

表面設計化学研究室

金ナノ粒子修飾酸化チタン光アノード特性に対するクロム種の修飾効果

最近、プラズモニック光触媒Au/TiO₂を水酸化クロム (Cr(OH)₃) で修飾することにより可視光照射下における水の酸化活性が向上することを見いだしました。本研究では、その機能を光電気化学的手法によって探求しました。可視光照射下における光電流量はCr(OH)₃修飾により約1.4倍となりました。このことから、Cr(OH)₃が励起電子と正孔を空間的に分離する正孔移動触媒として機能していることを明らかにしました。

有機構造化学研究室

凝集誘起円偏光発光 (AIEnh-CPL) を指向した新しい機能性ペリレン色素の開発

ペリレンジイミド化合物のベイ位置に、水素結合形成ユニットであるアミド結合を持つ置換基を導入した新しい光学活性ペリレンジイミド発光体を合成しました。合成したペリレンジイミド発光体をPMMA-filmにドーブしたところ、強く発光するAIEnh(凝集誘起増強)発光の発現に成功しました。さらに、温度に応じてゾル状態とゲル状態のスイッチングが観測され、新しい機能の発現にも成功しました。

ナノ機能分子化学研究室

カルコゲン原子を含む新奇な機能性有機分子の創製

カルコゲン原子を含む新奇なシクロファン化合物を合成しました。得られたシクロファン化合物はレドックス反応に基づく可逆なコンフォメーション変化を示し、新たな分子アクチュエーターとなることを確認しました。キラルな分子アクチュエーターを用いることで、光照射のみで生成可能なキラル金属ナノ粒子複合体の合成法も開発しました。さらに、発光特性を有する剛直なキラル有機カルコゲン化合物を合成し、その光学特性の調査を行いました。

固体材料化学研究室

計算機シミュレーションによる固体材料の物性解明と機能探索

ONIOM法を用いたDFT計算により有機蛍光体の構造と電子状態を解明しました。周期境界条件モデルおよび埋込型クラスターモデルにより無機蛍光体の電子状態を解明し、吸収スペクトル予測を可能としました。金属クラスターによる表面増強ラマン散乱の発現機構を明らかにしました。金属-半導体接合界面モデルの可視光誘電特性を明らかにしました。ステープル化ペプチドの電子・光学物性及び熱力学特性を明らかにしました。