



(Li, Na)NbO₃ 応力発光材料の結晶構造解析

二宮 翔、佐藤 和樹、西堀 麻衣子
東北大学

キーワード： X-ray diffraction, multi-piezo, mechano-luminescence

1. 背景と研究目的

結晶性セラミックス材料の構造と物性は密接に関係しており、異種元素の添加などに起因する結晶構造の歪みは、電子材料の特性に大きな影響を与えることが広く知られている。LiNbO₃:Pr³⁺は圧電性と応力発光特性を同時に合わせ持つマルチピエゾ物質であり、エネルギーの多元変換を実現する新たな電子材料として期待されている[1]。この材料のLiサイトをNaで置換して結晶構造を制御すると、Na置換量0.88~0.9において、特異的に応力発光強度が上昇することが知られているものの[2]、組成相境界付近で発光特性が特異的に向上するメカニズムは明らかとなっていない。本課題では放射光X線回折・全散乱による精密構造解析を行うことで、結晶構造と応力発光特性の相関解明を目指す。

2. 実験内容

Li_{1-x}Na_xNbO₃:Pr³⁺は固相反応法により合成した。Li₂CO₃, Na₂CO₃, Nb₂O₅, Pr₂O₃の乾燥粉末をLi_{1.01-x}Na_xPr_{0.002}NbO₃の公称組成に従って混合し、Air雰囲気下650℃で5時間焼成したのち、それを粉砕し900-1150℃で8時間焼結した。Pr³⁺のドーピング濃度は0.2mol%に固定し、Li濃度は0.95<x<1.05とした。放射光X線回折測定はあいちSR BL5S2で実施した。検出器はPilatus 100k 4連装を用い、2θ=94°の範囲を2ショット測定することでカバーした。1ショットあたりの露光時間は180sとし、入射X線エネルギーは17.714 keVとした。

3. 結果および考察

Fig. 1にNaNbO₃:Pr³⁺を基準に、NaサイトをLiでLiに置換した場合の放射光XRD測定結果を示す。10°付近の(110)ピークに着目すると、Li_{0.11}Na_{0.9}NbO₃:Pr³⁺ (Na0.9)は2本のピークに分裂している一方で、Li_{0.13}Na_{0.88}NbO₃:Pr³⁺ (Na0.88)は1本のピークとなっており、Na0.9とNa0.88との間で結晶系が大きく変化することがわかった。今後リートヴェルト解析を行い、これまで取得したXAFS測定結果と併せて考察することで結晶構造と応力発光特性の相関を明らかにする予定である。

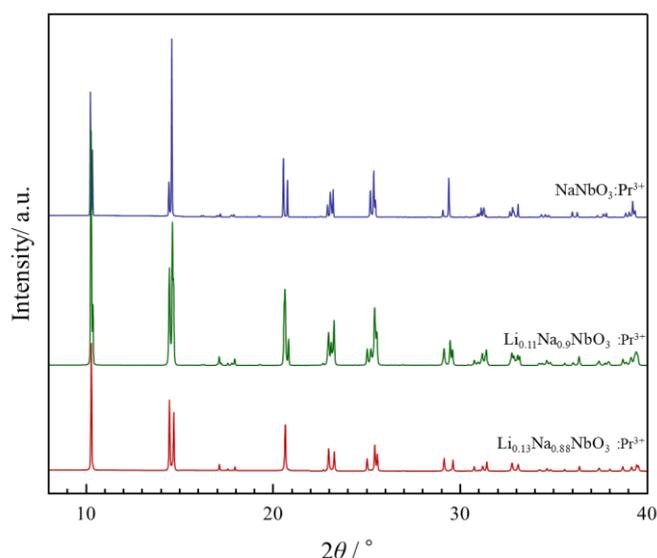


Fig. 1 放射光 XRD 測定結果

4. 参考文献

- [1] Tu, D., Xu, C.-N., Yoshida, A., Fujihala, M., Hirotsu, J., Zheng, X.-G., *Adv. Mater.* 2017, 29, 1606914.
[2] H. Hara, C. N. Xu, R. Wang, X. G. Zheng, M. Nishibori, E. Nishibori, *J. Ceram. Soc. Jpn.* 2020, 128, 518