

理論計算化学により「開殻性」を制御して 新規光機能性材料を設計する

< スタッフ > 中野 雅由 教授、北河 康隆 准教授、岸 亮平 助教

化学が取り扱う対象である物質は分子からできており、分子は複数の原子が結合により繋がったものです。すなわち分子からなる物質の性質や反応の理解への第一歩は「結合」の性質を明らかにすることです。実際の分子の結合の真の理解は量子論に基づいて行うことができます。

本研究室では化学結合を量子論に基づいて理解するための指標として「開殻性」（結合の弱さの程度を表す）という概念を用い、それに数理表現を与え、様々な分子の結合の性質を明らかにしています。さらにこの「開殻性」が分子の構造、反応、物性とどう関係しているのかを理論計算を用いて明らかにし、「開殻性」という統一見地から、新しい構造を持つ物質、新しい反応系、新しい機能物質の理論設計を行うという研究アプローチを取っています。特にこれまで未解明な「中間的な開殻性」を持つ分子系に着目し、従来にない特異な構造、反応性、物性を理論的に明らかにしています。このような系はわずかな外乱（電磁場や他の分子との相互作用）により鋭敏にその性質を変化させる特徴を持っており、工学的な面からも従来の系を凌駕する新機能材料や新反応システムの核となる物質として注目されています。

物質科学における理論の深化と新概念の創成

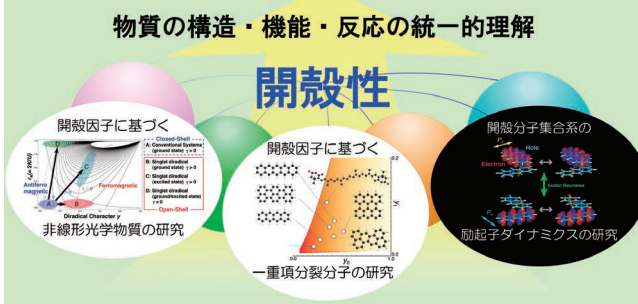


図1. 開殻性に基づく新規光機能性物質の理論設計

TOPICS1

最新研究トピックス

開殻分子系の非線形光学の理論と物質設計

将来のフォトニクス社会を支える基本物質である非線形光学（NLO）材料について、世界に先駆けて「開殻分子に基づく新規非線形光学物質の理論」を提案しました。この系は、従来の閉殻分子からなる NLO 系を遥かに凌駕する特性を示すことが理論的に示されました（*J. Phys. Chem. A* 2005, 109, 885; *Phys. Rev. Lett.* 2007, 99, 033001）。また、実験家とも協力し、「理論 - 合成 - 測定」の三位一体アプローチにより実在の開殻 NLO 物質の創成を目指して研究を行っています。最近、実験により、我々の設計指針が実証され「開殻系の非線形光学」の分野が拓かれました。

TOPICS2

最新研究トピックス

開殻因子に基づく一重項分裂（シングレットフィッション）の分子設計

一重項分裂は、光励起により生成された一つの一重項励起子が二つの三重項励起子へと分裂する過程です。原理的には一つの光子で二つの励起子を生成させることができるため、一重項分裂の発現は有機太陽電池の光電変換効率を向上させる新たな指針の一つとして注目を集めています。本研究室では、この一重項分裂のための条件を開殻性の観点から検討し、「開殻因子に基づく一重項分裂分子の設計指針」を構築しました（*J. Phys. Chem. Lett.*, 2012, 3, 145; 2013, 4, 2133）。これに基づき、新規な一重項分裂分子系の設計を行っています。

Nonlinear Optics

Intermediate Diradicaloids as Novel NLO Systems

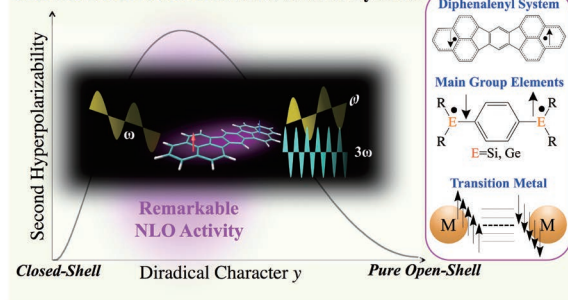


図2. 開殻因子に基づく非線形光学物質の理論設計

Singlet Fission

Ultrafast Generation of Triplet Exciton Pair in Weak/Intermediate Diradical Molecules

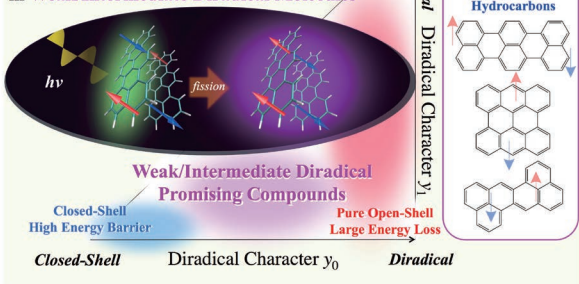


図3. 開殻因子に基づく一重項分裂分子の理論設計