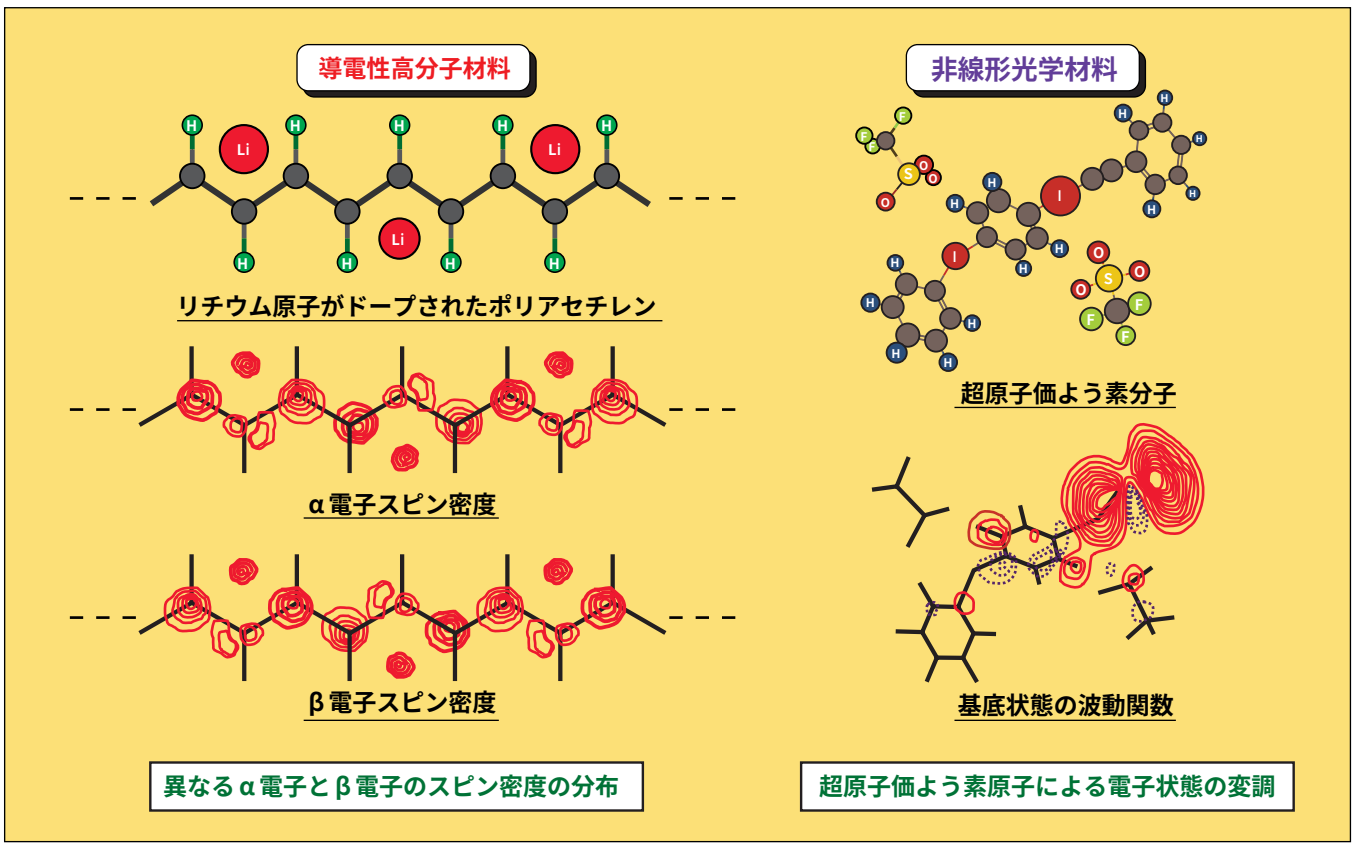
光・電子機能性材料の新しい電子モデルによる分子設計技術

信時英治*

要　旨

バンド理論(結晶軌道法)は，結晶や高分子の電子状態を計算する有力な手法であるが，電子の動特性(導電性)を明確に解析することができない。そこで，電子の動的挙動を明らかにすることを目的として，新しい電子モデルに基づいたバンド理論の構築を行った。この方法を高濃度にドープされた導電性高分子に適用した結果，従来法では説明できなかったパウリ常磁性を伴った金属的電子状態を再現するとともに，これが電子間反発的相互作用に基づくスピン密度波の発現に起因することを明らかにした。また，高い非線形光学特性と小さな光吸収特性を持つ非線形光学材料の創出を目的として，超原子価よう素分子の分子設計を行うとともに，新たに構築した解析手法を用いて超分極率発現起源を解析した。その結果，この分子は小さな光吸収特性下において大きな超分極率を発現し，これが超原子価よう素原子によるπ共役系電子構造の変調に起因することを明らかにした。さらに，実際にこの材料の評価を行った結果，高い非線形光学特性と小さな光吸収特性を実現できることを実験的にも実証することができた。

今後は，構築した分子設計技術を用いて，光・電子デバイス用機能性材料の開発効率化及び新規高機能性材料の創出を行っていく予定である。



導電性高分子材料と非線形光学材料の解析結果

三菱電機独自の分子設計技術によって，リチウム原子が高濃度にドープされたポリアセチレンはスピン密度波状態であり，これが新しい金属的状態を誘起することを明らかにした(左図)。また，超原子価よう素原子による電子状態の変調が高い非線形光学特性と小さな光吸収特性の両立に有効であることを実証した(右図)。

*先端技術総合研究所(工博)