

## オリゴアセンの結晶構造に対する理論予測

## Theoretical Prediction of Crystal Structures of Oligoacenes

豊橋技科大<sup>1</sup>, 産総研ナノシステム<sup>2</sup>小畑 繁昭<sup>1,2</sup>, 新津 直幸<sup>2</sup>, 三浦 俊明<sup>2</sup>, °下位 幸弘<sup>2</sup>Toyohashi Univ. Tech.<sup>1</sup>, NRI-AIST<sup>2</sup>,Shigeaki Obata<sup>1,2</sup>, Naoyuki Niitsu<sup>2</sup>, Toshiaki Miura<sup>2</sup>, °Yukihiro Shimoi<sup>2</sup>

E-mail: y.shimoi@aist.go.jp

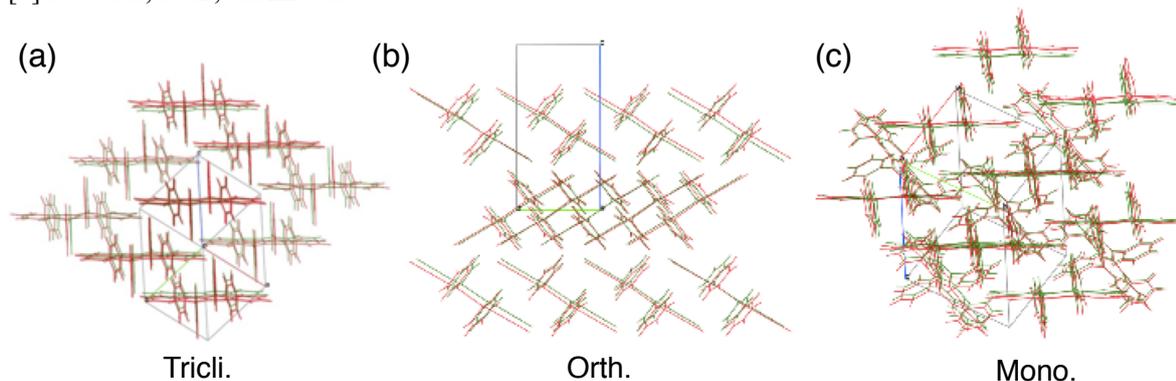
【序】有機デバイスの性能は、分子自身の性質とともに分子間配置にも大きな影響を受けると考えられる。たとえば、輸送現象には隣接分子間の $\pi$ 電子の重なりが本質的である。有機 FET では、単結晶が用いられる場合がある。結晶構造をとらない場合でも、分子配置と結晶構造に相関があると考えられる。結晶構造を理論的に予測することは、発展途上の技術であるが、この技術が確立されれば、新規材料の設計やデバイス性能向上に向けて有力な理論的手法になりうると期待できる。本講演では、最近開発された結晶構造予測法を用い、[1,2] 有機デバイス材料であるペンタセンやルブレン[3]などオリゴアセンを取り上げ、結晶構造を予測し、X 線結晶構造と比較する。

【計算手法】結晶構造予測には CONFLEX を用いた。[2] 計算は、様々な分子配置の初期構造を生成し、分子力場を用いて各初期構造の構造最適化を行い、得られた構造のうち比較的低い結晶エネルギーを持つものを予測構造として採用した。計算に用いた分子力場は MMFF94 である。

【結果と考察】図 1 は、ルブレンの予測結晶構造 (赤) と X 線結晶構造 (緑) を比較したものである。図から、予測構造は、報告されている 3 つの結晶多形と良く一致していることがわかる。さらに、これらの予測構造は、得られた 5 4 2 個の最適化構造のうち、(a) 1 番目、(b) 2 番目、(c) 4 番目に低い結晶エネルギーを示す。また、孤立分子ではテトラセン骨格がねじれた構造をとるが、これらの予測構造では、実験結果と同様に骨格が比較的平面に近い構造をしている。これは、分子間相互作用が分子内の構造変化を引き起こし、結晶全体として安定化されているためである。当日はペンタセンなど他のオリゴアセンの結果についても報告する予定である。

[1] S. Obata, H. Goto: in preparation. [2] H. Goto, et al, CONFLEX7; Conflex: Tokyo, Japan, 2012.

[3] S. Obata, et al., submitted.



【図 1】 ルブレンの 3 つの結晶多形。予測結晶構 (赤) と X 線結晶構造 (緑)。