

相互貫入構造を有する共有結合有機骨格物質の電子物性

Electronic properties of covalent organic frameworks with structural interpenetration

筑波大数理 [○]岡田 晋, 高 燕林, 丸山 実那

Univ. of Tsukuba, [○]Susumu Okada, Yanlin Gao, Mina Maruyama

E-mail: sokada@comas-tsukuba.jp

種々の炭化水素分子等を構成単位として構築される共有結合有機骨格(COF)は、構成単位の数とそれらを結ぶ共有結合の長さから本質的にナノスケールの空隙を有している。このため、COFは相互貫入構造と呼ばれる、互いに入り子構造となった高次構造を構築することが知られている。このような相互貫入構造は COF の本質であり、多くの COF は相互貫入構造を基底状態で取ることが知られている。しかしながら、構造の煩雑性から、これまでこのような相互貫入構造を取り入れた COF の電子物性は明らかにされていない。そこで、本研究では、いくつかの相互貫入構造を有する COF に対して、密度汎関数理論を用いてそのエネルギー論と電子状態の解明をおこない、当該系に対する理論的知見の提示を目指す。

ここでは、トリプチセン、フェナレニル、スマネンの3種類の炭化水素分子に着目し、それらがつくる2次元シート構造から構築される2次元の相互貫入構造を構造モデルとして考えた。いずれの場合も、相互貫入構造を構築することで、その電子状態は孤立シート構造のそれから大きく変調されることが明らかになった。例えば、カゴメバンドやディラックバンド等の特徴的な電子構造の逆格子空間内でのシフト等が、ブリュアンゾーンのアンフォールディングにより誘起される。