

令和元年度 京都大学化学研究所 スーパーコンピュータシステム 利用報告書

有機電子機能性材料の素子形成と界面伝導特性評価

Functional organic electronic device formation and characterization of interfacial conductivity

京都大学大学院 工学研究科 分子工学専攻 関研究室 筒井 祐介

研究成果概要

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を利用し、計算化学統合パッケージ **Materials Studio** を用いて、有機電子機能性材料の物性評価を理論的に行う予定である。

具体的には、有機構成単位（例えば、芳香族アミンと芳香族アルデヒドなど）を拡張構造に共有結合した多孔性共有結合有機骨格（COF）は、最近特に注目されており、そのガス吸着特性、導電性、磁氣的性質などが期待されており、それら物理性質を理解するためには分子の結晶構造を知ることが重要である。COF は結晶性が高く、粉末 X 線回折測定において、顕著な結晶性ピークを観測することができるが、大変複雑であり、また単結晶 X 線構造解析での解析は難しい。そこで、**Materials Studio** に含まれる、**DMol3**, **Forcite**, **Reflex Plus** などを用いて、粉末回折の実験データから得られた回折パターンと理論計算で得られるシミュレーションを比較し、結晶構造の推測を行う予定である。これらの結果が、高機能性材料の模索に役立つことを期待する。

発表論文(謝辞あり)

なし

発表論文(謝辞なし)

なし