

論文 / 著書情報
Article / Book Information

| | |
|-------------------|--|
| 題目(和文) | 放射光X線および中性子回折によるK ₂ NiF ₄ 型CaRAIO ₄ (R: 希土類)の異方性熱膨張およびペロブスカイト型酸化物の電子密度の研究 |
| Title(English) | Anisotropic Thermal Expansion of K ₂ NiF ₄ -Type CaRAIO ₄ (R: Rare Earths) and Electron Density of Perovskite-Type Oxides Studied by Synchrotron X-Ray and Neutron Powder Diffraction |
| 著者(和文) | 尾本和樹 |
| Author(English) | Omoto Kazuki |
| 出典(和文) | 学位:博士(工学), 学位授与機関:東京工業大学, 報告番号:甲第9502号, 授与年月日:2014年3月26日, 学位の種別:課程博士, 審査員:八島 正知,佐々木 聡,伊藤 満,梶原 正憲,林 克郎 |
| Citation(English) | Degree:Doctor (Engineering), Conferring organization: Tokyo Institute of Technology, Report number:甲第9502号, Conferred date:2014/3/26, Degree Type:Course doctor, Examiner:,,,, |
| 学位種別(和文) | 博士論文 |
| Category(English) | Doctoral Thesis |
| 種別(和文) | 論文要旨 |
| Type(English) | Summary |

(博士課程)
Doctoral Program

論文要旨

THESIS SUMMARY

| | | | |
|-------------------------|-------|----|----------------------|
| 専攻： Department of | 材料物理学 | 専攻 | 申請学位 (専攻分野)： 博士 (工学) |
| 学生氏名： Student's Name | 尾本 和樹 | | 指導教員 (主)： 八島 正知 |
| | | | 指導教員 (副)： 梶原 正憲 |

要旨 (和文 2000 字程度)

Thesis Summary (approx.2000 Japanese Characters)

本論文は放射光 X 線回折法、中性子回折法および第一原理計算により、ペロブスカイト型および K_2NiF_4 型金属酸化物の結晶構造および電子密度分布を調べ、 K_2NiF_4 型金属酸化物の異方性熱膨張の構造的要因、ならびにペロブスカイト型金属酸化物の化学結合と物性の関係を明らかにした研究をまとめたものである。本論文は「Anisotropic Thermal Expansion of K_2NiF_4 -Type $CaRAIO_4$ (R : Rare Earths) and Electron Density of Perovskite-Type Oxides Studied by Synchrotron X-Ray and Neutron Powder Diffraction (放射光 X 線および中性子回折による K_2NiF_4 型 $CaRAIO_4$ (R : 希土類)の異方性熱膨張およびペロブスカイト型酸化物の電子密度の研究)」と題し、全 6 章で構成されている。

Chapter 1 "Introduction" ではペロブスカイト型酸化物($LaMO_3$ (M : 3d 遷移金属), $PbTiO_3$ - $BiFeO_3$)および K_2NiF_4 型酸化物($CaRAIO_4$ (R : 希土類))の結晶構造、電子状態、熱膨張および物性の既往の研究をまとめ、問題点を指摘して、本論文の目的を記している。

Chapter 2 "Structural Origin of the Anisotropic Thermal Expansion of a K_2NiF_4 -Type Oxide $CaErAlO_4$ Investigated through Interatomic Distances" では K_2NiF_4 型酸化物 $CaErAlO_4$ の異方性熱膨張の構造的要因を、中性子回折法および放射光 X 線粉末回折法により決めた原子間距離の熱膨張により研究している。 c 軸に沿った Al-O 原子間距離の平均熱膨張係数は、 a 軸に沿った Al-O 原子間距離に比べて大きいことを示し、これが異方性熱膨張の要因であることを見出している。さらに Al-O 結合の異方性を放射光 X 線回折実験と密度汎関数理論計算から明らかにしている。そして Al-O 結合の異方性と、Al-O 原子間距離の熱膨張の異方性の関係を考察している。

