

課題名 (タイトル) :

気相中での光反応による有機物被覆ナノ粒子の作成

利用者氏名 : 工藤 聡

所属 : 社会知創生事業 イノベーション推進センター

産業界との融合的連携研究プログラム ナノ粒子測定技術研究チーム

1. 本課題の研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

ナノ粒子のサイズに起因する物性を触媒や光学素子に応用する研究が盛んにおこなわれているが、それらの物性はナノ粒子とナノ粒子が互いに接触することで容易に失われる。申請者は、ナノ粒子とナノ粒子が直接接しないようにするために、ナノ粒子を有機分子の光反応によってポリマー被覆する方法の開発研究をおこなっている。この開発研究において、有機分子の光反応性を予測する必要があるため、Gaussian09 を使用して分子軌道等を計算することで光反応性を予測することを検討した。

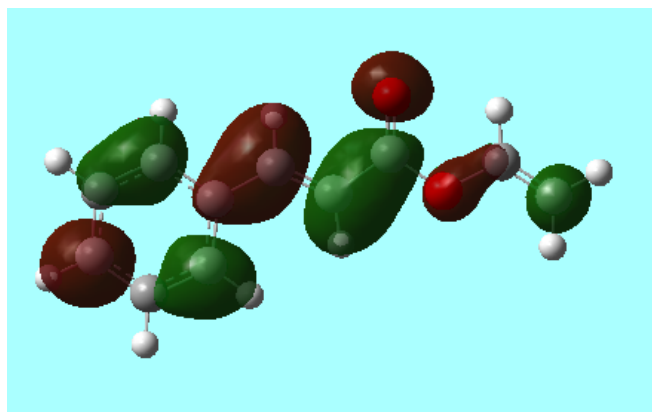


図 1 ケイ皮酸ビニルの最低非占有分子軌道

2. 具体的な利用内容、計算方法

Gaussian09 を利用して、ケイ皮酸ビニルの分子軌道および電子遷移のエネルギーと強度を計算した。また、この結果を GaussView5 を利用して表示した。

3. 結果

ケイ皮酸ビニルの最低励起一重項状態において、励起された電子が入る最低非占有分子軌道 (図 1) は、ビニル基の C=C、シナモイル基の C=C および C=O のすべてにおいて反結合性であることが分かった。

4. 利用研究成果が無かった場合の理由

現在までのところ、ケイ皮酸ビニルの光反応生成の構造の詳細は、実験的にはわかっていない。今回の計算結果によって、反応性が予測され、今後の指針が得られたものの、現段階では成果としては発表できるものではなかった。