

## [n]フェナセンの結晶構造についての第一原理計算

筑波大学 数理物質科学研究科<sup>1</sup>, 琉球大学 物質地球科学科<sup>2</sup>,  
大阪大学 基礎工学研究科<sup>3</sup>, 岡山大学 理学部<sup>4</sup>  
季子 祐太郎<sup>1</sup>, 前田 崇博<sup>1</sup>, 石井 宏幸<sup>1</sup>, 小林 伸彦<sup>1</sup>,  
柳澤 将<sup>2</sup>, 若林 裕助<sup>3</sup>, 江口 律子<sup>4</sup>, 久保園 芳博<sup>4</sup>

## First-principles calculations for crystalline structures of [n]phenacenes

Univ. of Tsukuba<sup>1</sup>, Univ. of the Ryukyus<sup>2</sup>,  
Osaka Univ.<sup>3</sup>, Okayama Univ.<sup>4</sup>

Y. Kishi<sup>1</sup>, T. Maeda<sup>1</sup>, H. Ishii<sup>1</sup>, N. Kobayashi<sup>1</sup>,  
S. Yanagisawa<sup>2</sup>, Y. Wakabayashi<sup>3</sup>, R. Eguchi<sup>4</sup>, Y. Kubozono<sup>4</sup>

現在, 有機材料を用いた電子デバイスの研究開発が盛んに行われている. 特に 1990 年代のペンタセン等の結晶薄膜を用いた高移動度有機トランジスタの研究により, 有機半導体の利用価値は急速に高まっている. 単斜晶系結晶である[n]フェナセンはペンタセン等と並んで高い移動度を持ち, フェニルリングの数の増加とともに移動度も増加するという傾向が示され, 注目されている<sup>[1]</sup>. また, CTR 散乱による結晶薄膜の表面界面構造の解析も進められている. 一方で, フェナセンの結晶構造は, ピセンより低分子のものについてわかっているものの, それより大きなフェナセンについては粉末 X 線結晶構造解析による結晶の格子定数の測定に止まり, 結晶内の分子配列, 原子座標については十分に明らかになっていない. そのため, CTR 散乱の構造解析や伝導特性のミクロな機構についての解析のためにも理論的に結晶構造, 原子座標の決定が求められている.

そこで, 既知の低分子量のフェナセンの結晶構造から高分子量の結晶構造を予測し, それを密度汎関数理論による第一原理計算を用いて構造最適化することで安定構造を求めた. 計算に用いたソフトウェアは, 平面波基底のQuantum ESPRESSOであり, 交換・相関汎関数にはvan der Waalsの効果を取り込んだrev-vdW-DF2<sup>[2]</sup>を用いた. [11]フェナセンの格子定数とエネルギーバンド分散をそれぞれ Table 1, Figure 1 に示す. 発表では[6]および[8]-[11]フェナセンに関する結晶構造の格子定数, 角度, 原子座標, 有効質量等の詳細について,  $n$  の増加による変化とともに, 計算の現状を報告する.

$a[\text{\AA}]$	$b[\text{\AA}]$	$c[\text{\AA}]$	$\beta[^\circ]$
8.419	5.983	26.461	93.62

Table 1: [11]フェナセンの格子定数

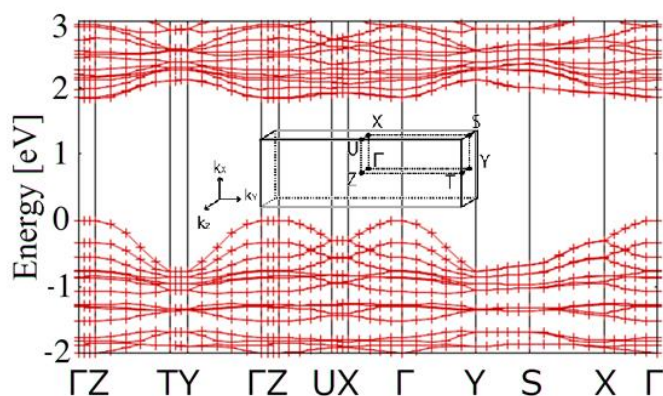


Figure 1: [11]フェナセンのエネルギーバンド分散と 1<sup>st</sup> BZ

- [1] Y. Shimo, T. Mikami, S. Hamao, H. Goto, H. Okamoto, R. Eguchi, S. Gohda, Y. Hayashi, Y. Kubozono, *Scientific Reports* **6**, 21008 (2016)  
[2] I. Hamada, *Phys. Rev. B* **89**, 121103(R) (2014)