

学位論文の要旨

フリガナ 氏名	オブクロ ユキ 小袋 由貴
専攻 入学年度	宮崎大学大学院農学工学総合研究科博士後期課程 物質・情報工学専攻 平成27年度（4月）入学
学位論文 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
<p>【論文の要旨】（和文の場合1,200字程度、英文の場合800語程度）</p> <p>金属酸化物および複合酸化物は、物理的・化学的に極めて多彩な物性を示し、構成元素の一部を異種元素で置換したり、酸素の不定比性を変化させることによって、固体内の電荷分布、電子軌道の相関、欠陥の種類と濃度などを変化させ、電気伝導度、磁気特性、光学特性などを制御することが可能である。但し、多結晶体から成る酸化物粉体では、調製方法によって物性値が大きく異なり、粒径、粒界、不純物など外部因子の影響を強く受けるため、その機能性は系統的に解明されていないことが多い。また、金属酸化物の機能性は、電子状態に強く依存するため、固体電子構造の解析は、物性の本質を理解するために重要である。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科学的な検討を行って以下の結果を得た。</p> <p>第2章では、可視光領域で高い活性を示す光触媒材料の創製を目的に、ビスマス系複合酸化物 $\text{Sr}_2\text{Bi}_2\text{O}_5$ を金属錯体から合成し、低温での短時間焼成による高比表面積化とともに、得られた単相試料の光学特性を評価した。また、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 ドープ効果を一般化密度勾配法の枠内で解析し、光触媒活性の向上がバンドギャップの狭窄化によると結論づけた。第4章では、可視光応答型光触媒である $\text{Ag}_6\text{M}_2\text{O}_7$ ($\text{M} = \text{Si}, \text{Ge}$) について、その固体電子構造、有効質量および光学特性を解析し、報告されている実験値と比較するとともに、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、プロトン伝導体に応用可能な LaYbO_3 について、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、エコ・フレンドリーな機能性材料である 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。</p>	

- (注1) 論文博士の場合は、「専攻、入学年度」の欄には審査を受ける専攻を記入すること。
- (注2) フォントは和文の場合、10.5ポイントの明朝系、英文の場合12ポイントのtimes系とする。
- (注3) 学位論文題目が外国語の場合は日本語を併記すること。
- (注4) 和文又は英文とする。