

ナノ材料物理化学研究室

教授 伊藤 彰浩
准教授 小塩 明

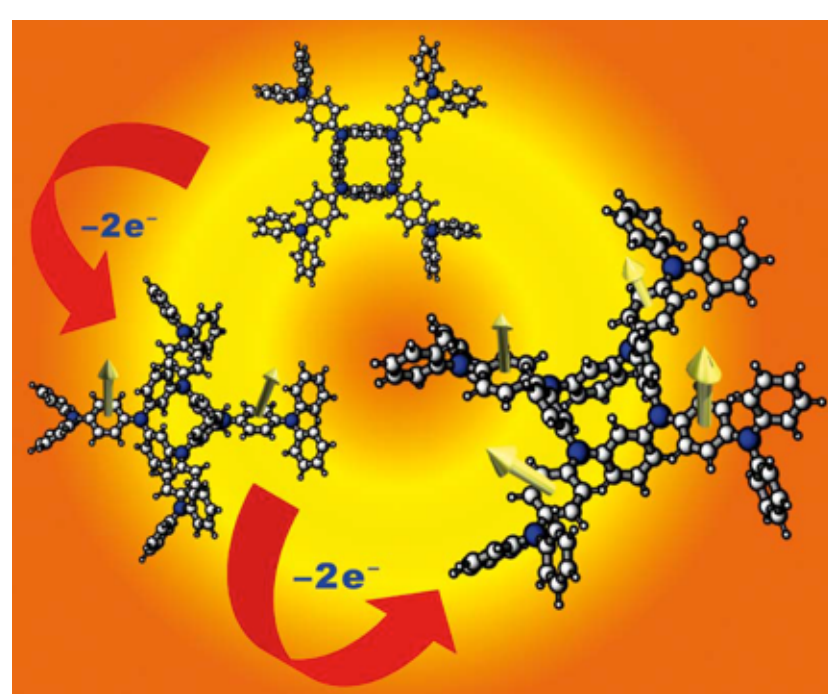


研究室概要：

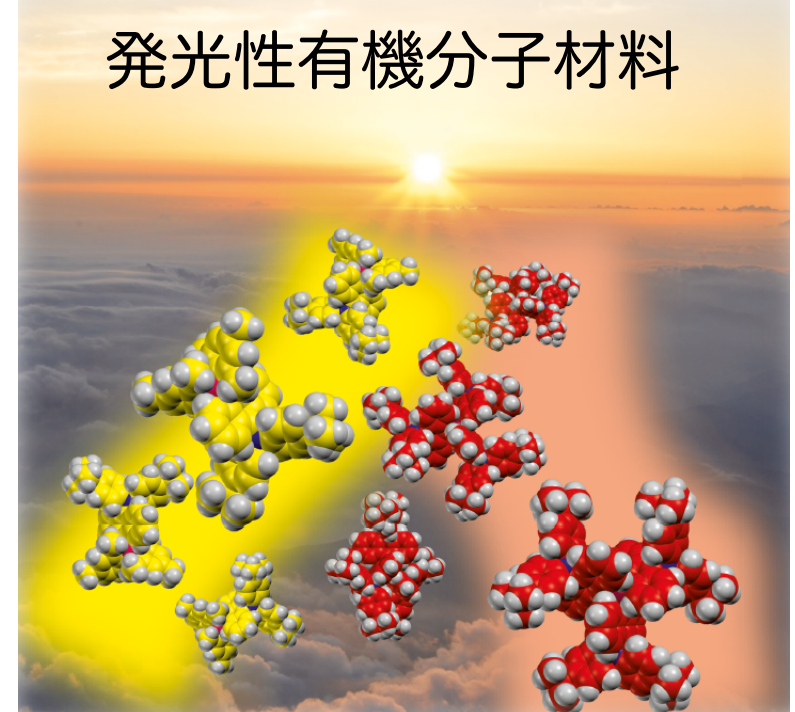
- ① 機能性有機分子材料の設計・電子状態解明・機能発現についての研究。
- ② プラズマ、熱などの高温反応場を利用したナノサイズのカーボンやシリコン、金属とのナノ複合体材料の成長技術や材料応用についての研究。

