

液晶性フタロシアニン/PCBM 混合系における構造形成の MD 計算

Structure formation in LC phtalocyanine/PCBM mixture: MD simulation study

産総研¹, 阪大² ○米谷 慎¹, 宮元彩乃¹, 清水 洋¹, 藤井彰彦², 尾崎雅則²AIST¹, Osaka Univ.² ○Makoto Yoneya¹, Ayano Miyamoto¹, Yo Shimizu¹,Akihiko Fujii² and Masanori Ozaki²

E-mail: makoto-yoneya@aist.go.jp

はじめに：ノンペリフェラル位でオクタアルキル置換された液晶性フタロシアニン ($\text{H}_2\text{PcC}_6^{\text{np}}$) は、PCBM との混合系により塗布型有機薄膜太陽電池への応用が検討されている^{1,2)}。一方で、その混合薄膜の構造については不明な点が多い。本報告では、 $\text{H}_2\text{PcC}_6^{\text{np}}$ /PCBM 混合系における構造形成を分子動力学 (MD) シミュレーションにより検討した結果について報告する。

計算方法：用いた $\text{H}_2\text{PcC}_6^{\text{np}}$ 分子モデルは既報³⁾ と同じで、PCBM についても同レベルでモデル化した。 $\text{H}_2\text{PcC}_6^{\text{np}}$ /PCBM 混合溶液はクロロホルム等を溶媒として調製されるが^{1,2)}、今回の計算では、構造形成の MD 計算として現実的な implicit solvent モデル⁴⁾ (具体的には generalized Born モデルと Langevin dynamics の組み合わせ) を用いた。 $\text{H}_2\text{PcC}_6^{\text{np}}$:PCBM=320 分子:80 分子を、(48 nm)³ の立方体 MD セル中にランダムに配置して図 1 に示す初期構造を作成し、常温にて MD 計算を行った。計算は、まず溶媒揮発過程をモデル化したセル各辺の一定シュリンクステージを経て、その後一定圧力下での自発凝集ステージに切り替えて行い、最終的に実際の成膜密度程度近くまでの過程をシミュレートした。

計算結果：上記のシミュレーションの過程での構造形成に着目すると、初期希薄状態から、まず $\text{H}_2\text{PcC}_6^{\text{np}}$ 分子が π スタック (J 会合) により積層したカラムが自発的形成し、さらにそのカラム端に PCBM が配位した構造の形成が見られた。次に、これらのカラム間の凝集が生じ、その過程で PCBM 部位の集積が見られた。MD 計算 260 ns 後のスナップショット ($\text{H}_2\text{PcC}_6^{\text{np}}$ は Pc コア部のみ示した) を図 2 に示す (右下部等に $\text{H}_2\text{PcC}_6^{\text{np}}$ 分子の J 会合体が見て取れる)。

上記の構造形成の過程での動径分布関数や構造関数の変化については当日報告する予定である。

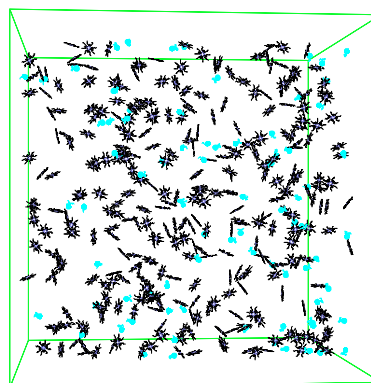


図 1 初期構造

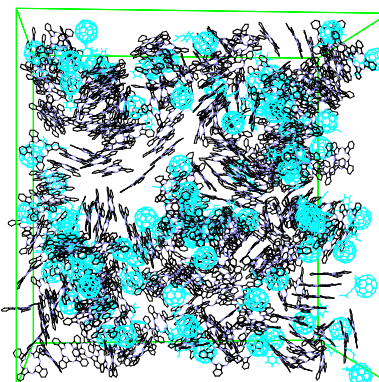


図 2 MD 計算 260 ns 後のスナップショット

1) Hori et al., APEX, 3, 101602, 20102) Dao et al., APL, 101, 263301, 2012

3) 米谷ほか, 第 60 回春季応物, 27p-G13-7, 2013

4) Scheraga et al., Annu.Rev.Phys.Chem., 58, 57, 2007