

## 研究者プロフィール

材料システム工学科 Dept. of Materials System Engineering —材料化学 Materials Chemistry—

小袋 由貴 OBUKURO Yuki

研究業績 (論文・著書・その他の活動)



- [1] First-principles study on electronic structure of LaYbO<sub>3</sub> with MBJ-LDA +U approach, Y. Obukuro, K. Ninomiya, M. Arai, Y. Okuyama, G. Sakai, S. Matsushima, *Comput. Mater. Sci.*, 126, 7-11 (2017).
- [2] Effects of La doping on structural, optical, electronic properties of Sr<sub>2</sub>Bi<sub>2</sub>O<sub>5</sub> photocatalyst, Y. Obukuro, S. Matsushima, K. Obata, T. Suzuki, M. Arai, E. Asato, Y. Okuyama, N. Matsunaga, G. Sakai, *J. Alloys and Comp.*, 658, 139-146 (2015).
- [3] Formation of CaFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub> porous structure by addition of Zr in malic acid complex, Y. Obukuro, K. Obata, R. Maeda, S. Matsushima, Y. Okuyama, N. Matsunaga, G. Sakai, *J. Ceram. Soc. Jpn.*, 123[10] 995-998 (2015).
- [4] Electronic structure of Eu-doped SrAl<sub>2</sub>O<sub>4</sub> using modified Becke-Johnson exchange potential, Y. Obukuro, S. Matsushima, H. Nakamura, M. Arai, H. Yamada, C.H. Xu, *Solid State Comm.*, 186, 46-49 (2014).

古くから土器や陶磁器として人類に利用されてきた金属酸化物は、使用する原料や化学組成、合成方法、形状付与の全ての過程で精密に制御されることにより、物理的・化学的に極めて多彩な特性を示します。当研究室では、酸化物系ファインセラミックスについて、光触媒や電気化学デバイス材料への応用展開を目指した材料設計に取り組んでいます。具体的には、(1) 高比表面積を持つ Bi 系または Fe 系複合酸化物の合成方法の検討、(2) 複合酸化物に対する異種元素の添加効果を研究しています。調製した試料粉体の物性評価 (結晶構造, 粒子形態, 光学特性等) とともに、固体物性の本質を理解するために量子力学に基づく固体電子構造解析にも挑戦しています。

## 研究分野キーワード

無機工業材料, 無機材料・物性, 光触媒