産学連携が可能な研究テーマ：

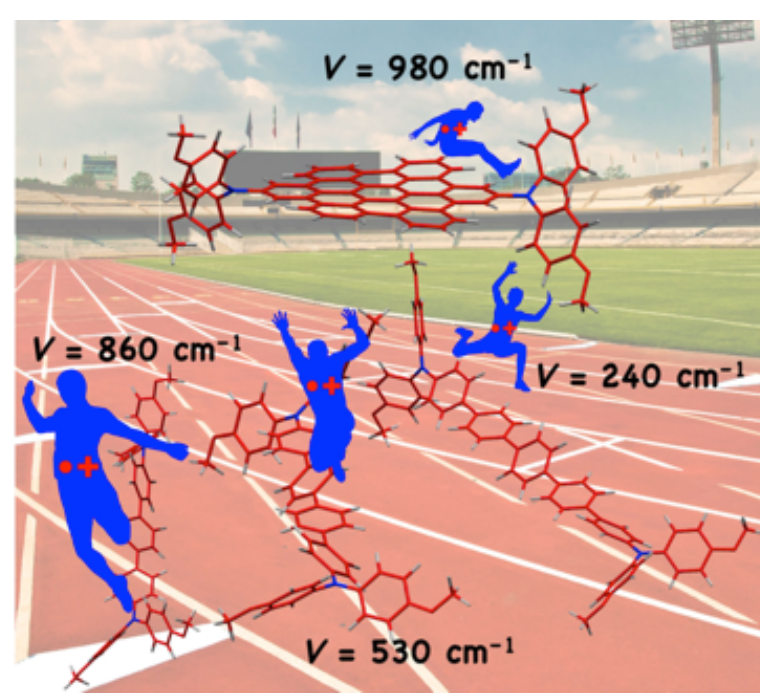
- ① 各種分子エレクトロニクス用 π 電子系有機分子材料の分子設計・開発。
- ② アーク放電法、化学気相成長法等によるナノ物質開発。ナノチューブ、ナノワイヤ、ナノ粒子の導電助剤や蛍光材料をはじめとする新規材料などへの応用展開。



