

課題名 (タイトル) :

ヤヌスジオン骨格を基盤とした新しいエネルギー変換材料

利用者氏名 : 江野澤 英穂

理研での所属研究室名 : 和光研究所 基幹研究所 グリーン未来物質創成研究領域

機能性ソフトマテリアル研究グループ エネルギー変換研究チーム

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

優れた n 型有機半導体材料 (電子不足な有機化合物) を開発することは、有機薄膜太陽電池やリチウムイオン二次電池などの次世代エネルギーデバイスの性能を底上げする上で非常に重要であるが、大気下での安定性などの観点から扱いが難しく、その開発が大幅に遅れている。そこで本研究では、n 型半導体材料として有望でありながら、これまでほとんど検討が行なわれていなかったヤヌスジオン骨格に着目した。本研究の目的は分子軌道計算を用いた理論予測によって、ヤヌスジオン骨格を基盤とした新しい機能性分子を設計することである。なお、本課題は理化学研究所の平成 23 年度研究奨励ファンドに採択された申請者の課題と連携するものである。

2. 具体的な利用内容、計算方法

RICC システムに実装されている Gaussian や Gauss View などのアプリケーションを用いて、申請者が独自に設計した新規化合物の構造を最適化し (構造最適化、振動解析等)、その電子構造を調べる (電子遷移予測等)。

3. 結果

ヤヌスジオン骨格に 2 つの 1,3-ジチオール環が連結した新規化合物を設計し、分子軌道計算により構造最適化を行なったところ、この化合物が有機薄膜太陽電池の活性層を担う材料として極めて有望な LUMO レベルを有すると理論的に予測された。

4. 今後の計画・展望

本課題において設計した分子を実際に合成してその構造と物性を実験的に評価し、分子軌道計算による理論的予測と比較する。その結果をフィードバックさせてさらに新しい分子を設計する。

5. RICC の継続利用を希望の場合は、これまで利用

した状況 (どの程度研究が進んだか、研究においてどこまで計算出来て、何が出来ていないか) や、継続して利用する際に行う具体的な内容

ヤヌスジオン骨格を基盤としたいくつかの新規化合物を設計し、その構造最適化および振動解析を行なった。TD DFT 計算による電子遷移予測に関しては現在検討中である。来年度も継続して RICC を利用し、新規化合物の設計と分子軌道計算に基づいた理論予測を行なう予定である。

6. 利用研究成果が無かった場合の理由

本課題の申請と利用開始の時期が遅く (2011 年の 12 月から)、年度内の計算に関する検討が不十分であったため。