

課題名 (タイトル) : 新規有機半導体材料の開発

利用者氏名 : ○澤本尚典、柴山直之、Kirill Bulgarevichs、Wang Yang、瀧宮和男、川畑公輔、新見一樹、岩田智史、前田健太郎、金澤輝石、今井太一、堀内信吾

理研における所属研究室名 : 創発物性科学研究センター 創発分子機能研究チーム

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

実際に有機合成する前に、分子の電子物性や最適化構造などを量子化学計算で予想する事は、有機半導体材料の開発に対して非常に効果的であると広く認識されている。また、デバイスに応用して得られた結果を説明する上でも計算結果は重要である。

有機半導体の中でも、有機トランジスタ材料や有機熱電材料ではキャリア移動度が重要な物性パラメータであり、キャリアパスを形成する分子軌道や構造情報が有益である。一方、有機太陽電池では電子エネルギー準位や光吸収スペクトルが重要であり、電子物性情報が計算され分子設計に利用されている。

本課題では新規有機半導体材料の開発を目的として、様々な有機半導体材料の量子化学計算を行った。

2. 具体的な利用内容、計算方法

Gaussian 16 プログラムパッケージを用い、DFT 計算により有機半導体分子の最安定構造、フロンティア軌道のエネルギー準位と軌道分布等を計算した。また、TD-DFT 計算により光吸収スペクトルや再配向エネルギー等を計算した。GaussView 6 を用いて、計算された分子軌道や吸収スペクトルの形状を確認した。さらに、分子間の軌道の重なりは ADF プログラムを、結晶中で働く分子間相互作用エネルギーは Psi4 プログラムを用いて定量的に評価した。

3. 結果

独自に開発したナフトジチオフェン (NDTI) と呼ばれる有機半導体骨格を用いて、3つの新しい n 型半導体高分子材料 pNB, pNB-Tz, pNB-TzDP を合成した。これらの材料の熱電特性を実験的に評価したところ、図 1 に示すように Tz 骨格がスペーサーとして導入され直線的な構造が再安定である pNB-Tz や pNB-TzDP が良い熱電特性を示した。中でも側鎖の分岐位置を NDTI 骨格から離れた pNB-TzDP が高い電気伝導率とゼーベック係数を示し、熱電変換特性の指標であるパワーファクターは 53 uW/mK^2 に達した。

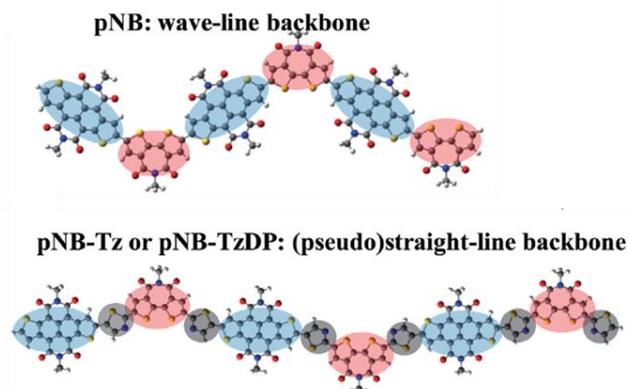


図 1. DFT 計算で得られた高分子 (3 ユニット) の最適化構造

4. まとめ

本課題では様々な有機半導体材料の開発を行っているが、効率的な材料探索や得られた実験結果を説明するときに量子化学計算は強力なツールとして活用できた。

5. 今後の計画・展望

その他の有機半導体 (トランジスタ材料や太陽電池材料など) や計算内容 (電子エネルギー準位や光吸収スペクトルなど) に関しても、実験と計算を継続している。高性能な新規有機半導体材料の開発を目指し、結果によっては論文発表する予定である。

2020年度 利用研究成果リスト

【雑誌に受理された論文】

1. Y. Wang, K. Takimiya
Naphthodithiophenediimide-Bithiopheneimide Copolymers for High-Performance n-Type Organic Thermoelectrics: Significant Impact of Backbone Orientation on Conductivity and Thermoelectric Performance
Adv. Mater., **2020**, *32*, 2002060. (DOI: 10.1002/adma.202002060)
2. C. Wang, M. Abbas, G. Wantz, K. Kawabata, K. Takimiya
“Heavy-atom Effects” in the Parent [1]Benzochalcogenopheno[3,2-b][1]benzochalcogenophene System
J. Mater. Chem. C, **2020**, *8*, 15119. (DOI: 10.1039/d0tc01408g)

【その他（著書、プレスリリースなど）】

1. 理研プレスリリース（2020年6月22日）
「高性能な高分子熱電変換材料を開発—新しいn型高分子半導体と分子配向制御により熱電特性が向上—」
Wang Yang, 瀧宮 和男
https://www.riken.jp/press/2020/20200622_1/