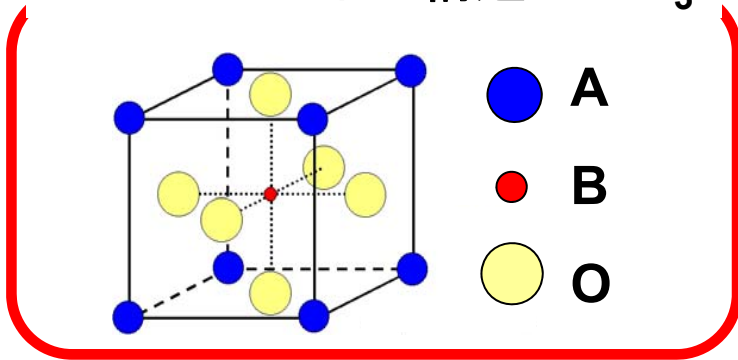


研究背景

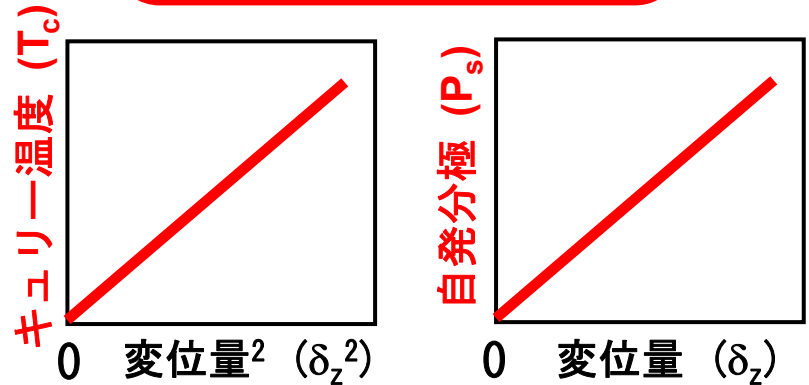
ペロブスカイト構造: ABO_3



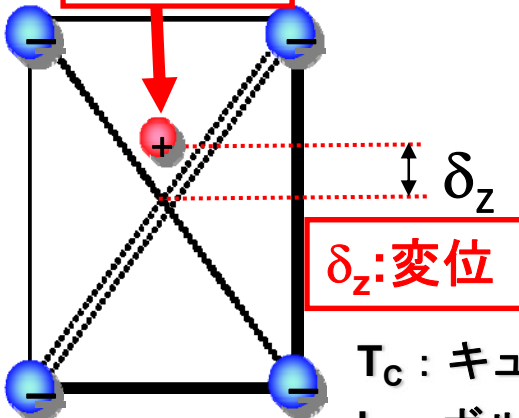
$$T_c \propto \delta z^2, C$$

$$P_s \propto \delta z, C$$

キュリー温度 (T_c): 高いほど、幅広い温度範囲で使用可能
 自発分極 (P_s): 高いほど、材料表面に蓄積できる電荷密度大



C: 電荷



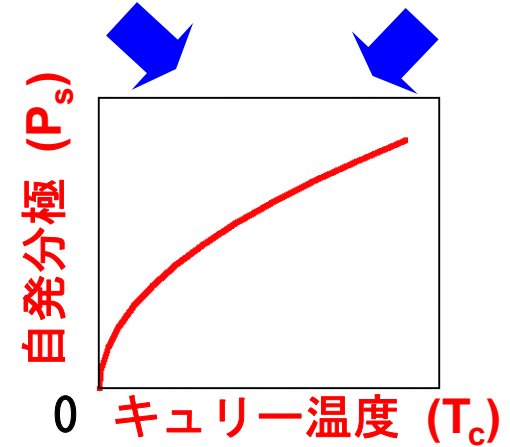
Abrahamsの式

$$T_c = (K/2k_b) \cdot \delta z^2$$

$$P_s = A \cdot \delta z$$

δ_z : 変位

T_c : キュリー温度 K, A : forceconst.
 k_b : ボルツマン定数



Abrahams, Phys. Rev. (1963)

$\delta z, C$ 大 \longrightarrow T_c, P_s 高

$\delta z, C$ が大きいペロブスカイト型酸化物の設計指針

δz

A-site

格子内にBサイトイオンが動くための大きなスペースが必要

Aサイトイオンと酸素との共有結合性大

電気陰性度の差：小

共有結合性：大

$\text{Bi}^{3+} > \text{Pb}^{2+}$

(1.6) (1.7)
酸素との電気陰性度の差

B-site

大きな変位置量

小さいイオン半径

d_0 イオン

$\text{Ti}^{4+} < \text{Nb}^{5+} < \text{Zr}^{4+}$

イオン半径: (0.0605nm) (0.0640nm) (0.0720nm)

C

B-site

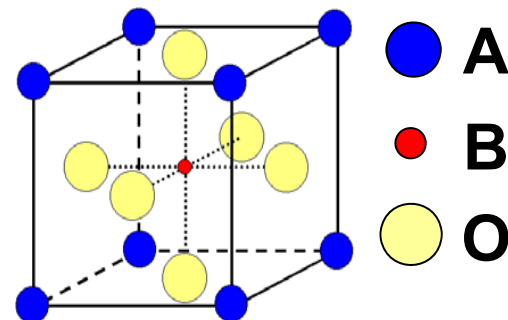
大きな電荷

高い価数

d_0 イオン

$\text{Nb}^{5+} > \text{Ti}^{4+}$

ペロブスカイト構造
構造概念図



ABO_3