

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

所属 : 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 24 年度研究奨励ファンドに採択された申請者の課題 (課題名 : HOMO-LUMO 間に大きな遷移確率を持つ新しい n 型半導体材料の開発、分野 : 化学、提案形態 : 発展型、研究形態 : 共同、研究代表者 : 江野澤 英穂) 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、ADF 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、電荷移動積分等)。

3. 結果

ヤヌスジオン骨格の両末端に様々なパイ電子共役系が連結した新規化合物を設計し、上記の計算を行なったところ、これら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 レベルと光学ギャップ、可視光吸収能などを有すると理論的に予測された。

4. まとめ

上記の計算から得られた理論的予測をもとに、実際に化合物を合成し、その構造と物性の評価を行なった。また、実際に有機薄膜太陽電池デバイスを作製して、その性能を評価した。その中で得られた成果をもとにして、現在 3 件の学会発表 (2013 年 3 月、4 月) を予定している。また、論文も作成中である。

5. 今後の計画・展望

実験的に得られた結果をフィードバックさせることでより新しい分子の設計を行なう予定である。新しく設計した分子の構造と電子状態を予測するために、来年度も RICC の継続利用を希望する。