

新規有機発光材料の開発

利用者氏名:

○井深 遼太郎(1)

(1)創発物性科学研究センター 情報変換ソフトマター研究ユニット

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

光触媒は産業的にも学術的にも大変注目されている分野で現在も新しい材料が盛んに開発されている。その中でもグラフィティックカーボンナイトライド(GCN)と呼ばれる炭素窒素からなるポリマーが、金属元素なしに光触媒能を示すとして注目を集めてきた。しかしながら、未だその詳細なメカニズムは解明されたとはいえない。というのも GCN は溶媒に不溶の粉末としてか得られず構造も未だ完璧に決まっていない材料であり、正確な構造・物性相関の議論が出来ないからである。我々は GCN の部分構造を有機合成的に作り上げ、構造がしっかりと決まった材料で物性を調べ GCN の光触媒能を解析するという研究を最近立ち上げた。合成した材料を実験的、計算科学的に解析していくことでより深く機構を理解することを目的とする。

2. 具体的な利用内容、計算方法

TD-DFT 法による最高被占軌道(HOMO), 最低空軌道(LUMO)の可視化、ならびに三重項励起状態、一重項励起状態のエネルギー準位差、振動子強度の計算

3. 結果

GCN は繰り返し構造がトリアジンからなるものとヘプタジンからなるものが知られている。さらに繰り返し構造単位を大きくすると、環状トリアジン3量体ならびに環状ヘプタジン3量体が考えられる。それぞれ、単量体、ならびに環状3量体のコンフォメーションの最適化を行った。興味深いことに環状3量体は平面構造をそのままでは取らず、中心にプロトンを置くことで初めて平面構造を取ることができた。実際の合成に際してもプロトンをすべて取るような塩基性条件下では環状3量体は得られず、酸性条件下でのみ環状3量体を得ることに成功した。プロトンが環化反応の鋳型になっていることを計算科学と実験結果より証明することに成功した。

また、現在それぞれの発光特性や HOMO-LUMO 軌道を調べ触媒能との相関を調べ始めている。

4. まとめ

GCN のモデル化合物であるトリアジン・ヘプタジン誘導体に関して興味深い知見を得ることに成功した。計算科学的に求めたコンフォメーションの知見から、合成条件の最適化にも成功した。

5. 今後の計画・展望

実験的に興味深い発光特性が観測されているため、その理解と、光触媒能に関する構造物性相関の議論を進めていく予定である。

6. 利用がなかった場合の理由