

有機半導体 C_n -BTBT の溶解度シミュレーション

Simulation on the solubility of organic semiconductors C_n -BTBTs

先端素材高速開発技術研究組合¹, 東ソー², 産総研 CD-FMat³

○宮下 真人^{1,2}, 三浦 俊明³, 下位 幸弘³

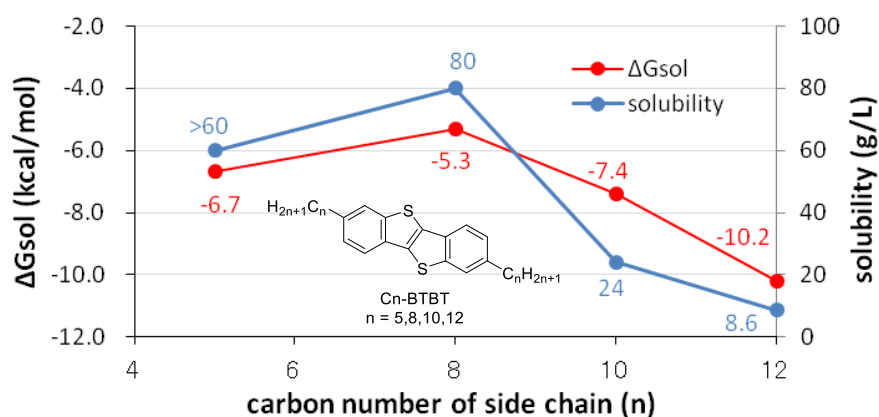
ADMAT¹, TOSOH², CD-FMat, AIST³, ○Masato Miyashita^{1,2}, Toshiaki Miura³, Yukihiro Shimoi³

E-mail: m-miyashita@admat.or.jp

【緒言】 有機半導体材料の溶解性はプリントエレクトロニクスへの適応において重要な物性値であり、その予測は材料開発において重要な要素である。本発表では、有機半導体分子の溶解性におけるアルキル側鎖長の効果を分子動力学 (MD) 法によりシミュレーションし、実験値と比較する。

【手法】 本研究では、結晶が溶媒に溶解する際の自由エネルギー変化 $\Delta G_{\text{solubility}}$ を計算し[1]、溶解度の指標とした。 $\Delta G_{\text{solubility}}$ は、結晶状態から気相状態への自由エネルギー変化と溶解状態から気相状態への自由エネルギー変化を、MD シミュレーションで各々計算し、その差として求めた。対象とする分子として、異なる長さの直鎖アルキル鎖を有する C_n -BTBT ($n = 5, 8, 10, 12$) (図 1 挿図) を取り上げた。MD 計算には Gromacs5.1.4 を使用した。

【結果】 図 1 に、クロロホルムを溶媒とした場合の C_n -BTBT の $\Delta G_{\text{solubility}}$ の鎖長依存性を、溶解度の実験値[2] とともに示した。シミュレーション結果を見ると、ヘリングボーン構造を形成する $n = 8, 10, 12$ のうち $n = 8$ が最も溶解性が良く、また、 π スタック構造の $n = 5$ は、 $n = 8$ より溶解性が低い。この傾向は、実験で観測された傾向と一致している。当日は、より詳細な計算結果についても報告する予定である。



【図 1】 $\Delta G_{\text{solubility}}$ and solubility[2] of C_n -BTBT (chloroform, r.t.)

【謝辞】 この成果は、国立研究開発法人新エネルギー・産業技術総合開発機構 (NEDO) の委託事業の結果得られたものである。

[1] M. J. Schnieders *et al.*, *J. Chem. Theory Comput.* **2012**, 8, 1721.

[2] H. Ebata *et al.*, *J. Am. Chem. Soc.* **2007**, 129, 15732.