

V 字型有機半導体分子の理論的研究: 分子間相互作用

Theory on V-shaped Organic Semiconducting Molecules: Intermolecular Interactions

○ 下位幸弘¹、都築誠二¹、岡本敏宏^{2,3}、三津井親彦²、竹谷純一²、佐藤寛泰⁴、
山野昭人⁴ (1. 産総研ナノシステム、2. 東大院新領域、3. JST さきがけ、4. リガク)

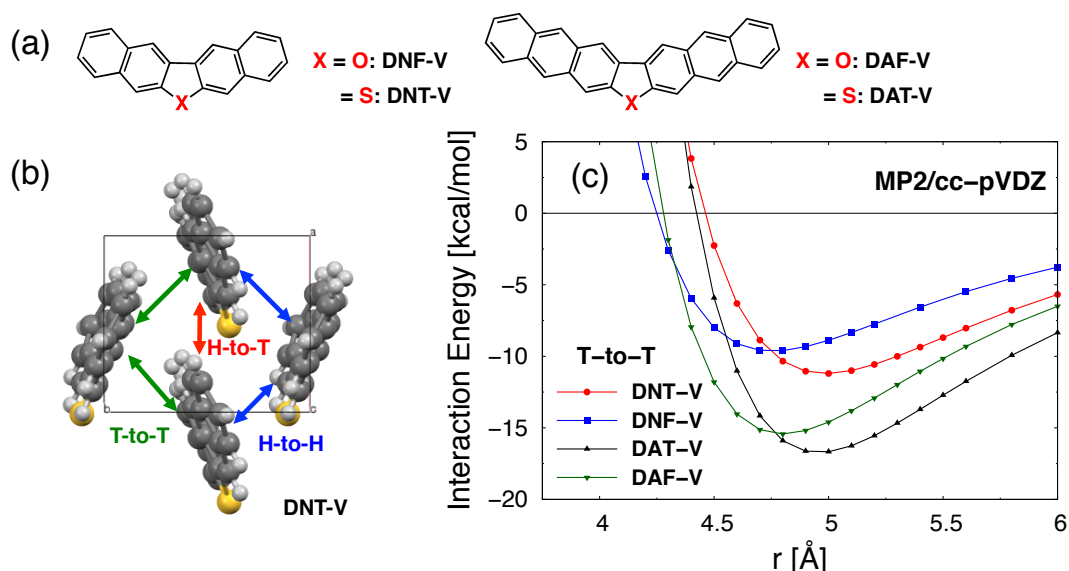
°Y. Shimoi¹, S. Tsuzuki¹, T. Okamoto^{2,3}, C. Mitsui², J. Takeya², H. Sato⁴, and A. Yamano⁴

(1.NRI-AIST, 2.Univ. Tokyo, 3. JST-PRESTO, 4. RIGAKU)

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

有機半導体の電子物性は、分子自身の性質に加え、分子配列に大きく影響される。ジナフトチオフェン (DNT-V) など V 字型縮環パイ共役系分子は、電子デバイス材料として優れた性能を示すとともに、結晶中で分子が非平面化するなど興味深い物質である[1]。本発表では、4 種類の V 字型縮環パイ共役系分子を取り上げ (図 1(a))、結晶中での分子配列の決定要因や分子変形の起源を明らかにすることを目的に、量子化学計算による分子間相互作用の理論的研究について報告する。なお、DNT-V については、基底関数 6-31G(d)レベルの先行研究がある[2]。

図 1(a) に示す 4 分子の結晶構造は、いずれもヘリングボーン構造をとり、3 種類の近接分子ペアが存在する (図 1(b))。このうち T-to-T ペアについて、各分子の重心間距離 r を変化させたときの分子間相互作用エネルギーの変化を図 1(c) に示す。計算のレベルは MP2/cc-pVDZ で、counterpoise 法による補正を行った。中心が硫黄原子の DNT-V, DAT-V に比べ、酸素原子の DNF-V, DAF-V では、相互作用エネルギーが最小となる距離が短く、X 線結晶構造解析の結果と対応している。当日は、分子が非平面化する影響や基底関数依存性についても言及する予定である。



【図 1】 V 字型縮環パイ共役系分子の分子構造(a)と結晶中の分子配列(b). (c): T-to-T 分子ペアにおける分子間相互作用エネルギーの重心間距離依存性。

[1] T. Okamoto, et al., Adv. Mater. 2013, 25, 6392; K. Nakahara, et al., Chem. Commun. 2014, 50, 5342.

[2] 松下他、第 73 回応用物理学会学術講演会 12a-H2-10 (2012 年 9 月, 愛媛大学・松山大学) .