

課題名 (タイトル) :

## 有機半導体高分子の電子状態計算

利用者氏名 : ○但馬 敬介, 赤池 幸紀, 伊澤 誠一郎, 樋口 荘祐, 黄 建明, 大西 いのり

所属 : 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. 半導体ポリマーは、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。有機合成によって材料を開発する上で、基礎的な電子物性や、溶液・薄膜中での立体構造が重要な情報である。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）の特性を向上させるため、有機合成による網羅的な材料開発に加えて、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進めることを目的とした。Gaussian を始めとする量子化学計算パッケージを用いて、DFT などの計算方法によって短期間で合成と並行しながら分子軌道の形状・エネルギーや励起状態エネルギーなどの特性予測を行うことで、より効率的に材料探索を進めることができる。

## 2. 具体的な利用内容、計算方法

Gaussian09 計算パッケージを用いた、半導体分子の安定コンフォメーション、分子軌道、励起状態の計算。

## 3. 結果

量子化学計算を用いて、平板状の  $\pi$  共役分子であるペリレンジイミド及びその誘導体を含むポリマーの安定コンフォメーションを予測した。計算にはモデルとして 2 量体の構造を用いた。その結果、 $\pi$  共役平面の大きさに応じて安定な構造が変化し、モデルの幾つかについては安定な折りたたみ構造を取ることが予測された。

当研究チームではポリマー末端にフッ素化アルキル基を有するポリチオフェンについて、薄膜中での表面偏析現象を報告している。フッ素化アルキル基がポリチオフェン部分の電子状態にどのような影響を与えるかについて、DFT 計算によって検討した。その結果、チオフェン環の数が 10 程度にまで大きくなった場合は、フッ素化アルキル基が電子状態に与える影響は小さいことがわかった。これは、実験で吸収スペクトルが変化していないこととよく対応している。

また、半導体ポリマーのコンフォメーションを予測し、高移動度を有する半導体への応用に最適な分子設計を探索するため、30 程度の構造について構造最適化と電子状態計算を行った。その内の幾つかについては実際に合成を行い、現在物性の評価を行っている。

## 4. まとめ

量子化学計算と有機合成を組み合わせることで、効率的な材料探索が可能となった。

## 5. 今後の計画・展望

引き続き電子物性予測と実際に合成された材料の比較を進めることで、半定量的な性能予測についてより正確な知見が得られるものと期待できる。