

論文審査の結果の要旨

氏名 金 栄勲

本論文は、6章からなり、1章では研究全体の概要、2章では主要な実験手法である放射光 X 線回折の原理とマキシマムエントロピー法による静電ポテンシャルフラグメント (MaxEnt/fragment EP) 解析法について、3章では SPring-8 を用いた放射光粉末 X 線回折実験について記述されている。4章では 典型的なペロブスカイト構造の強誘電体材料に、MaxEnt/fragment EP 解析法を試み、その妥当性を検証し、5章で、親環境非鉛強誘電体材料 Bi_2SiO_5 へ応用し、自発分極値を定量的に求めることに成功した研究成果について述べている。最後に、6章で研究全体を総括している。

2章から3章で纏められている解析法は、結晶構造における電子/イオン分極に寄与する最小単位の構造モチーフを、可視化された静電ポテンシャルを基にフラグメントとして抽出し、個々の分極を定量的に評価する新しい手法、“MaxEnt/fragment EP 解析法”である。

4章では、典型的なペロブスカイト構造の強誘電体材料、 ATiO_3 (A=Pb, Ba) の自発分極値を MaxEnt/fragment EP 解析法を用いて評価し、共有結合性の低い境界で区切られたフラグメントの分極値を評価することに、MaxEnt/fragment EP 解析法が有効であることを示している。この研究の大きな特徴は、結晶構造内のどのモチーフが誘電特性に寄与しているかを粉末回折データから定量的に明らかにすることができることにある。このことは、誘電分極測定が困難な試料形態を持つ材料でも、粉末試料から自発分極の構造基盤を評価できるようになる事を示している。

そこで、5章で、層状構造を有する親環境非鉛強誘電体材料 Bi_2SiO_5 に MaxEnt/fragment EP 解析法を応用し各フラグメントの分極値と結晶軸方向の自発分極値を求める事を試みている。この応用研究の位置づけを明確にするため、第1節～第4節までで、この材料研究の背景を述べ、第5節～第6節で MaxEnt/fragment EP 解析法による解析プロセスを詳解している。

第2節で注目すべき点は、これまで結晶点群と強誘電物性の相関関係から、既報の Bi_2SiO_5 の結晶構造が、強誘電性の発現を説明できないという課題を、放射光粉末 X 線回折実験データにより Bi_2SiO_5 の精密構造を決定することにより、斜方晶(常誘電体)から単斜晶(強誘電体)への構造相転移の存在を初めて見だし、解決したことである。この研究成果は、 Bi_2SiO_5 が層間方向へ大きい自発分極強を持つ誘電体として高いポテンシャルを有する材料であることを実験的に証明した成果として、原著論文として纏められている。

第4節～第6節では、 Bi_2SiO_5 の静電ポテンシャル分布が、常/強誘電体構造における分

極分布の違い、共有結合性が弱く電子密度の重なりが少ないフラグメントの境界を抽出することに有効であることを示し、この物質の SiO_3 のモチーフが強誘電性の向上に中心的な寄与をしていることを、MaxEnt/fragment EP 解析法で定量的に明らかにすることができたことを述べている。

この研究は、結晶材料であれば、粉末などの形態でも、放射光回折実験から誘電性の評価が、原子・分子レベルで評価できることを、初めて明らかにしたものであり、新誘電材料だけでなく、幅広い材料での物質設計の指針を与える強力な構造科学的研究手法として、構造物性の研究に革新を与えるものである。

本研究は、名古屋大学/谷口准教授のグループ、東京工業大学/伊藤教授と細野教授のグループ、ファインセラミックスセンターナノ構造研究所/桑原主任研究員のグループ、大阪府立大学/森教授のグループ、学習院大学/稲熊教授のグループらとの共同研究であるが、論文提出者が主体となって分析及び検証を行ったもので、論文提出者の寄与が十分であると判断する。

したがって、博士（ 科学 ）の学位を授与できると認める。

以上 1657 字