

課題名(タイトル): **Electronic state calculations on organic semiconducting polymers**

利用者氏名: ○但馬 敬介・斎藤 仁志・横山 高穂・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、関係する課題との関係

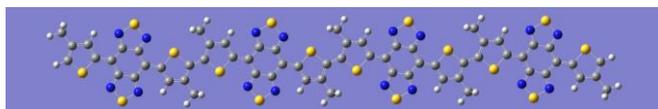
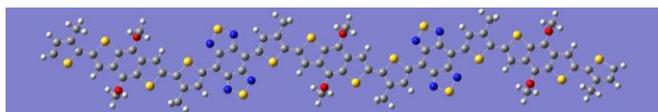
有機半導体は、有機電界効果トランジスタや有機薄膜太陽電池への応用が期待されている。有機合成による材料開発において、基礎的な電子物性や溶液・薄膜中での高次構造の理解は不可欠である。本プロジェクトでは、有機半導体ポリマーを用いた電子デバイス(有機薄膜太陽電池、有機トランジスタなど)の特性向上を目的とし、有機合成による材料開発に加え、電子状態測定およびモノマーユニットの組み合わせによる電子状態の変化を予測しながら研究を進めている。Gaussian をはじめとする量子化学計算パッケージを用いて、DFT などの計算手法を活用し、合成と並行して分子軌道の形状・エネルギーや励起状態エネルギーの特性予測を行うことで、より効率的な材料探索を可能とする。また、MD 計算を用いた材料中の構造予測により、従来の分析では困難な構造情報の取得が期待される。

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、設計・合成した半導体分子の安定コンフォメーション、ポテンシャルエネルギー曲面、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)状態などの計算を実施した。

3. 結果

基底状態で開殻の三重項構造を安定に持つ材料の探索を目的とし、狭バンドギャップが期待できる半導体高分子の構造スクリーニングを量子化学計算により実施した。その結果、以下に示す特定の構造において $E_g < 0.5$ eV および三重項状態の安定化が確認された。



4. まとめ

量子化学計算を活用し、スピントロニクス応用に有望な半導体高分子構造のスクリーニングを実施した。

5. 今後の計画・展望

今後、実際に高分子を合成し、その特性について詳細な検討を行う予定である。