

TSUBAME 共同利用 平成 29 年度 学術利用 成果報告書

利用課題名 有機分子集合体の半導体特性・光応答特性の解明

英文: Elucidation of semiconducting and photo response properties of organic molecular assemblies

河東田 道夫
Michio Katouda

国立研究開発法人理化学研究所 計算科学研究機構
RIKEN Advanced Institute for Computational Science
https://researchmap.jp/michio_katouda/

有機分子集合体を対象に、半導体特性や光応答特性の発現機構を第一原理電子状態計算や古典分子動力学シミュレーションなどの大規模計算化学シミュレーションにより解明する。研究対象として、従来型の有機半導体や有機発光材料だけでなく、外力などの外部刺激に応答して発現および変化する動的な半導体特性やメカノクロミック発光特性を示す分子を対象に、圧力に誘起されて発現するこれらの電子機能の発現機構を解明する。さらに、仮想的な計算機実験を実施し、新奇有機分子材料の理論的分子設計、外力などの外部刺激に寄る動的な半導体特性や光応答特性の制御方法の提案も試みる。

The object of this project is to elucidate mechanisms of hole and electron transport and photoluminescence processes in organic molecular assemblies responded to the external stimulus such as pressure, rubbing, light, and heat. In this project, we use TSUBAME for large-scale massively parallel electronic structure calculations of organic molecular assemblies.

Keywords: 有機半導体、有機発光材料、有機太陽電池、第一原理電子状態計算、分子動力学シミュレーション

背景と目的

近年、材料作成コストの低さ、材料の軽量性と加工性より、有機エレクトロニクス材料研究に関心が持たれている。特に、有機太陽電池、有機発光材料、有機半導体は次世代エネルギー・電子デバイス材料として精力的に研究開発が進められている。

これらの有機エレクトロニクス材料は、光や電場を加えた際の励起子の生成、励起子の電荷分離、ホール・電子移動が材料の性能に大きく影響するが、マクロな材料中の高速かつ微視的な物理的機構を伴うため、物理化学的測定による材料の動作機構の理解は難しく、詳細な物理的動作機構は未解明な材料も多い。そのため、計算物理、計算化学を活用し、材料の物理的動作メカニズム解明や材料設計・探索を微視的・直接的に検討する研究アプローチが強く求められている。

本研究課題では、有機分子集合体を対象に、半導体特性や光応答特性の発現機構を第一原理電子状態計算や古典分子動力学シミュレーションなどの大規模計算化学シミュレーションにより解明することが目的である。

概要

本研究では、従来型の有機半導体や有機発光材料だけでなく、外力などの外部刺激に応答して発現および変化する動的な半導体特性やメカノクロミック発光特性を示す分子を対象に、圧力に誘起されて発現するこれらの電子機能の発現機構を第一原理電子状態計算により解明するために研究計画を策定し共同利用を申請した。

申請が採択された後、実験担当の共同研究者と相談し、TSUBAME を用いた計算を行うための結晶構造モデルを作成し、第一原理電子状態計算プログラム Quantum Espresso を用いた計算を行うための入力ファイルを作成し、計算の実施準備を行った。

結果および考察

本務との兼ねいで課題を実施する時間が確保できずシステムを全く利用しなかったため、利用成果はない。

まとめ、今後の課題

今後、本課題を実施する研究時間が確保できた際に

は、TSUBAME 共同利用を申請し、本課題を実施したい。