

## 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・Chen Fengkun・王 威智・梁 逸偉・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。

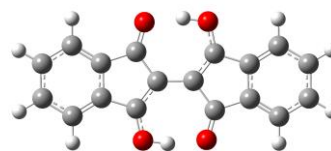
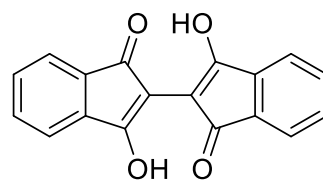
## 2. 具体的な利用内容、計算方法

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。

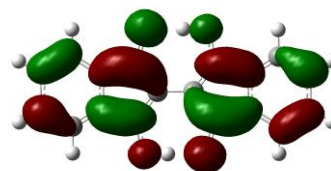
## 3. 結果

いくつかの  $\pi$  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、実際に合成した材料の電子的・光学的特性と合わせて検討した。特に、下図に示す BIT を基本骨格として持つ一連の分子について、互変異生体を含めた構造について計算と実験から安定性や電子的特性の違いについて検討を行った。

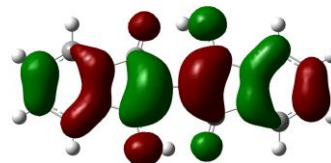
また、MD 計算については、非晶性化合物 TPBi を用いて薄膜中の構造異方性についての初期的な検討を行った。予想通り、初期構造の影響が大きく、それをいかに取り除くかが今後の検討課題となった。



76 (LUMO): -2.46 eV



75 (HOMO): -5.22 eV



Eg: 2.76 eV

## 4. まとめ

実験・計算両面からの研究により、新たな機能性  $\pi$  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

BIT 分子については、誘導体の合成と電氣的な特性の評価を進めており、計算結果と合わせて近く論文として報告する予定である。有機半導体ポリマーの MD 計算については、引き続き方法も含めて検討を進める。