

分子シミュレーションによる有用機能性分子の 機能発現機構の解明と応用

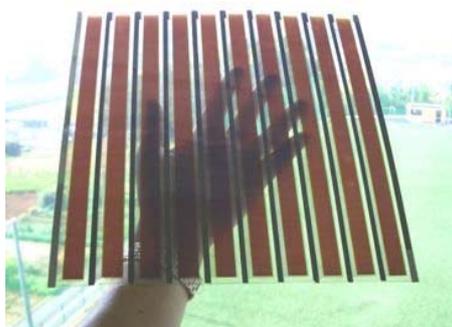
[背景・目的]

色素や触媒等の機能性材料や医薬品等の開発時には、原料の選抜や機能の検証に多くの人・物・金を費やしており、特に中小企業の現場においては、大きな負担になっています。一方、分子の働きを計算で予測する分子シミュレーション技術は、膨大な計算が必要なため学術的な研究に留まっていたましたが、近年のコンピュータの性能の向上や計算方法の改良により、中小企業でも利用できる環境になりました。そこで、県内中小企業が分子シミュレーション技術を活用することにより、製品開発力を強化できるよう、その有効性を検証しました。

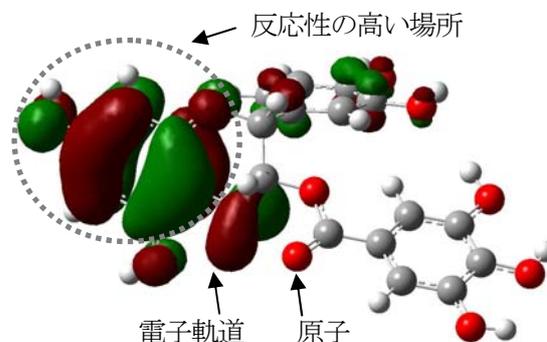
[研究成果]

本研究では、分子シミュレーション技術を活用して稀少金属を使用しない太陽電池用色素の設計と茶カテキン分子の効能の解明に取り組みました。

- ・次世代太陽電池として期待されている色素増感太陽電池(左図)の色素をコストダウンするため、稀少金属のルテニウム(Ru)に代わる中心金属の候補を計算した結果、鉄(Fe)が代替候補として有望であることが分かりました。
- ・茶カテキン分子の反応性を計算した結果、茶カテキン分子が効能を発揮する部位(右図)と反応性の強さを予測することができました。



色素増感太陽電池の例
(ペクセル・テクノロジーズ(株)社HPより)



計算した茶カテキン分子の電子軌道

[研究成果の普及・技術移転の計画]

太陽電池用色素については、鉄原子を中心金属とした色素を合成した後、太陽電池としての評価を行います。茶カテキン分子については、これまで不明であった様々な効能を発現する機構を解明し、カテキン関連製品のPR効果を通じて茶業の振興に寄与します。また、本研究で蓄積した分子シミュレーション技術のノウハウを活用し、製品開発力を強化しようとする本県中小企業の支援を行います。