

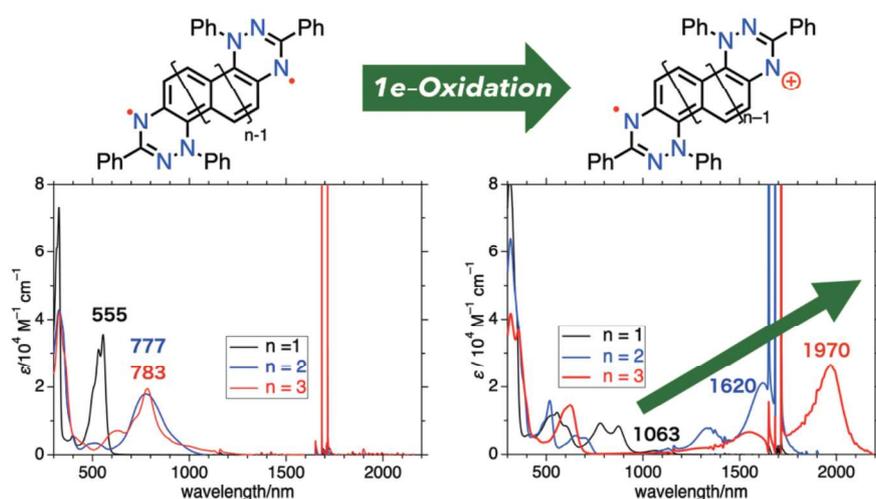
光・電気・磁気機能性有機分子の分子軌道計算

Theoretical calculation of photo-, electro-, and magneto-functional organic systems

京都大学大学院工学研究科 合成・生物化学専攻 松田 建児

研究成果概要

赤外吸収材料はエネルギー変換の観点から期待が持たれるほか、近赤外線の高い生体透過性からイメージングや光線力学療法に利用され、小さなバンドギャップに由来する高い導電性からエレクトロニクス領域においても有用な物質群である。これまでの有機赤外吸収色素設計は、広い HOMO-LUMO ギャップを持つユニットから始め、多数をつなげる( $\pi$  拡張する)ことでギャップの縮小を目指す手法が主流だったが、多数のユニットを連結するために合成や取り扱いの困難さが必然的な課題となっていた。この課題を克服するため、本研究では縮退した2つの SOMO の「弱い相互作用」からわずかな光学ギャップを生み出すボトムアップ的な手法により、超低エネルギー電子遷移を可能とする分子設計を提案した。京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムを利用して実際に設計した一連のモデル系の光学バンドギャップが交換相互作用と良い直線関係にあることを見出し、これを利用して分子量 600 に満たない小分子で 2200 nm と中赤外に迫る領域に強い ( $\epsilon > 4 \times 10^4 \text{ M}^{-1} \text{ cm}^{-1}$ ) 吸収帯を示す分子を設計できることをデモンストレーションした。



発表論文(謝辞あり)

H. Hamamoto, D. Shimizu, K. Matsuda, *Chem. Eur. J.* **2024**, *30*, e202401353.

T. Yamada, D. Shimizu, K. Matsuda, *J. Phys. Chem. Lett.* **2024**, *15*, 9175.

T. Aoki, H. Sotome, D. Shimizu, H. Miyasaka, K. Matsuda, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2025**, *64*, e202418655.

T. Shinozuka, D. Shimizu, K. Matsuda, *Chem. Lett.* **2024**, *53*, upae225.