

I. 現在の研究テーマ、研究内容

1. キーワード

金属クラスター・ナノ粒子・表面プラズモン・キラル・発光・磁気円二色性
量子化学・計算化学・Au クラスター・分子クラスター・光学活性・反応機構
量子ナノ材料、密度汎関数法、分子軌道、化学結合

2. 研究テーマ

分子・クラスターを基軸とする精密ナノ構造設計と磁気・光機能性
分子・クラスターの分子構造と分光スペクトルに関する理論解析
量子ナノ材料の計算機シミュレーション

II. 研究活動

1. 口頭発表

●国際会議

- (1) International Conference of Computational Methods in Sciences and Engineering (ICCMSE)
Taku Onishi、クレタ島 (ギリシア)、2020 年 5 月 (招待講演)

●国内学会

- (1) 2020 日本化学会中国四国支部大会 島根大会 (202011) オンライン
“ $[\text{Au}_9(\text{PPh}_3)_8]^{3+}$ 及び $[\text{PdAu}_8(\text{PPh}_3)_8]^{2+}$ の安定構造と溶媒効果に関する理論的研究”
江城 樹, 三谷 昌輝, 八尾 浩史

●その他

- (1) 三重大学 E 領域国際シンポジウム (202011) 三重大学
“Intense Plasmon-Induced Magnetic Circular Dichroism (MCD) in One-Dimensional Substoichiometric Tungsten Oxide (WO_{3-x}) Nanostructures”
Taichi Masuda, Hiroshi Yao
- (2) 三重大学 E 領域国際シンポジウム (202011) 三重大学
“Tautomerically-Controlled Dual Fluorescence in Organic Nanoparticles based on Lewis-Pair Formation”
Taku Munakata, Hiroshi Yao
- (3) 三重大学 E 領域国際シンポジウム (202011) 三重大学
“Water-Soluble Phosphine-Protected Au_9 Clusters: Ligand Substituent Dependence of Gel-Electrophoretic and Spectroscopic Behaviors”
Shota Sakai, Hiroshi Yao

2. 著書

なし

3. 学術論文

●原著論文

- (1) “Dominant role of iron oxides in magnetic circular dichroism of plasmonic-magnetic Au-Fe_{3-x}O₄ heterodimer nanostructures”
Daichi Ito, Hiroshi Yao
J. Magn. Magn. Mater. [500, pp.166385～ (202001)]
- (2) “Magnetic circular dichroism in plasmonic Ag-Au core-shell nanoparticles: How does the magneto-optical activity tune?”
Hiroshi Yao, Taisuke Shiratsu
J. Nanophoton. [14, pp.026009～ (202004)]
- (3) “Intense Plasmon-Induced Magneto-Optical Activity in Sub-Stoichiometric Tungsten Oxide (WO_{3-x}) Nanowires/Nanorods”
Taichi Masuda, Hiroshi Yao
J. Phys. Chem. C [124, pp.15460～15467 (202006)]
- (4) “Strong chiroptical activity in Au₂₅ clusters protected by mixed ligands of chiral phosphine and achiral thiolate”
Takumi Nashimoto, Hiroshi Yao
Phys. Chem. Chem. Phys. [22, pp.15288～15294 (202006)]
- (5) “Chiral-Achiral Ligand Synergy in Enhancing the Chiroptical Activity of Diphosphine-Protected Au₁₃ Clusters”
Yasuhiko Sato, Masaki Mitani, Hiroshi Yao
J. Phys. Chem. C [124, pp.25547～25556 (202011)]
- (6) “On the electronic transitions of α -Fe₂O₃ hematite nanoparticles with different size and morphology: Analysis by simultaneous deconvolution of UV-vis absorption and MCD spectra”
Shotaro Mizuno, Hiroshi Yao
J. Magn. Magn. Mater. [517, pp.167389～ (202101)]
- (7) “Hydride ion-conducting mechanism on two dimensional layer of La₂LiHO₃ perovskite”
Taku Onishi
AIP Conference Proceedings, 2343, 020001 (2021)
- (8) Preface of “The 6th Quantum Science (QS) Symposium”
Taku Onishi
AIP Conference Proceedings, 2343, 020001 (2021)

4. その他の研究成果

なし

5. 学会賞等

なし

6. 新聞記事等

なし

Ⅲ. 研究費関係

1. 文部科学省科学研究費

(1) 科学研究費（基盤研究（B））

「プラズモニック金属ナノ構造体の化学的環境制御と新規な磁気円二色性応答の発現」

（代表・八尾 浩史・工学研究科・継続・18H01808） 1,040（千円）

2. 他省庁・財団からの基金

なし

3. 民間等との共同研究・受託研究

なし

4. 奨学寄付金

(1) 公益財団法人 大倉和親記念財団・1,000（千円）

Ⅳ. 国際交流

なし

Ⅴ. その他

なし

個人資料

教授・八尾 浩史

●所属学協会及び役員・委員等

- ・日本化学会（1986～）
- ・日本分光学会（1992～）
- ・Royal Society of Chemistry（2010～）
- ・日本化学会・日本化学会 東海支部 常任幹事・常任幹事（2019～2020）
- ・日本化学会・日本化学会 東海支部・会計幹事（2020～2021）
- ・日本化学会・CSJ 化学フェスタ 2020（2020～2020）
- ・東海化学工業会・幹事・幹事（2020～2022）

●その他

- ・東海化学工業会 幹事 委員（2020～2021）
- ・日本化学会 東海支部 会計幹事 委員（2020～2021）
- ・日本化学会・東海支部 幹事会 委員 常任幹事（2019～2020）

准教授・三谷 昌輝

●所属学教会及び役員・委員等

- ・日本化学会・正会員（1991～）
- ・分子科学会・正会員（2007～）
- ・日本化学会・東海支部代議員（2020～2020）

助教・大西 拓

●所属学教会及び役員・委員等

- ・日本化学会・正会員（2001年～）
- ・応用物理学会・正会員（2007年～）
- ・固体イオニクス学会・正会員（2008年～）
- ・イギリス王立化学会・正会員（2011年～）

●国内・国際会議等の役員・委員等

国際会議役員・委員

- (1) Quantum Science (QS) symposium, 実行委員長（ギリシア）
- (2) ICCMSE, サイエンス委員（ギリシア）

国際雑誌・編集委員

- (1) Journal of Computational Methods in Sciences and Engineering (IOS press)
- (2) Cogent Engineering (Taylor & Francis)