

フェナセンの電子状態と分子間相互作用

筑波大数理物質科学研究科

佐藤駿介, 季子祐太郎, 前田崇博, 石井宏幸, 小林伸彦

Electronic states and intermolecular interactions of Phenacenes
Graduate School of Pure and Applied Sciences, University of Tsukuba
S.Sato, Y.Kishi, T.Maeda, H.Ishii, N.Kobayashi

フェナセンはベンゼン環をジグザグに結合させた構造をしている芳香族炭化水素で、バンドギャップが大きく、価電子帯が深いという特徴を備えている。また、フェナセン結晶は高いキャリア移動度を示し、フェナセン系分子を活性層に用いた電界効果トランジスタ(Field-Effect Transistor :FET)は非常に性能の良いトランジスタ特性を示す。フェナセンは合成が困難だったため機能性材料としての応用は少なかったが、近年、ピセンがp型FETの活性層として有効に働くことが発見されたことで注目され^[1]、フェナセンの合成手法が確立されてきた。ベンゼン環がn個つながったものを[n]フェナセンと呼び、現在では[8]フェナセンや[9]フェナセンが合成されている。フェナセンの電荷移動度とベンゼン環数には相関関係があることが報告されているが^[2]、まだ、未解決な部分も多い。

そこで、新学術領域有機班で新たに合成されているフェナセンに対して非経験的分子軌道計算を行い、結晶構造内での分子間相互作用の解析を行った。発表では、既知の低分子量のフェナセンの結晶構造から予測した高分子量の結晶構造とそれを第一原理計算を用いて構造最適化した安定構造のそれぞれのトランスファーエネルギーのnの増加に伴う変化の仕方の特徴や、これらのトランスファーエネルギーを用い計算したバンド分散及び有効質量のn依存性やトランスファーエネルギーとの関連について議論する。

[1] H. Okamoto, N. Kawasaki, Y. Kaji, Y. Kubozono, A. Fujiwara, and M. Yamaji, J. Am. Chem. Soc., **130**, 10470. (2008)

[2] Y. Shimo, T. Mikami, S. Hamao, H. Goto, H. Okamoto, R. Eguchi, S. Gohda, Y. Hayashi, Y. Kubozono, Sci. Rep. **6**, 21008 (2016).