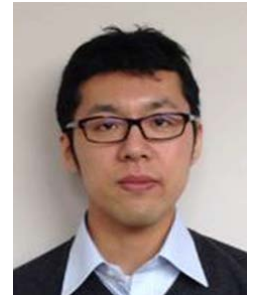


研究タイトル:

グラフェンナノフレークの開殻性と非線形光学物性に関する理論研究



氏名: 米田 京平 / YONEDA Kyohei E-mail: yoneda@chem.nara-k.ac.jp

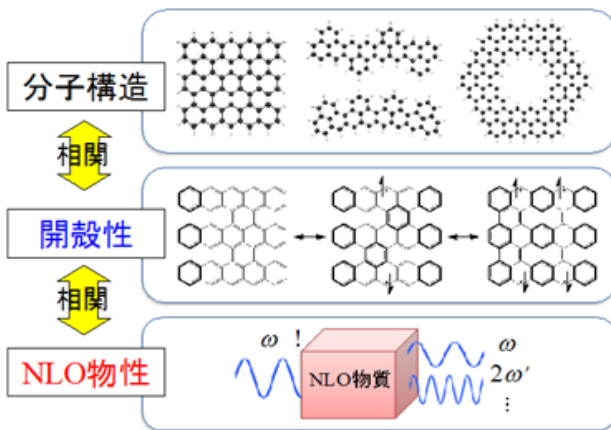
職名: 助教 学位: 博士(理学)

所属学会・協会: 日本化学会 分子科学会

キーワード: 開殻分子 非線形光学 グラフェン

技術相談  
提供可能技術: 種々の物質系における電子状態計算について  
開殻分子系の物性制御および分子設計について  
出前授業、セミナー等について

研究内容:



近年、特異な電気・磁気特性を示すグラフェンが新たな電子デバイス材料として実験理論両面から大きな注目を集めています。本研究室では有限サイズ分子であるグラフェンナノフレーク（GNF）に着目し、その特異な電子状態である「開殻性」について量子化学的アプローチに基づき理論先導型の研究を進めています。開殻性とは化学結合の弱さを示す理論的指標であり、分子における種々の物性量と顕著な相関を示すことから、機能性材料創出において重要な物性制御因子として期待されています。特に本研究室では将来のフォトニクス、光エレクトロニクスにおける重要な基礎物性である非線形光学（NLO）物性に注目し、GNFにおける構造-開殻性-NLO物性との相関を明らかにすることで、開殻GNFに基づく新規非線形光学物質の設計指針構築を目指しています。

提供可能な設備・機器:

名称・型番(メーカー)	
量子化学計算シミュレーション	