

研究タイトル：機能性酸化物セラミックスの合成と物性評価に関する研究



氏名：	小袋 由貴 / OBUKURO Yuki	E-mail:	obukuro@kurume-nct.ac.jp
職名：	准教授	学位：	博士（工学）
所属学会・協会：	日本セラミックス協会，日本化学会，DV-X α 研究協会		
キーワード：	金属酸化物，無機工業材料，光触媒，第一原理計算		
技術相談	・金属酸化物粉末の液相合成技術		
提供可能技術：	・セラミックスの物性評価（結晶構造解析，吸光度測定，色度測定）		

研究内容：機能性酸化物セラミックスの合成と物性評価に関する研究

金属酸化物は、原料の選定から化学組成、合成手法、粒子形態などを制御することで多様な物理的・化学的性質を示す材料である。当研究室では、光触媒、顔料、固体電解質への応用に向けた機能性酸化物の材料設計と物性解明に取り組んでいる。ここでは最近の研究テーマを2つ紹介する。

(1) 液相合成法による低温合成プロセスの開発と無機顔料への応用

有機酸錯体法は、金属イオンと有機酸からなる錯体を熱分解して複合酸化物を得る液相合成法である。従来の固相反応法に比べて低温・短時間での焼成が可能である。本手法により、750℃で合成した $Y_2Cu_2O_5$ は、均一な粒子形態と良好な結晶性を示し、低温での焼成によりこれまで報告のなかった淡い水色が得られることを見出した。組成や粒子特性の制御性にも優れており、高比表面積が要求される光触媒や電気化学デバイス材料などへの応用も期待される。現在は、熱処理温度や時間、雰囲気などの合成条件と生成物との関係を系統的に調査し、本合成プロセスの確立に取り組んでいる。

Y. Obukuro et al., Mater. Lett., 355, 135451 (2024)

(2) 第一原理計算によるプラセオジウムイエローの発色機構解析

環境に優しい無機黄色顔料として注目されるプラセオジウムイエロー（Pr-doped $ZrSiO_4$ ）について、一般化密度勾配法（GGA）法および改良型 Becke-Johnson（MBJ）法を用いた第一原理固体電子構造解析を行った。特に、MBJ 法に on-site クーロン相互作用（+U）を加味することで、Pr 4f 状態のエネルギー準位を定量的に評価できることを示した。この研究成果は、Pr ドーピングによる電子状態の変化を理論的に明らかにするとともに、プラセオジウムイエローにおける発色の起源について基礎的知見を与える。

Y. Obukuro et al., J. Ceram. Soc. Jpn., 129 [12], 764-769(2021)

提供可能な設備・機器：

名称・型番（メーカー）	
X線回折装置・Empyrean（マルバーク・パナリティカル）	
小型色彩計 / 白色度計・NW-12（日本電色工業株式会社）	
紫外可視分光光度計・V-750（日本分光）	