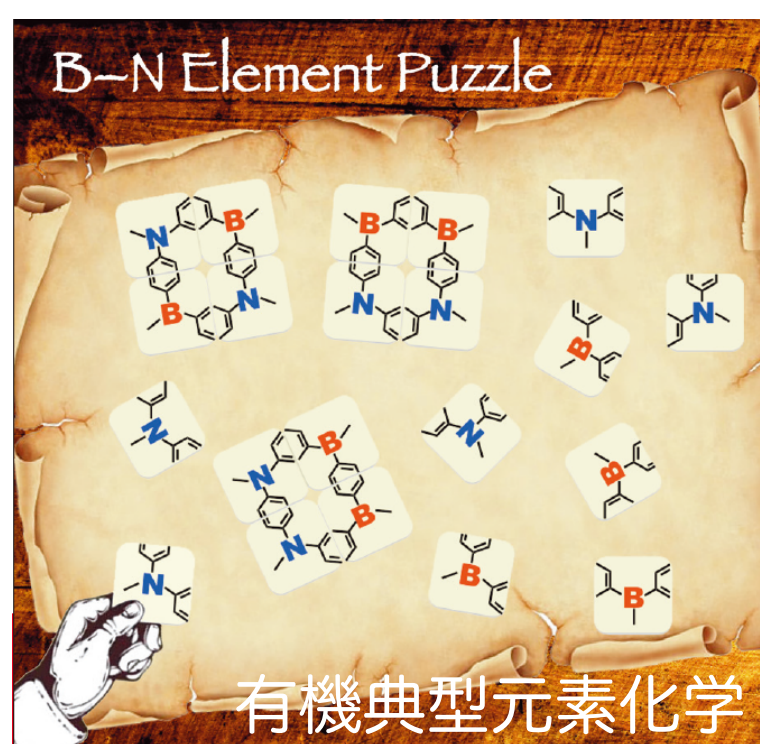
マルチスピン有機分子材料



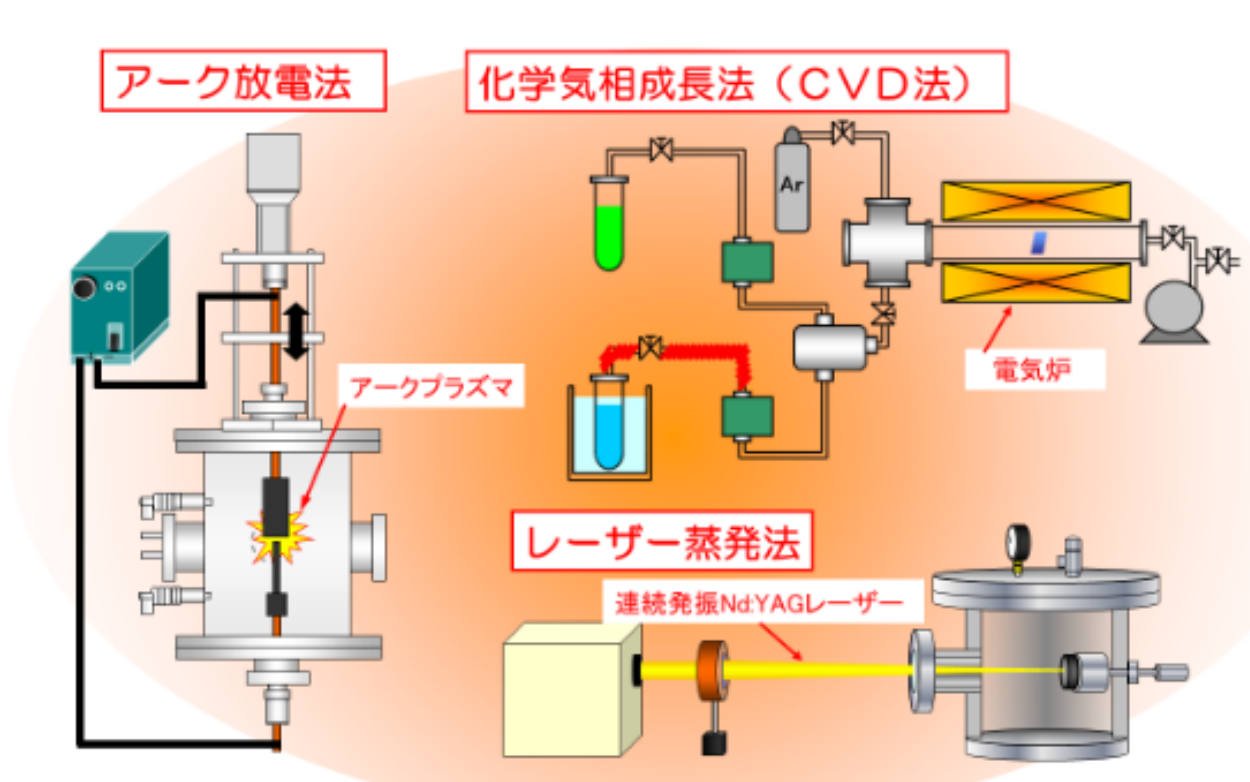
