

プロジェクト名(タイトル):新規有機発光材料の開発

利用者氏名:○井深 遼太郎(1)

(1)理研における所属研究室名: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言えない。というのも GCN は溶媒に不溶の粉末としてし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

昨年度にスクリーニングをした材料の中から有望そうな物質群を合成し実験的実証に注力していた。しかしながら計算で有望な物質を合成できず証明に至っていない。そのため今年度はほとんど計算機を使用していない。

4. まとめ

計算スクリーニングの有用性はすでに感じているので今後活かしたい。ただ、もう少し合成のしやすさを考えたスクリーニングを行うべきだった。

5. 今後の計画・展望

分子の合成と計算結果の実証を目指す。

6. 利用がなかった場合の理由