

結晶構造予測法を用いたルブレネ結晶の圧力誘起構造変化

Pressure Induced Structural Change of Rubrene Crystal:

A Computational Crystal Structure Prediction Study

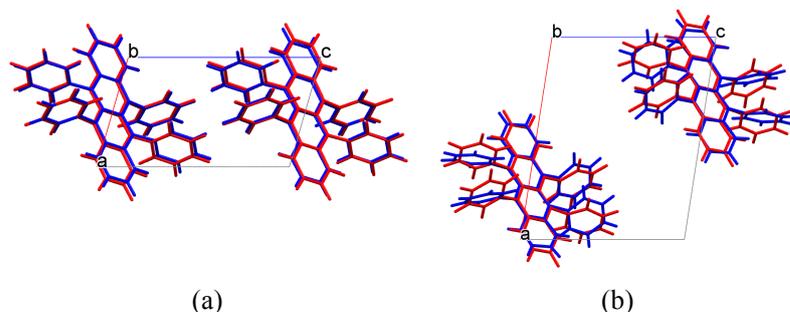
小畑 繁昭^{1,2}、後藤 仁志¹、[○]下位 幸弘² (1. 豊橋技科大、2. 産総研機能化学)

Shigeaki Obata^{1,2}, Hitoshi Goto¹, [○]Yukihiro Shimoi² (1. Toyohashi Univ. Tech., 2. RISC-AIST)

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

有機半導体の特徴の一つである構造柔軟性の起源は、弱い分子間相互作用にある。この弱い相互作用は、圧力による物性の大きな変化をもたらす。ルブレネや DNTT では、加圧による移動度の増加が報告されている [1,2]。移動度の増加は、圧力による分子間配置と運動性の変化に起因していると考えられている。そこで、我々は、結晶構造最適化法ならびに予測法を用いて[3-5]、圧力下での有機半導体の結晶構造の変化を理論的に研究した。本発表では、ルブレネについて報告する。計算は、分子力場として MMFF94 を使い、CONFLEX プログラム [4]を用いて行った。

図 1 に、結晶構造予測法を用いて理論的に得られたルブレネ三斜晶の構造 (赤) を実験構造 (青) [6]と重ね合わせて比較した。図 (a) は常圧、(b) は圧力下 (計算 10 GPa; 実験 7.12 GPa) での結果である。実験的には、この圧力で別の三斜晶に相転移することが報告されている。図に示すように、実験に対応する 2つの三斜晶構造を結晶構造予測により求められることがわかる。このことは、構造柔軟性のある有機半導体の圧力構造変化の計算に対する本手法の有効性を示唆している。当日は、構造変化の詳細と相転移機構についても報告する予定である。



【図 1】ルブレネ三斜晶構造に対する結晶構造予測法 (赤) ならびに実験構造の比較。(a)常圧。(b)圧力下(計算 10 GPa; 実験 7.12 GPa)

- [1] Y. Okada, K. Sakai, T. Uemura, Y. Nakazawa, J. Takeya, *Phys. Rev. B* **84** 245308 (2011).
 [2] K. Sakai, Y. Okada, S. Kitaoka, J. Tsurumi, Y. Ohishi, A. Fujiwara, K. Takimiya, J. Takeya, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 096603 (2013).
 [3] S. Obata, H. Goto, *AIP Conf. Proc.*, **1649** 130 (2015).
 [4] H. Goto, S. Obata, N. Nakayama, K. Ohta, CONFLEX7; Conflex: Tokyo, Japan, 2012.
 [5] S. Obata, T. Miura, Y. Shimoi, *Jpn. J. Appl. Phys.*, **53** 01AD02 (2014).
 [6] S. Bergantini, M. Moret, G. Buth, F. P. A. Fabbiani, *J. Phys. Chem. C*, **118** 13476 (2014).