental)

錯体重合法により先述の 0.95BNT-0.05BMV 固溶体粉末を合成し, これを用いて成形後, 1100–1140°C で焼成して BNT-BMV 固溶体セラミックスを作製した. 得られた試料は, d33 メータを用いて圧電歪定数(*d*₃₃)を, インピーダンスアナライザを用いて共振-反共振法によりその他の圧電諸定数(電気機械結合係数, 機械的品質係数, 誘電率, 誘電損失)を測定した. 得られた圧電特性の焼成温度依存性を調べた. 局所構造は大型放射光施設, Spring-8(BL14B1)利用による 2 体相関分布関数(PDF)を用いる高エネルギーX線回折(HEXDS)実験により, ABO₃型ペロブスカイト構造の A サイト原子配列の規則性に関する焼成温度依存性を調べた. 得られた知見の総合的考察を行い, 高い圧電性が得られる至適焼成温度及び圧電性とマイクロ構造の関係を明らかにする.

3. 結果と考察(Results and Discussion)

図 1 は HEXDS 実験によって得られた PDF 解析結果を示す. HEXDS 実験による PDF 解析から, ABO₃型ペロブスカイト構造をもつ BNT は, 最近接原子間距離が Ti と O の結合距離で約 2Å である. 第二近接の Bi-O 及び Na-O は BNT の大きな菱面体歪のため, Ti-O 結合距離とオー

バーラップする. 幸いにも, 1140°C で焼結した固溶体試料において Ti-O と Bi-O/Na-O の原子相関が得られたため, 実空間フィッティング(図 2)を得ることができた. BNT は大きな菱面体歪をもつけれども, 単位胞内で強誘電性を担う Bi イオンは比較的均等に分布している. 一方, 0.95BNT-0.05BMV 固溶体は Bi イオンの原子位置を 2 サイト以上に仮定する必要がある.

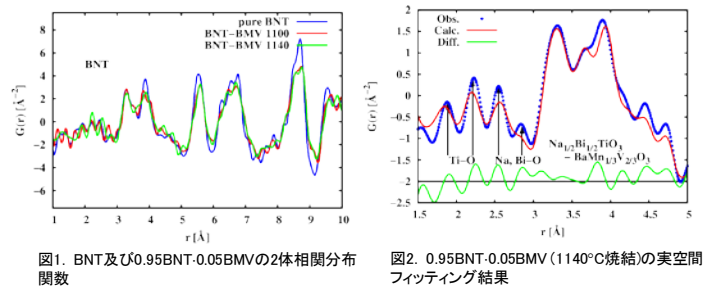


図 3 は 0.95BNT-0.05BMV 固溶体の圧電歪定数 *d*₃₃ (円板状振動子の縦振動モード)の焼成温度依存性を示す. *d*₃₃ は 1100–1140°C の温度範囲において焼成温度の上昇に伴い, ほぼ直線的に増加することがわかった. また, 純粋な BNT(1150°C 焼成品, *d*₃₃ = 78 pC/N)と比較して *d*₃₃ 特性に及ぼす共置換効果は顕著に現れた. 同様に, 図 4 は 0.95BNT-0.05BMV 固溶体の電気機械結合係数 *k*_p(円板状

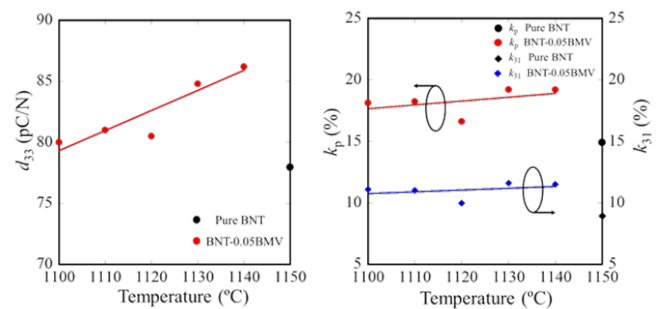


図3. 0.95BNT-0.05BMVの*d*₃₃の焼成温度依存性
 図4. 0.95BNT-0.05BMVの*k*_p及び*k*₃₁の焼成温度依存性

振動子の径方向振動モード)及び k_{31} (矩形板状振動子の長辺方向伸び振動モード)の焼成温度依存性を示す。 k_p 及び k_{31} ともに d_{33} 特性と同様、焼成温度の上昇に伴い、ほぼ直線的に緩やかに増加し、純粋なBNTのそれら($k_p = 15\%$, $k_{31} = 9\%$)よりもすぐれていた。

以上の結果に基づいて総合的考察を行い、以下のような結論を得た。

- (1) BNTのA及びBサイト共置換効果により、圧電特性は明瞭に向上した。
- (2) 放射光分析結果と圧電特性から、焼成温度範囲(1100–1140°C)内において、温度上昇に伴うAサイト原子のオーダリングの向上と圧電特性の改善効果を見出した。

4. その他・特記事項 (Others)

該当なし