

第3回 無機材料研究会

第3回無機材料研究会を下記の要領で開催しますので、奮ってご参加ください。今回は、電子構造計算とナノ構造材料がテーマです。土曜日の開催ですが、教官だけでなく大学院生の参加も期待しています。

日時：平成15年6月7日(土)午後2時半 - 5時

場所：京都工芸繊維大学 12号館4階25講義室

講演 1：小林久芳 先生（倉敷芸術科学大学 産業科学技術部 化学科）

「ペロブスカイト系結晶の電子構造計算」

多くのペロブスカイト結晶について密度汎関数法による電子構造の計算を行った。単純な2元系酸化物は、原子価帯は酸素原子の2p軌道、伝導帯は金属原子のd軌道から構成されるという典型的電子構造をもつが、Pb、BiあるいはAgなどの元素を含む化合物では、これらの元素の軌道が原子価帯を構成する酸素原子の2p軌道と混成することにより、バンドギャップが減少するという計算結果が得られた。一方、Ga、Ge、In、Snなどの酸化物では、原子価帯は結合性、伝導帯は反結合性という、より共有結合的な描像が当てはまる。

講演 2：南埜宜俊 先生（大阪大学大学院 工学研究科
知能・機能創成工学専攻）

「強加工によるナノ構造バルク材の創製とその機械的特性」

我々のグループは、強加工によって大量の力学エネルギーを投入する方法で100nm程度の超微細結晶粒組織をもった構造バルク材の創製を目指した研究に、近年、力を注いできた。今までにおおよそ500nm程度の結晶粒材料は作製できていたが、昨年从去年から数100nmから100nm程度の超微細結晶粒バルク材料の創製が出来始めてきた。これらの材料は高強度をもつが、延性に問題点が存在する。我々が得ている500nmから100nm程度の超微細結晶粒バルク材の創製方法やその機械的特性の長所や問題点を中心に紹介する。

研究会終了後（午後5時10分頃）から、物質工学科図書会議室に於いて、ささやかなビアパーティを開く予定にしております。学生は無料、教官など収入のある方からは千円程の寄付を頂きます。こちらの方へも、ふるって参加して下さるようお願いいたします。

無機材料研究会世話人（石川 洋一(724-7503)、石田 信伍、大田 陸夫、岡本 泰則、木島 式倫、塩野 剛司、塩見 治久、Giuseppe Pezzotti、竹内 信行、田中 嘉一郎、田中 勝久(724-7576)、中平 敦、西田 俊彦、若杉 隆）