有機半導体の結晶構造とキャリア移動度の予測：結晶構造予測シミュレーション

Prediction of Crystal Structure and Carrier Mobility for Organic Semiconductors: Simulation of Crystal Structure Prediction

コンフレックス [1]，豊橋技科大 [2]，筑波大数物 [3]，東大新領域 [4]，ＮＥＣ[5]
○小畑 繁昭 [1,2]，石井 宏幸 [3]，新津 直幸 [4]，渡邊 峻一郎 [4]，
後藤 仁志 [2]，広瀬 賢二 [5]，小林 伸彦 [3]，岡本 敏宏 [4]，竹谷 純一 [4]
CONFLEX[1], Toyohashi Univ. of Tech.[2], Univ. of Tsukuba[3], Univ. of Tokyo[4], NEC[5]
°Shigeaki Obata[1,2], Hiroyuki Ishii[3], Naoyuki Niitsu[4], Shun Watanabe[4],
Hitoshi Goto[2], Kenji Hirose[5], Nobuhiko Kobayashi[3], Toshihiro Okamoto[4], Jun Takeya[4]
E-mail: obata@conflex.co.jp

有機半導体の結晶構造にみられる分子配列様式の違いはキャリア移動度に大きく影響する．そのため，より高移動度な有機半導体デバイスを開発するためには，有機半導体分子の種類や構造の他，分子配列を含めた材料設計が重要である．そこで我々は，有機分子の構造式からその分子の結晶構造を予測する技術[1,2]を応用し，有機半導体の結晶構造，さらにキャリア移動度を予測する技術の開発を進めている[3]．ここでは，これらの予測技術を有望な有機半導体分子である C_{10}-DNBDT（Fig., 左図）に適用した結果[3]，特に結晶構造予測について述べる．

結晶構造予測では, 異なる分子配置をもつ 23,808 の初期結晶構造を生成し，それぞれ MMFF94 力場を用いて構造最適化した. そして, 得られた最適化結晶構造から, 結晶エネルギーと粉末 X 線回折実験で得られた回折データを用いて予測される C_{10}-DNBDT の結晶構造 4 種を選定した. 最後に，PBE-TS 法[4]による再構造最適化から C_{10}-DNBDT の予測結晶構造を決定した. 予測した結晶構造は実験構造とよく一致している（Fig., 右図）.

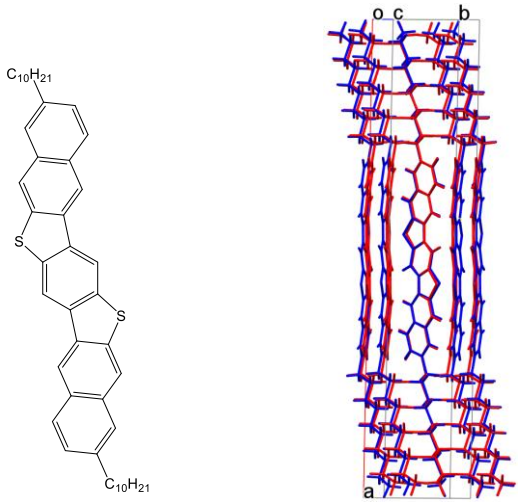

Fig. Structural formula of C_{10}-DNBDT and superposition of predicted (red) and experimental (blue) crystal structures.

[1] S. Obata, H. Goto, AIP Conf. Proc. **1649**, 130 (2015)
[2] A. M. Reilly, et al., Acta Cryst. B**72**, 439 (2015).
[3] H. Ishii, and S. Obata, et al., *submitted*.
[4] A. Tkatchenko, M. Scheffler, Phys. Rev. Lett., **102**, 073005 (2009).

© 2019年 応用物理学会