発光性有機分子材料



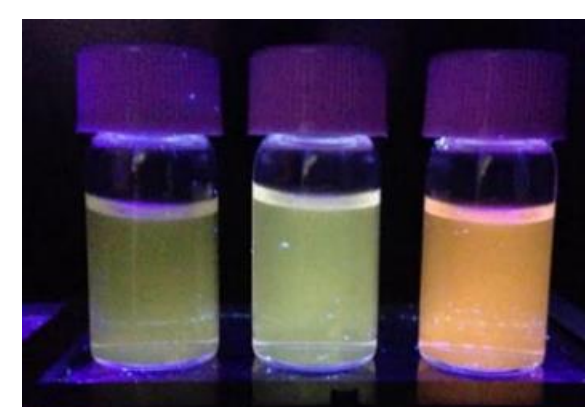
有機混合原子価分子系



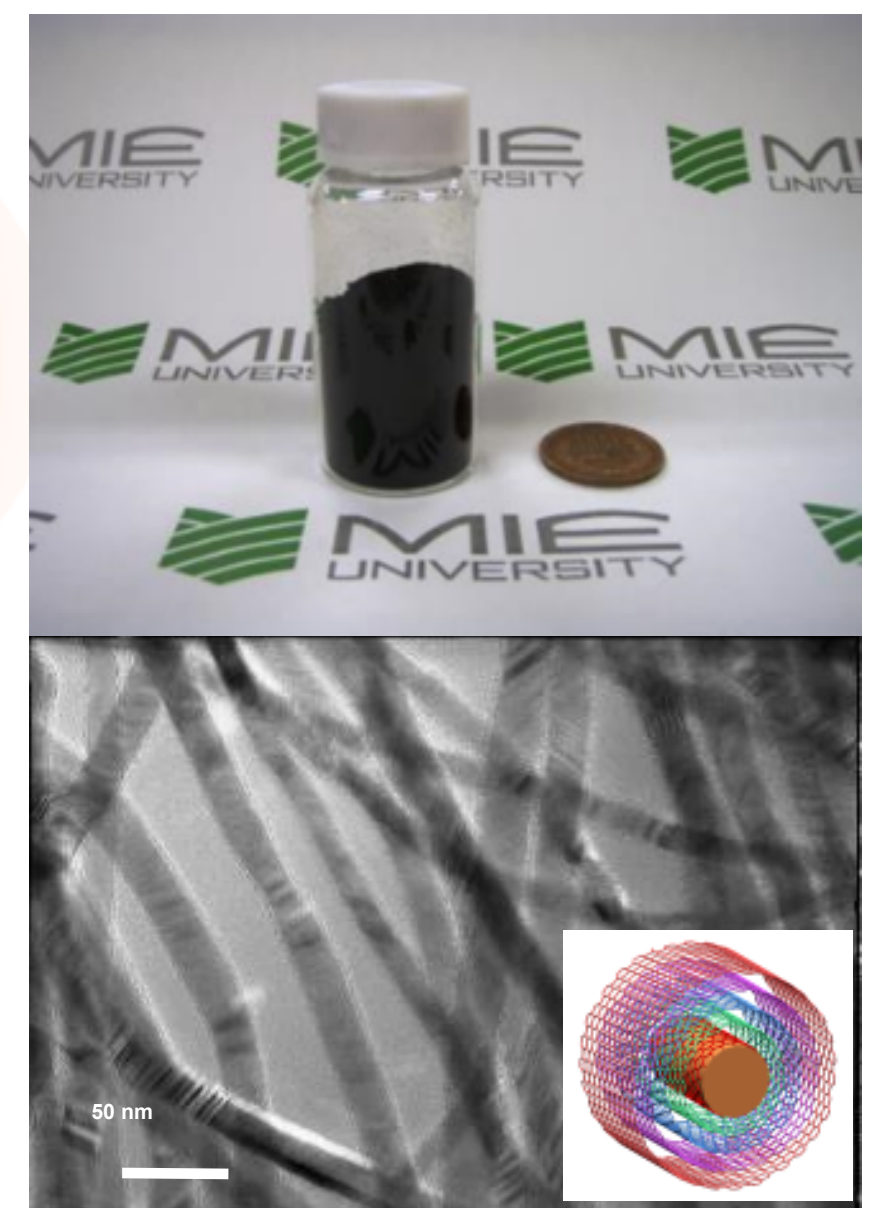
