

## オリゴアセンの結晶構造に対する理論予測 II

## Theoretical Prediction of Crystal Structures of Oligoacenes II

産総研ナノシステム<sup>1</sup> 豊橋技科大<sup>2</sup>新津 直幸<sup>1</sup>, 小畑 繁昭<sup>1,2</sup>, 三浦 俊明<sup>1</sup>, °下位 幸弘<sup>1</sup>NRI-AIST<sup>1</sup>, Toyohashi Univ. Tech.<sup>2</sup>Naoyuki Niitsu<sup>1</sup>, Shigeaki Obata<sup>1,2</sup>, Toshiaki Miura<sup>1</sup>, °Yukihiro Shimoi<sup>1</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。結晶構造や固体中の分子間配置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、前回に引き続き[1,2]、最近開発された結晶構造予測法を用い、[3,4] 有機デバイス材料である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。今回は、フェナントレン、クリセン、ピセンなど芳香環がジグザグにつながった分子を取り上げる。

【計算手法】結晶構造予測には CONFLEX を用いた。[4] 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。

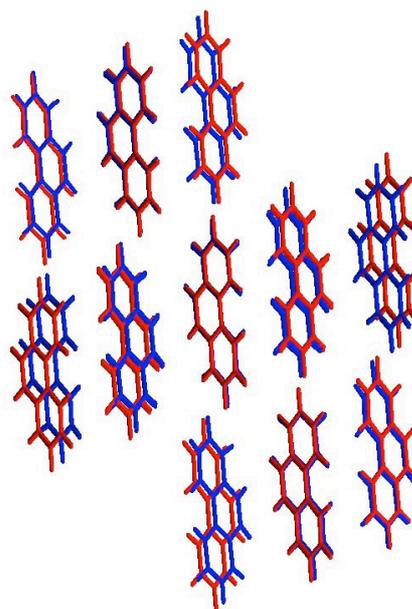
【結果と考察】図 1 に、フェナントレンの予測結晶構造 (赤) と X 線結晶構造 (青) を比較する。予測構造は最低の結晶エネルギーのものを示している。両者が良く一致しており、用いた手法が有効であることが分かる。当日はクリセン、ピセンの結果も合わせて報告する予定である。また、圧力下でのベンゼンの構造相転移についても言及する予定である。

[1] 小畑他、第 74 回応用物理学会秋季学術講演会 (同志社大 2013 年 9 月) 講演番号 19a-C5-3.

[2] S. Obata, T. Miura, Y. Shimoi, Jpn. J. Appl. Phys. **53**, 01AD02 (2014).

[3] S. Obata, H. Goto: in preparation.

[4] H. Goto, et al, CONFLEX7; Conflex: Tokyo, Japan, 2012.



【図 1】 フェナントレンの結晶構造。予測結晶構造 (赤) と X 線結晶構造 (青)。