

ケンブリッジ結晶構造データベースを用いた高性能有機半導体材料の探索
 Searching High-Performance Organic Semiconductors
 in the Cambridge Structural Database

山形大 ROEL¹ ○(B4)岡田 智悠¹, 松井 弘之¹

ROEL, Yamagata University¹ Tomoharu Okada¹, Hiroyuki Matsui¹

E-mail: trf40019@st.yamagata-u.ac.jp, h-matsui@yz.yamagata-u.ac.jp

【はじめに】従来の有機半導体材料開発は、研究者自身が新規分子構造の考案、合成、同定、精製、デバイス作製、デバイス評価を行ってきたため、多大な時間とコストが必要であった。一方で、近年では量子化学計算の発達や計算機の性能向上、様々な物質に関するデータベースの増加に伴い、理論・計算・データ科学を活用した材料開発「マテリアルズインフォマティクス」が注目されている。しかしながら、そのような手法による有機半導体材料の開発例は未だ少ない。そこで本研究では、約 100 万件の結晶構造データを有するケンブリッジ結晶構造データベース (CSD) を活用し、結晶構造は既知でありながら半導体としての性能は未知の物質群の中から高性能な有機半導体材料を探索することを目的とした。

【実験方法】CSD Python API を用いて、CSD からデータを引き出し、まずは、イオンを含まない、単一成分子系である、重金属を含まない、高分子ではない等の条件で一次スクリーニングを行った (Fig. 1)。その後、密度汎関数法 (B3LYP/6-31G*) を用いて HOMO と LUMO のエネルギーを計算し、そのエネルギー準位によってスクリーニングをした。計算は九州大学のスーパーコンピュータシステム ITO (36 コア×4 ノード) と Gaussian 16 を用いて行った。今回はトランジスタに適した p 型半導体として -5.4~-5.0 eV に HOMO の準位があるものと、n 型半導体として -4.0 eV 以下に LUMO の準位があるものを抽出した。

【結果】一次スクリーニングを行った結果、973,630 個の結晶構造データの内、220,284 個が条件を満たした。その 220,284 個全てに対して密度汎関数法計算を行った結果、HOMO と LUMO のエネルギーについて Fig. 2 のヒストグラムを得た。その中で HOMO が -5.4~-5.0 eV の範囲に含まれる分子は 29,434 個、LUMO が -4.0 eV 以下の含まれる分子は 461 個であった。全ての計算を終えるのにかかった時間は約 23 日であった。今後はトランスファー積分や有効質量、溶解性、安定性を条件にさらなるスクリーニングを進める。

【謝辞】本研究は、JST、CREST、JPMJCR18J2 の支援を受けたものである。

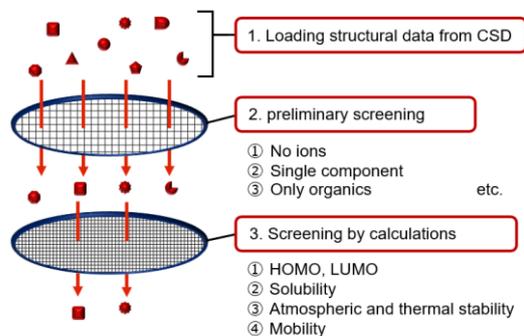


Fig 1. Flowchart of this research

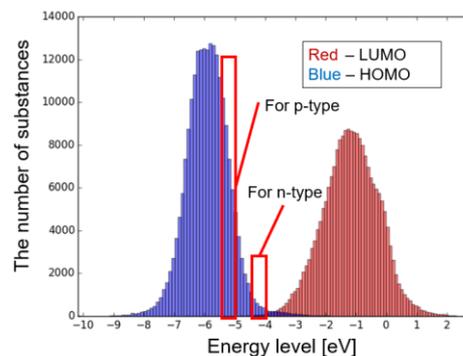


Fig 2. Histogram of HOMO and LUMO levels