

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)理研における所属研究室名: (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

今年度は新たに Heptazine と呼ばれる分子骨格を中心にスクリーニングを行った。有望そうな分子を合成し評価した。

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。実験結果を積み上げていくと、徐々にエキシトンとシフトカレントの相関があることに気がついた。この辺りに踏み込んだ結果を現在論文にまとめている。

5. 今後の計画・展望

計算に関してかなりスムーズに利用できるようになってきた。より多く活用し、多数の分子をスクリーニングし有望な分子を発見したい

6. 利用がなかった場合の理由