有機典型元素化学



高温反応場を利用するナノ物質創成

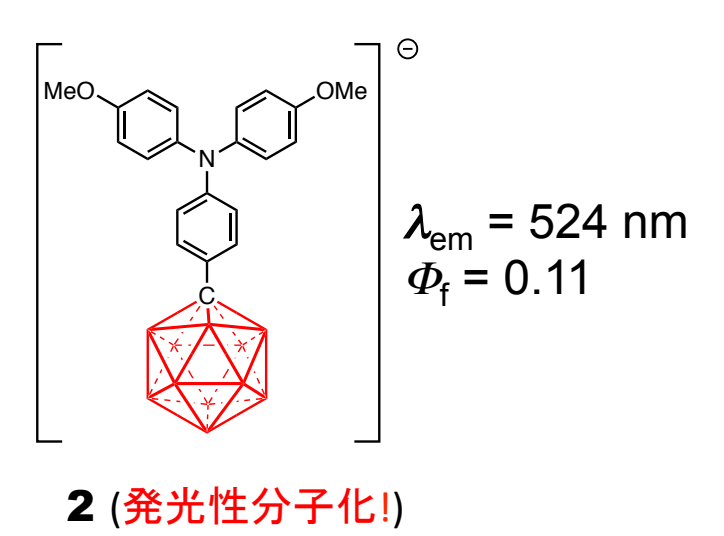
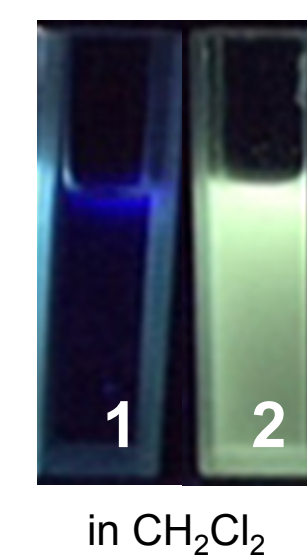
