

## 研究成果概要

曲面状共役系を有するユニークな環状分子である $[n]$ シクロパラフェニレン( $[n]$ CPP, Fig. 1) は、これまでサイズ選択的な合成が進められるとともに、有機電子材料としての応用例として、疎水基修飾した CPP 非晶系の電子移動度が報告されている。しかしながら、CPP 非晶系の電荷輸送特性に関する系統的な理解は十分でない。本研究では、京都大学化学研究所スーパーコンピュータシステムに実装されている分子動力学(MD)ならびに量子化学計算ソフトウェアを使用して CPP 非晶系の電荷輸送シミュレーションを行い、CPP の環サイズや特異な分子構造が電荷輸送特性に与える影響について検討した。MD 計算にはLinux版 LAMMPSを、量子化学計算にはLinux版 Gaussian 16 プログラムを、分子軌道の可視化には Windows 版 GaussView 6 を用いた。

孤立した CPP 分子の構造最適化には密度汎関数法(DFT, B3LYP/6-31G\*)を用いた。得られた構造を初期構造として MD 計算を行い、4000 分子からなる CPP の非晶凝集体を作製した。5-10 Å 程度の近接した分子間においては herring-bone 様の配置をとる一方、10 Å 以上離れた場合は分子間においては、環が横並びになる傾向が見られた。さらに 25 Å 以上の長距離においては非晶状態にあることが示唆された。DFT を用いて非晶凝集体における分子間電荷移動積分および電荷移動に伴う再配列エネルギーを計算した。周辺分子から受ける静電相互作用も考慮しながら、Marcus 理論に従って電荷移動速度定数を算出し、動的 Monte Carlo 法による電荷輸送シミュレーションを行った。得られた正孔移動度を Fig. 2 に示す。CPP 環サイズの増大するにつれても増加し、[10]CPP は[4]CPP よりも1-2桁程度高い移動度を示した。

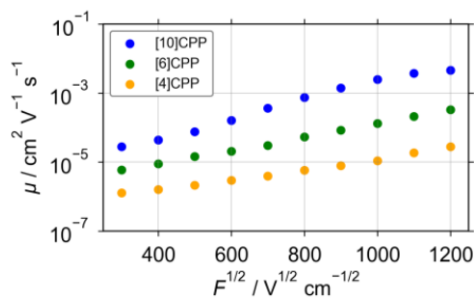


Figure 2. Calculated hole mobility  $\mu$  of [4], [6], and [10]CPP.  $F$  is applied electric field.

## 発表論文(謝辞あり)

[1] Gram-Scale Syntheses and Conductivities of [10]Cycloparaphenylene and Its Tetraalkoxy Derivatives. Eiichi Kayahara, Liansheng Sun, Hiroaki Onishi, Katsuaki Suzuki, Tatsuya Fukushima, Ayaka Sawada, Hironori Kaji, and Shigeru Yamago. *J. Phys. Chem. C*, 2017, **139** (51), pp 18480–18483