

課題名 (タイトル) :

新規有機半導体材料の開発

利用者氏名 : ○中野正浩、WANG Chengyuan、瀧宮和男

理研での所属研究室名 : 創発物性科学研究センター(CEMS) 創発分子機能研究グループ

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

近年、軽量・柔軟・印刷による作製が可能であるなどの特徴を持つ有機半導体デバイスが注目されている。有機半導体デバイスの性能を向上させるためには、適切に設計された有機半導体分子を開発し、デバイスへ応用することが重要である。本課題では新規高性能有機半導体材料の開発を目的とし、様々な有機分子の合成を行った。

2. 具体的な利用内容、計算方法

分子軌道計算によって、標的とする有機半導体分子の設計およびスクリーニングを行った。具体的には、Gaussian 09 プログラムパッケージを用い、密度汎関数法により有機半導体分子のフロンティア軌道レベル、分子軌道、最安定構造に関する計算を行った。また、ADF プログラムを用い、半導体分子間のトランスファー積分についての計算も行った。

3. 結果

(1) 電子受容性の高い NTI (ナフトチオフェンジイミド) 骨格を基盤として、有機薄膜太陽電池向けの電子アクセプター材料の合成を行った。合成した NTI 誘導体は、量子化学計算の結果とよく一致したフロンティア軌道エネルギーレベルを持ち、その値に応じた光電変換特性 (開放電圧) を示した。

(2) p 型半導体材料として優れた分子骨格である BDT (ベンゾジチオフェン) をベースとした有機半導体を種々合成した。合成した BDT 誘導体の分子軌道計算を行い、実験値と比較することで電子構造についての考察を行った。また、単結晶デバイス中の分子パッキング構造を用いて、トランスファー積分を

計算し、デバイス特性との比較を行った。

4. まとめ

本研究では、様々な半導体材料の開発を行ったが、量子科学計算に基づく計算結果 (フロンティア軌道レベル、再配向エネルギーなど) は物性の予測・分子設計を行うにあたって非常に有用であった。

5. 今後の計画・展望

今回得られた分子設計に関する知見を用いて、より有用な有機半導体材料の開発を行う。

平成 29 年度 利用研究成果リスト

【論文、学会報告・雑誌などの論文発表】

1. Bis(naphthothiophene diimide)indacenodithiophenes as Acceptors for Organic Photovoltaics, J. Hamonnet, M. Nakano, K. Nakano, H. Sugino, K. Takimiya, K. Tajima, *Chem. Mater.*, 29, 9618-9622 (2017).
2. Methylthionated benzo[1,2-*b*:4,5-*b'*]dithiophenes: a model study to control packing structures and molecular orientation in thienoacene-based organic semiconductors, C. Wang, H. Nakamura, H. Sugino, K. Takimiya, *Chem. Commun.*, 53, 9594-9597 (2017).
3. Thiacycle-fused benzo[1,2-*b*:4,5-*b'*]dithiophenes (BDTs): synthesis, packing, molecular orientation and semiconducting properties, C. Wang, H. Nakamura, H. Sugino, K. Takimiya, *J. Mater. Chem. C*, (2018), accepted.