Chapter 3 "Structural Origin of the Anisotropic Thermal Expansion of K_2NiF_4 -Type Oxides $CaRAIO_4$ (R : La, Pr, Nd, Gd, Sm, Ho, Y and Yb) Investigated through Interatomic Distances" では、 K_2NiF_4 型 $CaRAIO_4$ は異方性熱膨張を示し、 a 軸長および c 軸長の平均熱膨張係数は、希土類(R : La, Pr, Nd, Gd, Sm, Ho, Y, Er and Yb)に依らないことを見出している。 $CaRAIO_4$ の異方性熱膨張の原因は、 R に依らず Al-O 原子間距離の熱膨張と Al-O 結合の異方性にあることを明らかにしている。

Chapter 4 "Electron-Density Distributions of the Perovskite-Type Oxides $LaMO_3$ (M : Cr, Mn, Fe, Co, Ni and Cu) Studied by Synchrotron X-ray Powder Diffraction and First-Principles Calculations. - Correlation with the Band Gap and Young's Modulus" では、ペロブスカイト型酸化物 $LaMO_3$ (M : 3d 遷移金属元素)における $M-O$ 結合間の電子密度と物性の関係を研究している。 $LaMO_3$ の電子密度分布を放射光粉末回折実験と第一原理計算により研究し、 $M-O$ 結合間の最小電子密度とバンドギャップおよびヤング率に相関があることを見出している。

Chapter 5 "Evidence for (Bi,Pb)-O Covalency in the High T_C Ferroelectric $PbTiO_3$ - $BiFeO_3$ with Large Tetragonality" では、ペロブスカイト型 ABO_3 酸化物 $PbTiO_3$ - $BiFeO_3$ (PTBF; $A = (Pb, Bi)$, $B = (Ti, Fe)$) の大きな軸率(c/a)と高い常誘電-強誘電相転移温度(Curie 温度、 T_C)の構造的要因を、電子密度解析により明らかにしている。PTBF の強誘電相 (室温) の(Bi,Pb)-O 結合における最小電子密度は Bi を置換していない $PbTiO_3$ の Pb-O 結合と比べて高いことを見出している。これは Pb サイトに Bi を置換することで A 陽イオンと酸化物イオン間の共有結合性が高くなることを示唆しており、大きな軸率(c/a)と高い転移温度(T_C)の要因となっていることを明らかにしている。

Chapter 6 "Summary and General Conclusions" Chapter 5 までを総括し、本研究の結果を要約している。

備考：論文要旨は、和文 2000 字と英文 300 語を 1 部ずつ提出するか、もしくは英文 800 語を 1 部提出してください。

Note：Thesis Summary should be submitted in either a copy of 2000 Japanese Characters and 300 Words (English) or 1copy of 800 Words (English).

(博士課程)
Doctoral Program

論文要旨

THESIS SUMMARY

専攻： 材料物理学 専攻
Department of
学生氏名： 尾本 和樹
Student's Name

申請学位(専攻分野)： 博士 (工学)
Academic Degree Requested Doctor of
指導教員(主)： 八島 正知
Academic Advisor(main)
指導教員(副)： 梶原 正憲
Academic Advisor(sub)

要旨 (英文 300 語程度)

Thesis Summary (approx.300 English Words)

K_2NiF_4 -type and Perovskite-type oxides are utilized in a wide variety of applications such as solid-oxide fuel cells, catalysts, and gas sensors. Crystal structure and electronic state are important, because almost all the properties are governed by them. In the present work, the crystal structure, electron density distribution, and electronic state in the K_2NiF_4 -type and Perovskite-type oxides were studied through the neutron powder diffraction, synchrotron powder diffraction, and density functional theory (DFT). And, studied the correlation of crystal Structures, electronic Structures, and physical properties in the K_2NiF_4 -type and Perovskite-type oxides.

備考：論文要旨は、和文 2000 字と英文 300 語を 1 部ずつ提出するか、もしくは英文 800 語を 1 部提出してください。

Note : Thesis Summary should be submitted in either a copy of 2000 Japanese Characters and 300 Words (English) or 1copy of 800 Words (English).