

計算化学(量子ナノ機能化学)研究室

八尾 浩史 教授

三谷 昌輝 准教授

大西 拓 助教

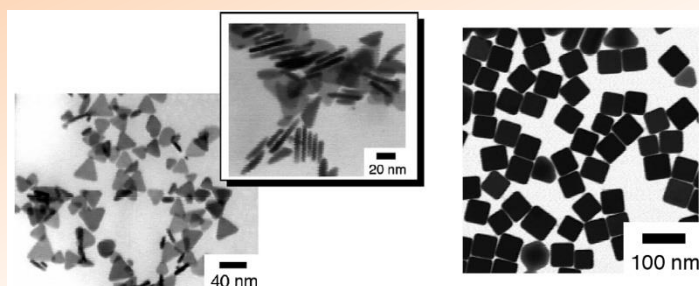
https://www.cc.chem.mie-u.ac.jp/ccl_index.html

研究室概要: 溶液化学的な手法に基づいた、分子や無機クラスターを基軸とする「ナノ構造設計」、及び、作製したナノ構造体の「光機能性」に関する研究を、実験と計算の両面から展開しています。

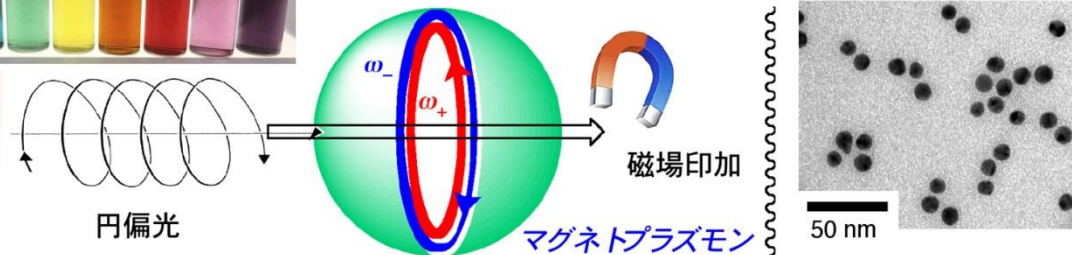
産学連携が可能な研究テーマ: 溶液化学的なナノ構造体作製、光学・発光材料、量子化学計算による構造・物性の理論予測、無機キラル材料・プラズモニック材料



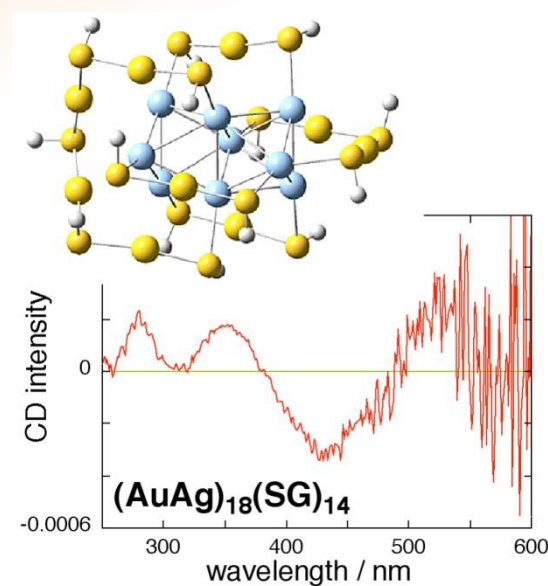
有機ナノ粒子からの発光



Agナノプリズム・ナノキューブ



プラズモニック金属ナノ粒子分散液と磁気光学応答測定



合金ナノクラスター(AuAg)₁₈(SG)₁₄
円二色性応答・クラスター構造

教授 八尾 浩史

ウェットケミストリーを基盤にボトムアップの手法を駆使して、様々な(有機・無機にこだわらない)ナノ粒子・ナノクラスターを精密に作製し、「ナノ」の世界に特徴的な物性、特に、新しい光機能性(発光特性)やキラル機能の発現、およびその機構解明を目指して研究を進めています。更に最近では、非磁性のプラズモニックナノ金属が示す磁気光学応答にも注目し、新しいナノ機能の発掘を目指しています。

准教授 三谷 昌輝

密度汎関数理論に基づく量子化学計算を適用して、有機分子クラスターや配位子で保護された金クラスターの安定構造と反応性や分光スペクトルなどについて、理論解析を行っています。鏡像異性体のHausdorff Chirality Measureを数値計算で求めることにより、配位子で保護された金クラスターの光学活性に対する金属核部分と配位子部分の寄与などについて、理論解析を行っています。

助教 大西 拓

ナノシミュレーションによる先端ナノ材料の設計と機能解析、主として、下記のナノ材料をターゲットとして理論的研究を進めています。
(1) 光触媒
(2) ナノ粒子・ナノクラスター
(3) 二次電池ナノ材料