

プロジェクト名(タイトル): 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)

(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

計算によるスクリーニングで絞り込みをかけた分子群のなかから、実際の合成を行い結晶化検討を行なった結果、Pb(II)を配位した非平面フタロシアニンならびに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。また実際に Shift current 発生も確認することが出来た。複数の結晶で Shift current を観測出来たため、なぜこの分子結晶でより大きな Shift current が生じるのか、励起状態を計算し比較することで現在考察を行なっている。

4. まとめ

計算によるスクリーニングならびに物性を評価することで、Shift current を生じる結晶を得ることに成功した。Shift current をより多く発生するための分子設計に関しても徐々に知見があつまりつつある。現在論文を鋭意作成中である。

5. 今後の計画・展望

これまである程度類似した分子群に特化し計算・スクリーニングを行なってきた。今後はさらに異なる分子種の検討を

行なっていく予定である。また励起状態の計算は実測値との乖離が大きい。計算手法を工夫してより精度良く物性を見積もれるようにする。

6. 利用がなかった場合の理由