

# ハイスループット計算による結晶性ホストゲスト有機半導体材料の探索

## Exploration of Crystalline Host-Guest Organic Semiconductor Materials

### by High-Throughput Calculation

山形大 ROEL<sup>1</sup>, ○(B) 松下 修尋<sup>1</sup>, 松井 弘之<sup>1</sup>

ROEL, Yamagata Univ.<sup>1</sup>, Nobuhiro Matsushita<sup>1</sup>, Hiroyuki Matsui<sup>1</sup>

E-mail: txy19828@st.yamagata-u.ac.jp, h-matsui@yz.yamagata-u.ac.jp

【研究概要】有機半導体の高性能化の方法として無機半導体でも用いられている化学ドーピングがある。しかし、結晶性の有機半導体では、材料ごとに異なる分子形状をしており不純物を含む固溶体の形成が容易でないため、ドーピングによる高性能化が困難とされている。そこで本研究では、ハイスループット理論計算を用いて高移動度な結晶性有機半導体 DNTT にドーピング可能なゲスト分子をデータベースから網羅的に探索したので報告する。

【実験方法】DNTT をホスト分子とし、ケンブリッジ結晶構造データベース(CSD)から慣性テンソルが類似する分子 300 種をゲスト分子の候補として抽出した。周辺分子-中心分子の組み合わせがホスト-ホスト、ゲスト-ゲスト、ホスト-ゲストとなる 3 つの構造 (Fig. 1) を、周辺分子の数を 6 から 60 の間で変化させながら作成した。ホスト分子からゲスト分子への置換は、重心および慣性テンソルの固有ベクトルの向きを一致させることで自動的に行った。3 つの構造をもとに古典力場計算ソフト GULP を用いて構造最適化の後にそれぞれの相互作用エネルギー  $W_{HH}$ ,  $W_{GG}$ ,  $W_{HG}$  を計算し、結晶状態の指標となるパラメータ  $\chi = \frac{1}{k_B T} [W_{HH} + W_{GG} - 2W_{HG}]$  を求めた。続けて、密度汎関数理論計算により再度相互作用エネルギー計算を行い、 $\chi$  パラメータの計算精度を高めた。

【結果】古典力場により約 300 分子の計算を行った。 $\chi$  パラメータは周辺分子数が 6 から 12 の間では大きく変化した。徐々に変化は緩やかになり、36 以上ではおよそ一定となった (Fig. 2)。これは中心分子との距離が次第に遠くなり、相互作用の影響が小さくなったためである。周辺分子数を 36 個として計算を行った結果、固溶体を形成することが実験で確かめられているゲスト分子 DBTTF よりも  $\chi$  パラメータが小さく固溶体を形成しやすい分子を 5 種発見した (Fig. 3)。密度汎関数法による計算では古典力場で求めた  $\chi$  パラメータよりもやや大きくなった。今後は探索分子数を増やし、電荷移動を考慮してさらなる候補分子の探索を行う予定である。

【謝辞】本研究の一部は、JST, CREST, JPMJCR18J2 の支援を受けて行われました。

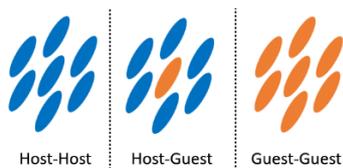


Fig.1 The structures used in the calculations

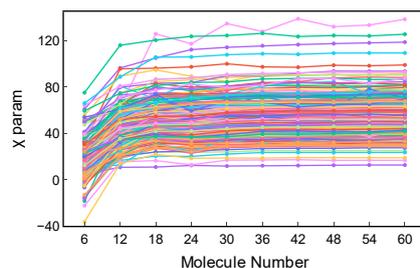


Fig.2  $\chi$  parameters as functions of the number of surrounding molecules

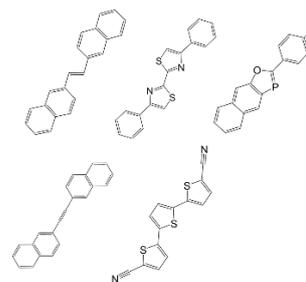


Fig.3 Candidate molecules