

課題名 (タイトル) :

## 有機半導体高分子の電子状態計算

利用者氏名 : ○但馬 敬介・黄 建明

所属 : 創発物性科学研究センター・創発機能高分子研究チーム

1. 本課題の研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

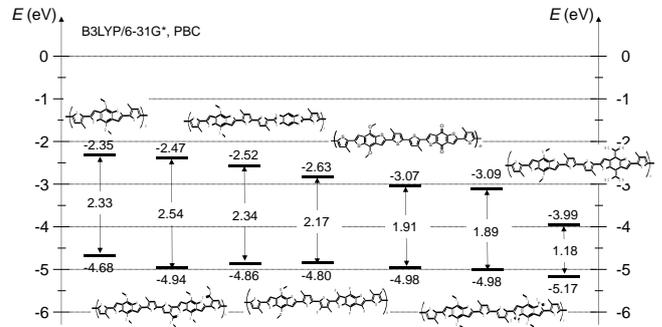
半導体ポリマーは、有機電界効果トランジスタや有機薄膜太陽電池への応用が期待されている。有機合成によって材料を開発する上で、基礎的な電子物性や、溶液・薄膜中での立体構造が重要な情報である。本プロジェクトでは、有機半導体ポリマーを用いた電子デバイス（有機薄膜太陽電池、有機トランジスタなど）の特性を向上させるため、有機合成による網羅的な材料開発に加えて、モノマーユニットの組み合わせによる電子状態の変化を予測しながら進めることを目的とした。Gaussian を始めとする量子化学計算パッケージを用いて、DFT などの計算方法によって短期間で合成と並行しながら分子軌道の形状・エネルギーや励起状態エネルギーなどの特性予測を行うことで、より効率的に材料探索を進めることができる。

2. 具体的な利用内容、計算方法

Gaussian09 計算パッケージを用いた、半導体分子の安定コンフォメーション、分子軌道、励起状態の計算を行った。

3. 結果

量子化学計算を用いて、様々なドナー／アクセプターユニットの組み合わせを持つ 30 種類程度の半導体ポリマーの安定コンフォメーションと、電子軌道のエネルギーを予測した。計算には Periodic Boundary Condition を用いた。その結果、下図に示すような一連の高分子について、有機太陽電池への応用に適したエネルギーレベルを持つ化合物を選定することができた。



4. まとめ

量子化学計算と有機合成を組み合わせることで、太陽電池に応用可能な有機半導体材料の効率的な探索が可能となった。

5. 今後の計画・展望

現在、計算によって有望と考えられた物質についての合成を進めており、計算と実験によって得られた物性（イオン化ポテンシャル、吸収スペクトル等）との一致について検討をすすめる。