

平成 29年 1月 27日

論文審査結果の要旨

専攻 入学年度	物質・情報工学専攻 平成 27 年度 (4 月) 入学	氏名	小袋 由貴
論文題目	機能性複合酸化物の組成制御と特性評価および固体電子構造解析に関する研究		
審査委員 職名及び氏名	主査	教授 酒井 剛	
	副査	教授 湯井 敏文	
	副査	教授 白上 努	
	副査	准教授 井上 謙吾	
	副査	准教授 奥山 勇治	
	副査	准教授 松永 直樹	
審査結果の要旨 (800字以内)			
<p>本論文では、4 種類の複合酸化物に着目し、材料合成と物性評価および計算化学によって、単相試料合成法の確立や添加物の効果および電子状態の解析を行ったものである。</p> <p>第 2 章では、ビスマス系複合酸化物 $\text{Sr}_2\text{Bi}_2\text{O}_5$ の単相試料が金属錯体から合成でき、低温での短時間焼成による高比表面積化が可能であることを示した。また、得られた単相試料の光学特性から半導体特性を評価するとともに、希土類元素の添加効果を調べ、La 添加によって $\text{Sr}_2\text{Bi}_2\text{O}_5$ の吸収特性がレッドシフトし、可視光照射下でも高いイソプロパノール分解活性を示すことを明らかにした。第 3 章では、改良型 Becke-Johnson ポテンシャルを用いた第一原理エネルギーバンド計算から、$\text{Sr}_2\text{Bi}_2\text{O}_5$ の価電子帯-伝導帯間の電子構造を明らかにし、光学バンドギャップと光吸収スペクトルの実験結果を精度よく再現できることを実証した。さらに、$\text{Sr}_2\text{Bi}_2\text{O}_5$ の電子構造に対する La ドープ効果を解析し、光触媒活性の向上がバンドギャップの狭窄化によることを示した。第 4 章では、結晶歪みを有する銀系の材料 $\text{Ag}_6\text{M}_2\text{O}_7$ (M = Si, Ge) について、第一原理エネルギーバンド計算を行い、結晶内部の双極子モーメントの存在が触媒活性の発現に重要であることを明らかにした。第 5 章では、強く局在化した複雑な f 電子間の相互作用を電子構造計算に反映させる計算手法を提案し、f 電子を含む固体の電子構造を低コストで解析できることを示した。第 6 章では、CaFe_2O_4 について、有機酸錯体法を用いた低温合成による高比表面積化とともに、Zr の添加による多孔質化が可能であることを明らかにした。</p> <p>以上のように、本研究では、機能性複合酸化物の組成制御と特性評価および固体電子構造解析によって、高比表面積を有する複合酸化物の合成方法を確立し、異種元素の添加により特性を向上できることを明らかにした。さらに、第一原理エネルギーバンド計算によって物性の基礎となる固体電子構造を明確にした。各章の内容は、5報の論文として既に掲載されており、博士論文として高い完成度でまとめられていると判断された。公聴会での発表および質疑応答も適切であり、本審査委員会は論文審査および最終試験に合格したと判定する</p>			

(注 1) 論文題目が外国語の場合は日本語を併記すること。

(注 2) 最後に「公聴会での発表および質疑応答も適切であり、本審査委員会は論文審査および最終試験に合格したと判定する」という文言を統一して記載すること。