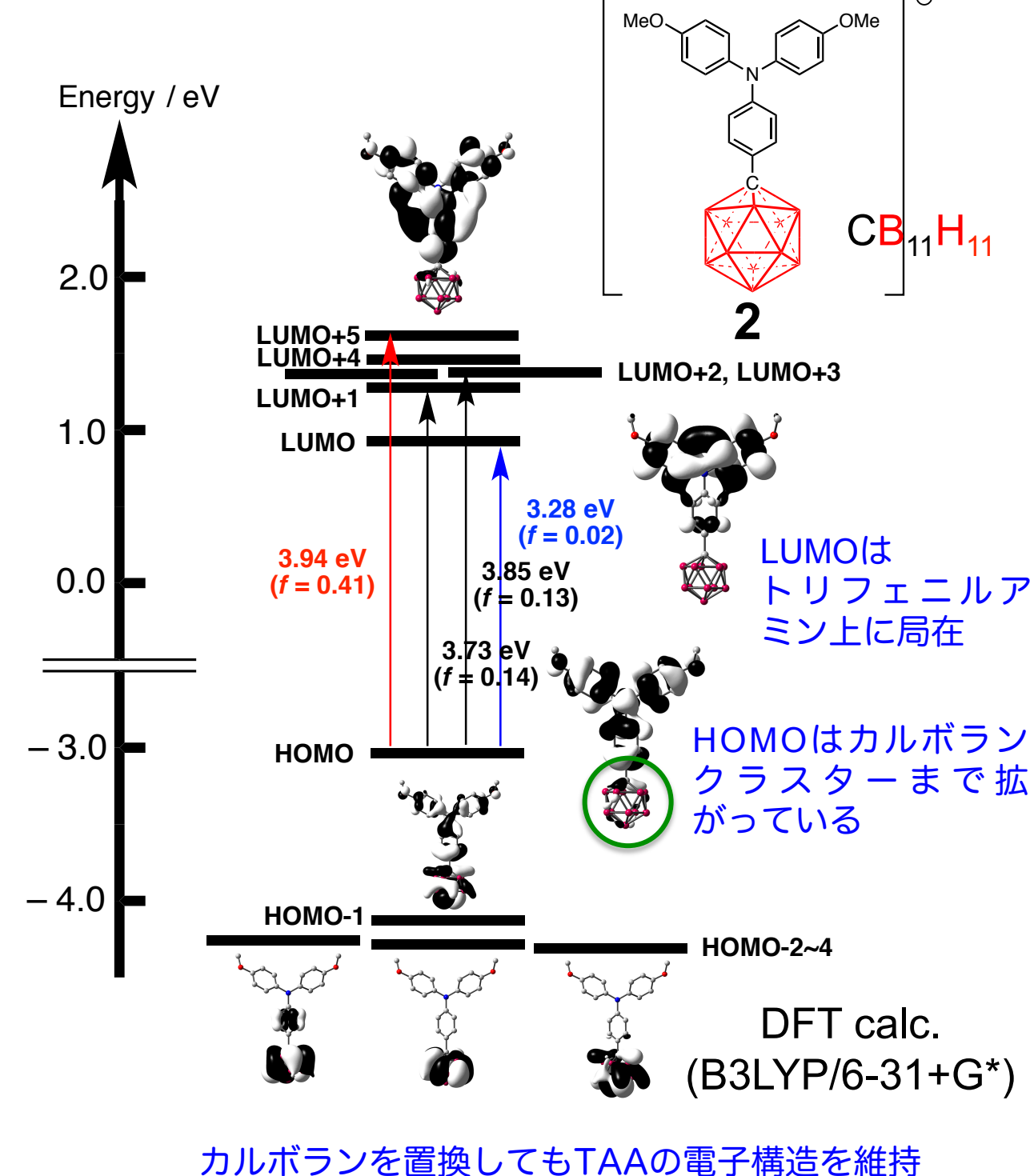
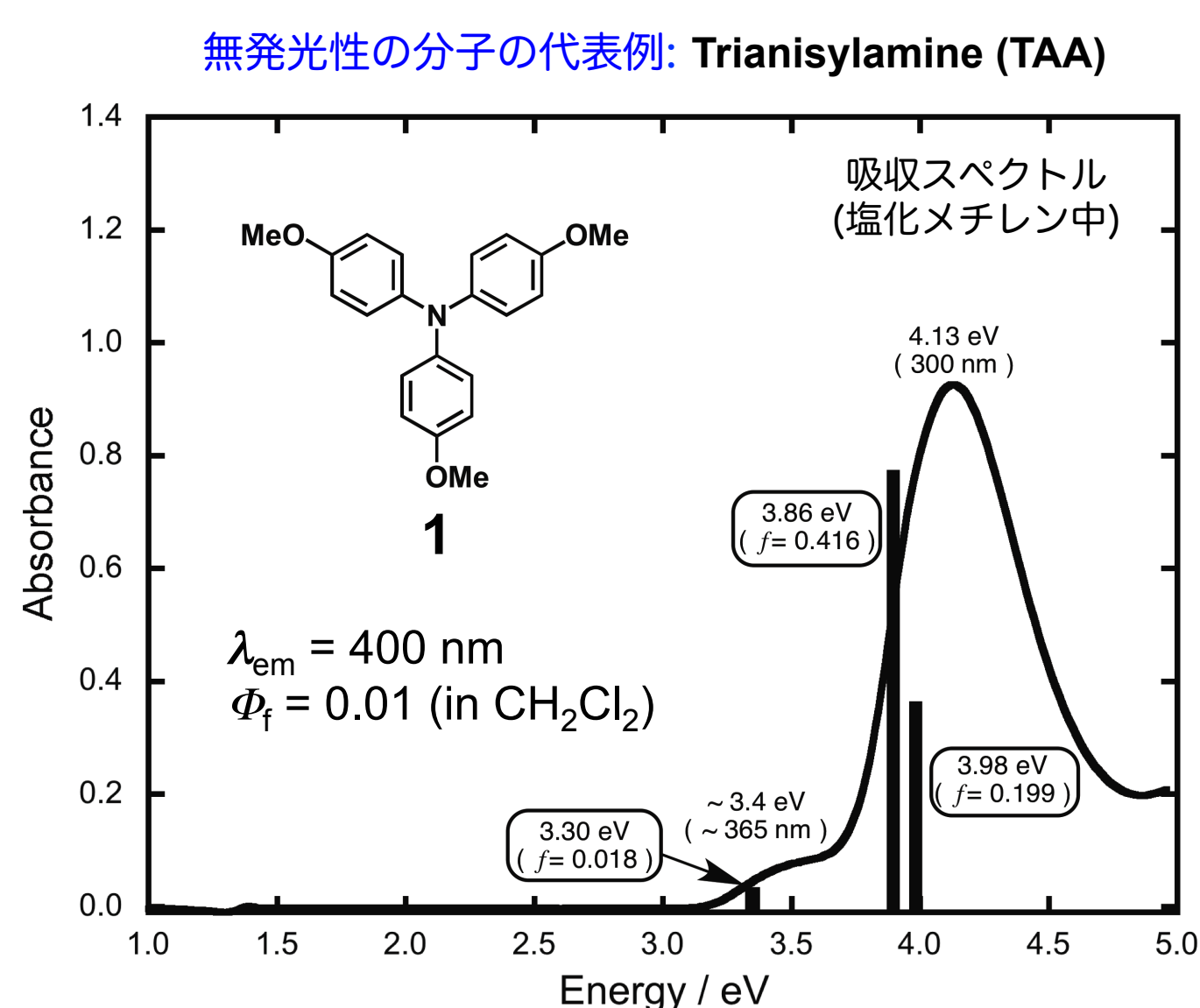


