

講演題目：ペロブスカイト型強誘電体の価電子の空間分布と構造相転移

講師：黒岩 芳弘 先生

広島大学 大学院理学研究科 物理科学専攻 教授

講演日程：11月11日(火) 16:30～ A12棟 サイエンスホール

セミナー要旨：

チタン酸バリウムに代表されるペロブスカイト型酸化物強誘電体に関する物理は、第一義に格子系の物理であり、従来、構造物性研究の恰好の対象であった。一方、最近では、第一原理電子構造計算の発展により電子論的な取り扱いもされるようになってきた。X線回折データには様々な情報が含まれている。通常の構造解析を行うことにより、格子定数や格子歪み、また、原子位置や原子の熱振動に関する情報、また、混在する不純物や二次相の状態を同定することもできる。さらに、高エネルギーの放射光X線を用いれば、第一原理計算の結果と比較検討できるレベルの精密な電子密度分布を得ることも可能である。この講演会では、放射光回折実験により得られたペロブスカイト型酸化物を構成するフェロアクティブイオンの外殻電子(価電子)の空間分布の特徴を相転移や誘電物性の特徴に関連付けて議論した最近の研究成果を紹介する。

世話人：理学系研究科 物理科学専攻 久保田 佳基 (内線:4050 Email:kubotay@p.s.osakafu-u.ac.jp)