

第21回フロンティア材料研究所講演会

講師：山内 邦彦氏

大阪大学産業科学研究所ナノ機能予測研究分野 助教

12月8日(木) 15時～17時
すずかけホール集会室2にて

演題：遷移金属酸化物の第一原理電子状態計算

ペロブスカイト構造をもつ遷移金属酸化物は磁性・誘電性・電荷秩序・軌道整列など多彩な物性を示す。我々はこれらの物性の微視的機構を電子状態から解明することを目的とした第一原理計算を行なっている。本講演では、 TbMnO_3 における磁気誘起強誘電性に関する計算結果、および、 BiNiO_3 におけるサイト間電荷移動に関する計算結果を報告する。

連絡先：東 研究室(5315)