

博士學位論文

内容の要旨

および

審査の結果の要旨

平成 18 年 3 月 (乙第 5 号)

湘南工科大学

は し が き

本号は学位規則（昭和28年4月1日文部省令第9号）第8条の規定による公表を目的として、2006年3月21日に本学において博士の学位を授与した者の論文内容の要旨および論文審査の結果の要旨を収録したものである。

氏名	高橋 毅 (千葉県)
学位の種類	博士 (工学)
学位の番号	乙第 5 号
学位授与の条件	学位規定第 3 条第 3 項該当
学位授与の日付	平成 18 年 3 月 21 日
学位論文題目	第一原理法による複合ペロブスカイト型 マイクロ波誘電体に関する研究
論文審査委員	(主査) 湘南工科大学教授 杉原 淳 (副査) 東京工業大学教授 河村 雄行 (副査) 湘南工科大学教授 日高 建彦 (副査) 湘南工科大学教授 林 卓

論文内容の要旨

高周波用基板や誘電体共振器、高周波フィルタに使用されるマイクロ波誘電体材料として高 Q 値で知られている複合ペロブスカイト型材料に関して、構造相転移と結晶構造、誘電特性のシミュレーション研究を行った。第一原理法計算と Cluster Expansion 法、Monte Carlo 法とのコンビネーションを用いることにより、以下が得られた。

① $\text{Ba}(\text{Mg}_{1/3}\text{Ta}_{2/3})\text{O}_3$ 系マイクロ波誘電体は規則化 (1:2 オーダリング六方晶相、 P_{3m1}^-)・不規則化 (単純ペロブスカイト構造、 P_{m3m}) 相転移が 3,770K で起こっており、1:2 規則構造 (基底構造) における八面体 (オクタヒドロン) 構造が規則化の促進によりツイストすることが判明した。また、状態密度 DOS の解析から、フェルミ・レベルの約 3eV 下のところにおいて、O の 2p 軌道と Ta の 5d 軌道のオーバーラップが観察され、Ta-O 間に強いボンディングが存在することが証明された。

② 実験的に不規則構造を示す $\text{Ba}(\text{Zn}_{1/3}\text{Nb}_{2/3})\text{O}_3$ 系は実用的な温度では規

則形構造と予測された。この結果は一般的な実験結果とは反するが、Kimらのラマンスペクトル観察結果を裏付けるものであり、実験的に合成された $\text{Ba}(\text{Zn}_{1/3}\text{Nb}_{2/3})\text{O}_3$ が XRD 的には不規則構造を示しているも、局所的や微視的には規則構造を保有している可能性が指摘できた。

③種々の $\text{Ba}(\text{B}'^{2+}_{1/3}\text{B}''^{5+}_{2/3})\text{O}_3$ 系マイクロ波誘電体の規則・不規則転移を見積もり、その相安定性が特性へ与える影響と材料設計手法を議論した。この計算から、規則・不規則構造のエネルギー差 $\Delta E_{\text{SQS-GS}}$ と格子歪、マイクロ波 Qf 値が強い相関をもっていることが判明した。この相関式を用いて、2 価の B' サイト候補と B'' サイトに Zn と Nb を配した場合の検討により、従来よりも高い Qf 値を示す材料が 6 種類見出され、その材料は、 $\text{Ba}(\text{Hg}_{1/3}\text{Ta}_{2/3})\text{O}_3$ 、 $\text{Ba}(\text{Cd}_{1/3}\text{Nb}_{2/3})\text{O}_3$ 、 $\text{Ba}(\text{Cd}_{1/3}\text{Ta}_{2/3})\text{O}_3$ 、 $\text{Ba}(\text{Sr}_{1/3}\text{Nb}_{2/3})\text{O}_3$ 、 $\text{Ba}(\text{Sr}_{1/3}\text{Ta}_{2/3})\text{O}_3$ 、 $\text{Ba}(\text{Ca}_{1/3}\text{Nb}_{2/3})\text{O}_3$ であり、最も高い Qf 値を有する可能性がある $\text{Ba}(\text{Sr}_{1/3}\text{Ta}_{2/3})\text{O}_3$ では、従来の約 3 倍にも到達する 1,481,000(GHz)を保有する可能性があることが判明した。

論文審査の結果の要旨

本論文は、高周波などのセラミックスを作成するに当たって、経験的に行われている世界にすこしでも、シュミレーションのメスを入れることに挑戦したものである。企業においても、こうした基礎的な切り口でセラミックスを開発しなければならない。その点が本研究において達成されている。

特に、誘電体（酸化物）については、第一原理を適用すること自体が極めて難しい課題である。従って、ここではモンテカルロ法と、あわせ利用することで、誘電体を設計する指針を得ることに成功している。

審査論文が投稿中を入れて、トップネームで7報あり、学会発表も十分に行われている。さらに海外の活躍も広く行われている。

また本研究に関わった高周波や誘電体など、5件の特許を出している。その他の特許は30件に及ぶ。

本日の公聴会においても、企業、大学及び院生などの出席のもと、的確な発表が行われた。

よって本論文は博士（工学）の学位論文として合格と判定した。