2 次元トリプチセン重合体の構造と電子物性

Geometric and electronic structures of two-dimensionally polymerized triptycene

筑波大学，○(M1) 藤井 康丸，丸山 実那，岡田 晋
Univ. of Tsukuba, ○(M1)Yasumaru Fujii, Mina Maruyama, Susumu Okada
E-mail: yfujii@comas.frsc.tsukuba.ac.jp

トリプチセンは３枚のベンゼン環が２つの sp^3 炭素により３回対称に結合された、sp^2 と sp^3 炭素からなる立体構造を有する炭化水素分子であり、重合化により 2 次元の共有結合ネットワークを形成することができる。これまでに、種々のトリプチセン重合体の合成が報告されており、多孔物質として分子等の包摂/内包へのホスト物質として注目されている。しかしながら、その構造の多様性から、その重合構造についてのエネルギー論や電子構造は未だ提示されていない。そこで本研究では、トリプチセン重合体のエネルギー論と電子構造の解明を目的として、蜂の巣格子状に配置されたトリプチセンが互い違いに重合したモデル構造を考え、密度汎関数理論を用いてそのエネルギー安定性と電子構造の探索を行った（図１）。計算の結果、この重合構造のエネルギーは、孤立ベンゼンを基準として、63meV であり、極めて安定な２次元の共有結合性有機炭素骨格構造であることが明らかになった。さらに、第一原理分子動力学計算を温度 1500K の下、0.2ps 行なった結果、初期の共有ネットワークが保たれ、この系は熱的にも安定な物質であることが示唆された。これらのことから、トリプチセン重合体が極めて安定で実現可能性の高い物質であることを明らかにした。トリプチセン重合体の電子状態計算の結果、トリプチセン重合体は 2.7eV のバンドギャップを有する直接ギャップ半導体であり、価電子帯下端にブリルアンゾーン全体でフラットなバンドを持つ非常に興味深い電子構造を有することがわかった（図 2）。この特異な電子構造はトリプチセン重合体の π 電子の空間分布がカゴメネットワークを形成していることに起因すると考えられる。

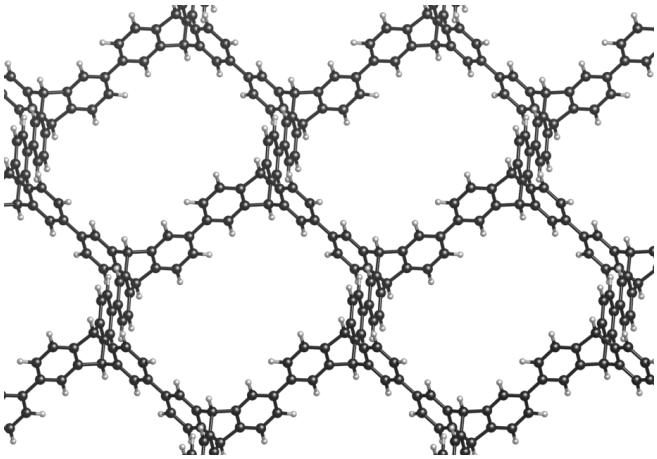

Fig. 1 Geometric structures of polymerized triptycene. Black and white ball indicate C and H atom, respectively.

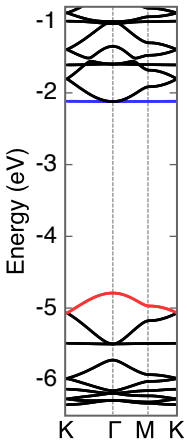

Fig. 2 Electronic structure of polymerized triptycene.

© 2019年 応用物理学会