

2020 年度 利用報告書

自発分極を有する有機半導体材料の開発

利用者氏名:

○宮島 大吾(1)、Cheng Zhang(1)、Dan He(1)

(1)創発物性科学研究センター 情報変換ソフトマター研究ユニット

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 Shift-current 太陽電池と呼ばれる、自発分極を有した単一半導体に光を照射することで太陽電池効果が得られることが実証され、理論的にも証明されつつある。理論的にドナー・アクセプター系を凌駕出来る可能性が示唆されているが、そもそも自発分極を有した半導体材料の例が少なく研究が進んでいない。我々は自発分極を有した半導体を開発し、Shift-current 型太陽電池の可能性を探求している。そのための分子設計として、有機材料のコンフォメーション、HOMO-LUMO 準位などを理論計算でスクリーニングすることで、見込みの少ない分子合成に掛かる時間を節約する。

2. 具体的な利用内容、計算方法

Gaussian を用いた TD-DFT 法による分子コンフォメーションの最適化並びに HOMO-LUMO 準位の計算

3. 結果

Subphthalocyanine (サブフタロシアニン)と呼ばれるお椀状分子を用い極性結晶の合成に成功した。計算によって求めた HOMO-LUMO 準位より、適切な電極を選択し Shift-current の観測に成功した。一方、計算で見積もった殆どのサブフタロシアニンは極性構造を形成せず、Shift-current も観測できなかった。

4. まとめ

理論計算により分子のエネルギー準位を見積もることで Shift current 測定に適切な電極の選択ができた。現在論文をまとめている。

5. 今後の計画・展望

現在分子の最安定コンフォメーションの予測や HOMO-LUMO 準位の見積もりなど簡易的な計算しかできていない。文献を調べると分子と結晶構造の予測に関して

も報告されており、今後はそれらの技術を取り入れて研究を加速したい。

6. 利用がなかった場合の理由