

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・王 凡集・代 水星・王 威智・大野 玲

理研における所属研究室名: 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

有機半導体は、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・薄膜中での高次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や、電子状態測定に加えて、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ている。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。また、材料中の構造を MD 計算によって予測することで、通常の実験では解析が困難な材料中の構造に関する情報を得ることができると期待される。

2. 具体的な利用内容、計算方法

Gaussian16 計算パッケージを用いて、合成した半導体分子の安定コンフォメーション、分子軌道、ラジカルカチオン・アニオン状態、電荷移動励起(CT)状態などの計算を行った。また、GROMACS を用いた MD 計算によって、有機半導体薄膜の結晶構造の再現を試みた後、薄膜表面の構造が結晶構造に及ぼす影響についても引き続き検討した。

3. 結果

いくつかの π 共役系分子について、分子軌道のエネルギーと励起エネルギーの計算を行い、合成した材料の電子的・光学的特性と合わせて検討した。とくに、ペリレノチオフェンジミド骨格の2つの異性体について、計算と実験から電子的特性の違いについて検討を行った。また、当研究チームで新たに開発中の表面偏析単分子膜用の分子について、安定コンフォメーションを計算し、分子デザインに活用した。今後、分子を実際に合成して表面偏析挙動と、薄膜中の結晶化に及ぼす影響を調べる予定である。

4. まとめ

実験・計算両面からの研究により、新たな機能性 π 共役分子の設計につなげることができた。

5. 今後の計画・展望

表面偏析分子の合成と特性検討が終わった後、計算結果と合わせてまとめる予定である。また、すでに解析している π 共役ポリマー薄膜の構造について、MD 計算による π 共役分子のパッキング構造の再現に関して検討を行っており、結果によっては論文発表する予定である。

2019年度 利用研究成果リスト

【雑誌に受理された論文】

1. Nakano M.; Nakano K.; Takimiya K.; Tajima K.; Two Isomeric Perylenothiophene Diimides: Physicochemical Properties and Applications in Organic Semiconducting Devices, *J. Mater. Chem. C*, **2019**, *7*, 2267-2275.