蛍光発光する炭素ナノ粒子



銅内包カーボンナノチューブ

研究例: 光らない分子ユニット同士からの発光分子化



① 無輻射遷移を抑制する分子設計指針を得た。

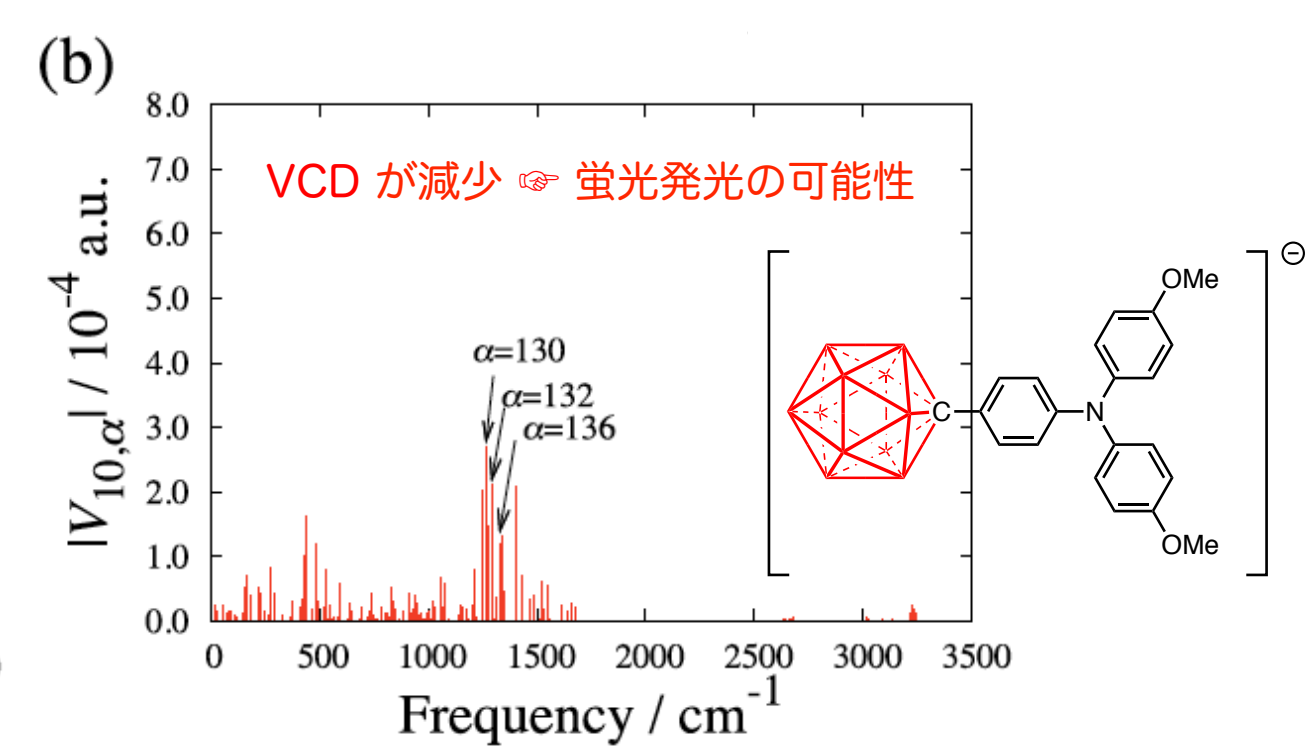
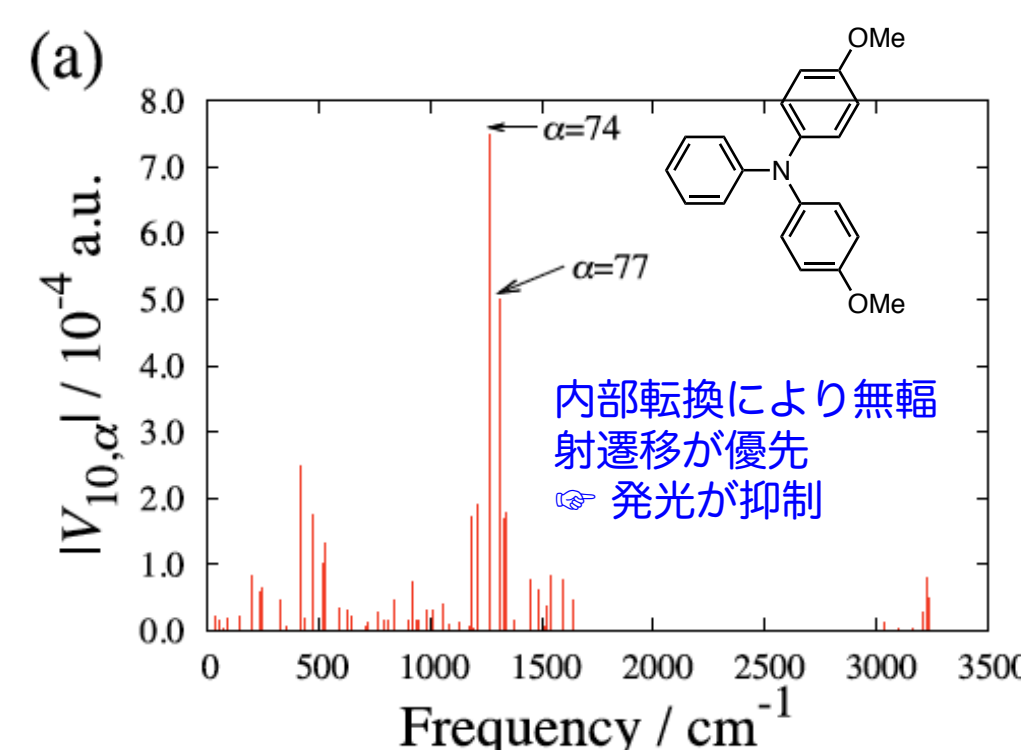
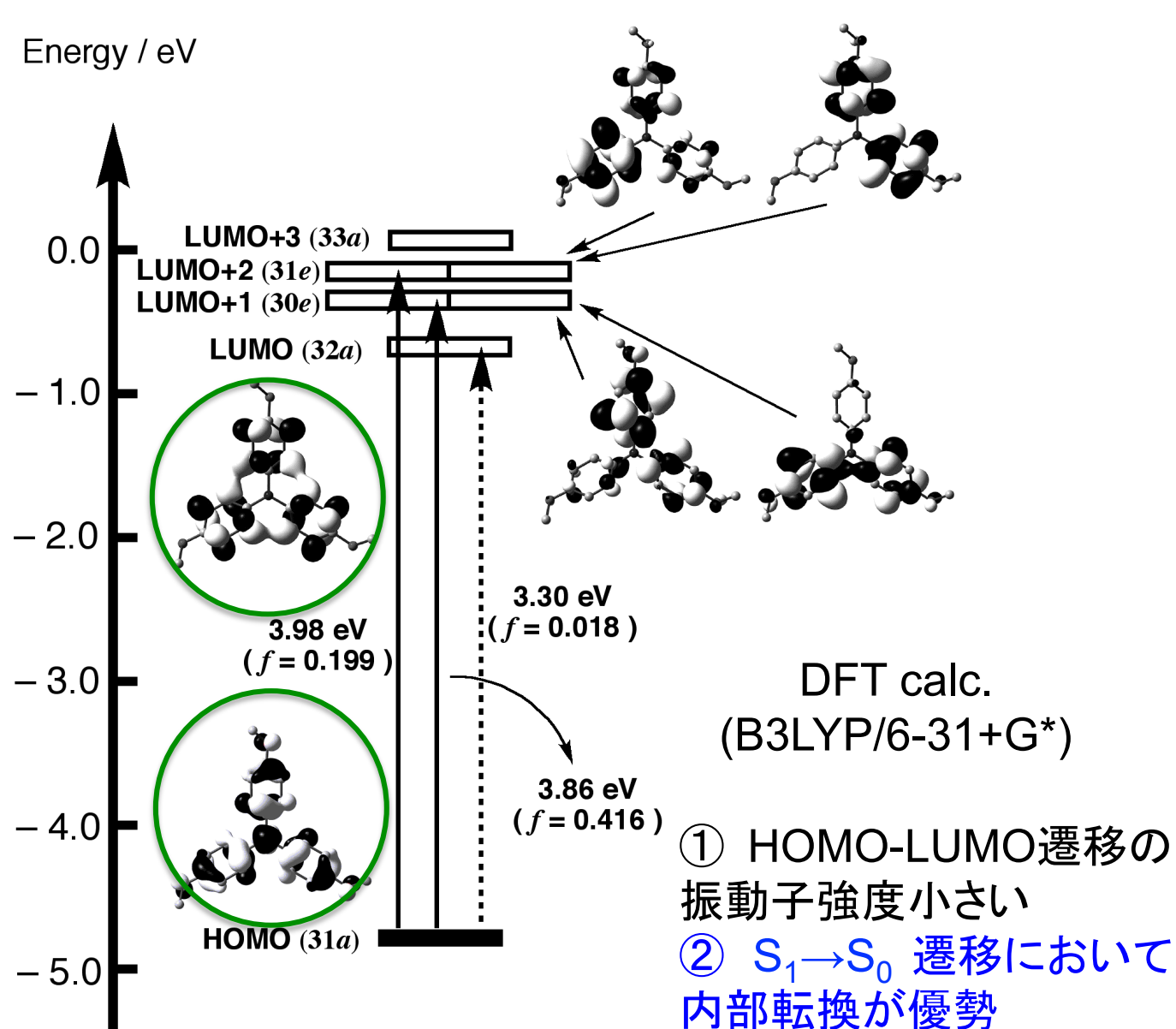
(設計指針)

発光の励起状態が1組の分子軌道間(通常HOMOとLUMO)の光励起から生じる場合、

2つの分子軌道のうち1つが分子全体に非局在化し、もう1つでは発光分子部位に局在するようにできれば、

非対角振電相互作用定数(内部転換の速度定数と関係)が減少する。これにより無輻射遷移が抑制される。

② ①の指針に従って、無発光性分子に発光特性を付与する実例として、トリフェニルアミンのフェニル基末端にカルボランを導入した系を紹介した。



各振動モードに対して計算された振電相互作用密度(VCD) ((TD-)B3LYP/6-31+G*)