

事後評価報告書

機関名：埼玉大学大学院

大学等研究者名：理工学研究科 准教授 坂本 章

課題名：有機機能材料の光励起状態における構造解析技術開発

1．目的

有機 EL 材料、有機太陽電池や有機色素材料などの有機電子デバイス・機能性材料の高性能化や耐久性向上には、その機能を発現する光励起状態における材料の分子構造を明らかにし、分子設計を行うことが重要である。本研究では、埼玉大学と富士フイルム(株)が有する時間分解振動分光技術や理論計算技術を融合させ、光励起状態分子の構造解析技術の構築を目的とした。そして、差別性のある機能性材料の実用化を目標とした。

2．成果の概要

フェムト秒チタンサファイア再生増幅器を用いて光パラメトリック増幅器 2 台を励起し、紫外領域から可視領域まで波長可変なポンプ光と、ブロードな赤外領域のプローブ光を発生させて、フェムト秒時間分解赤外マルチチャンネル分光システムを構築した。また、時間依存密度汎関数法(TD DFT 法)を用いて、トランス-スチルベンの電子励起 S_1 状態の分子構造と赤外、ラマン、蛍光励起スペクトルを計算したところ、いずれも実測スペクトルをよく再現し、電子励起状態分子の分子構造計算および振動解析において、TD DFT 法が、他の計算方法に比べて、現時点で利用できる計算リソースで電子相関をより適切に扱えることが明らかになった。これは、今後の電子励起状態分子の分子構造と振動スペクトルの解析に向けた重要な第一歩と考えている。今後、実用化研究への展開として、高効率な光重合開始剤や耐光性の良い紫外線吸収剤をターゲットに研究を継続する。

3．総合所見

企業研究者の活用により一定の成果が得られた。設定目標の一部は 1 年の期間ではやや高難度であったと思われる。引き続き企業研究者との共同研究が継続されることを期待したい。