

ペロブスカイト型極性酸化物 $\text{Bi}_{1/2}\text{Ag}_{1/2}\text{TiO}_3$ の結晶構造

(学習院大) 稲熊宜之、但住俊明、鈴木俊彦、相田朋哉、勝又哲裕 (産総研) 王瑞平
(名古屋工業大) 日比野寿、井田隆 (早稲田大) 真下祐一、上江洲由晃

Yoshiyuki Inaguma, Toshiaki Tazumi Toshihiko Suzuki, Tomoya Soda, Tetsuhiro Katsumata (Gakushuin U.), Ruiping Wang (AIST), Hisashi Hibino, Takashi Ida (Nagoya Inst. Tech.), Yuichi Mashita, Yoshiaki Uesu (Wasada U.)

【はじめに】 $\text{Bi}_4\text{Ti}_3\text{O}_{12}$ や $\text{Bi}_{1/2}\text{Na}_{1/2}\text{TiO}_3$ をはじめ、いくつかの Bi 含有酸化物が強誘電体として知られている。本研究では、強誘電体の候補物質として $\text{Bi}_{1/2}\text{Ag}_{1/2}\text{TiO}_3$ (以下では BATO とする) に着目した。BATO ペロブスカイトは、最初、超高压下で合成された [1, 2] が、その後、10 気圧 (1 MPa) 程度の酸素圧下で合成できることが明らかになり、構造や誘電性について検討されてきた [3, 4]。一方、(1) X 線回折ピークがブロードで分離が悪く (擬立方晶)、結晶系や空間群を決定するのが難しい、(2) 極性、強誘電性の判定ができていないなど、不明な点が残っている。そこで、本研究では、これらを明らかにするために、放射光を用いた X 線回折測定 (KEK-PF, BL4B2 粉末回折ビームライン, $\lambda = 1.20671 \text{ \AA}$)、光第 2 高調波発生 (SHG) 測定および誘電測定を行った。

【結果および考察】 図 1 に示したように放射光を用いた X 線回折においてペロブスカイトの基本回折ピーク (立方晶を仮定、格子定数 $a = 3.889 \text{ \AA}$) の他に、超格子回折ピーク (指数はすべて半整数) が見られた。これらの超格子ピークは、 TiO_6 酸素八面体の反位相の tilt に対応する。さらに、SHG 信号が観測され、この物質が極性結晶であることが明らかとなった。これらの結果から、室温における空間群は、 $\text{Bi}_{1/2}\text{Na}_{1/2}\text{TiO}_3$ と同様に対称中心を持たない $R3c$ (点群 $3m$) であると考えられる。当日は、構造解析結果の他、実験室での高温 X 線回折測定、誘電特性および SHG の温度依存性から見出された相転移挙動についても報告する。

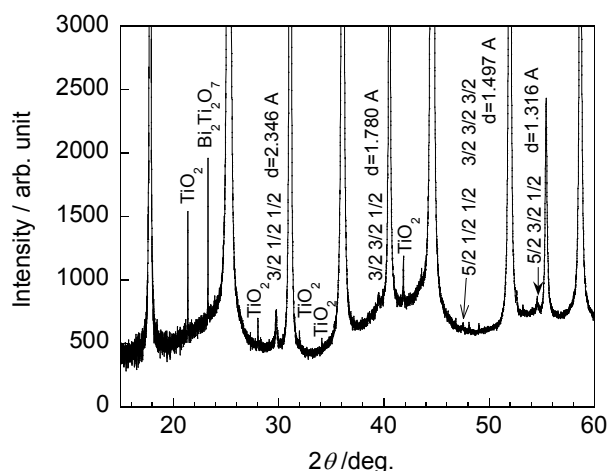


Fig. 1 Powder synchrotron X-ray diffraction pattern of $\text{Bi}_{0.50}\text{Ag}_{0.48}\text{TiO}_3$ at room temperature ($\lambda = 1.2067 \text{ \AA}$) .

- [1] J.H. Park, P. M. Woodward, J. B. Parise, R. J. Reeder, I. Lubomirsky, O. Stafsudd, *Chem. Mater.*, **11**, 177-183(1999).
 [2] Y. Inaguma, M. Itoh, Y. J. Shan, T. Nakamura, *Proceedings of 2nd Symposium on Atomic-scale Surface and Interface Dynamics*, 233-238 (1998).
 [3] Y. Inaguma, T. Katsumata, R. Wang, K. Kobashi, M. Itoh, Y. J. Shan, T. Nakamura, *Ferroelectrics*, **264**, 127-132 (2001).
 [4] Y. Inaguma, A. Mayaguchi, T. Katsumata, *Mater. Res. Symp. Proceedings (Solid-State Chem. of Inorganic Materials IV--2002)*, **755**, 471-476 (2003).