

チタン石型化合物における新規誘電体材料の探索

名古屋大学大学院理学研究科理学専攻

谷口 博基

taniguchi.hiroki.v4@f.mail.nagoya-u.ac.jp

我々のグループでは、 SiO_4 もしくは AlO_4 四面体を物質の構成要素とするシリケート系およびアルミネート系化合物に着目し、新しい誘電体材料の設計・開発を進めている。本講演では、特にチタン石型化合物における最近の研究成果を紹介する。

チタン石型化合物(ABSiO_5)は天然鉱物であるチタン石(CaTiSiO_5)に代表される物質系であり、結晶構造中に頂点共有によって連なった BO_6 酸素八面体の直鎖構造を有する(図1)[1]。隣接する直鎖構造どうしは平行に並んでおり、互いに SiO_4 四面体によって連結されている。結果として生じるネットワーク構造の空隙には、アルカリ金属元素やアルカリ土類金属元素が充填される。

チタン石 CaTiSiO_5 は約 480K において、単斜晶の空間群 $A2/a$ に属する高温相から、同じく単斜晶相の $P2_1/a$ に属する低温相へと構造相転移を示す。この相転移は TiO_6 八面体中の Ti のオフセンター変位によって特徴づけられるが、直鎖構造中において全ての Ti は同方向に変位し、一方で隣接する直鎖構造間では Ti は互いに逆方向に変位する[2]。相転移におけるこの構造変化より、 CaTiSiO_5 は反強誘電性 (Antiferroelectricity) を示し得ることが予想されていた。しかしながら、これまでに反強誘電性を裏付ける二重履歴曲線の観測例は無く、本物質は“Hard-antiferroelectric”と位置付けられてきた[3]。

我々はチタン石型化合物を新しい反強誘電体の探索における有望な鉱脈と考え、系統的材料合成と物性評価に取り組んできた。その中で最近、複数のチタン石型化合物において二重履歴曲線を観測し、反強誘電性の存在を実証した[4,5]。特に $\text{CaTi}(\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x)\text{O}_5$ ($x = 0.0\text{--}1.0$)の物質系においては、 $x = 0.0$ および $x = 1.0$ の両エンドメンバーにおいて反強誘電性を明らかにするとともに、 $x = 0.5$ の中間組成においてユニークな局所構造に由来する特異的な誘電率増強効果を見出した。

講演では、チタン石型化合物における反強誘電性および誘電特性を議論するとともに、パワーエレクトロニクス用キャパシタへの応用に向けた取り組みを紹介する。

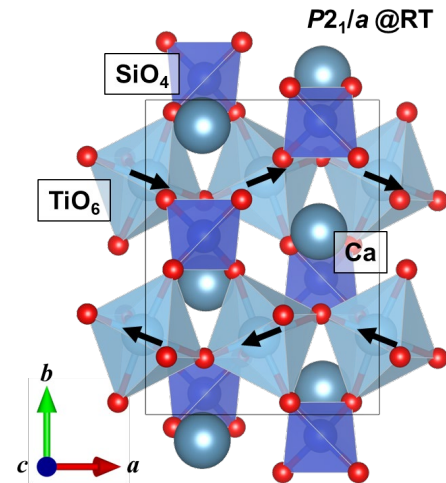


図1: CaTiSiO_5 の結晶構造

References:

- [1] J.A. Speer and G.V. Gibbs, Am. Mineral. **61**, 238–247 (1976).
- [2] M. Taylor and G.E. Brown, Am. Mineral. **61**, 435–447 (1976).
- [3] M. Zhang, et al., Phys. Chem. Minerals **22**, 41–49 (1995).
- [4] H. Taniguchi, et al., ACD Nano **18**, 14523–14531 (2024).
- [5] T. Uohashi, et al., Appl. Phys. Lett. **124**, 182901 (2024).