

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 property

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、二次元共有結合性高分子（**Covalent Organic Framework: COF**）の電子状態評価と構造解析を理論的に行う予定である。COF 材料はその多孔性のため、幅広い応用に有用であると期待されている。実験的に X 線回折測定によりそのパッキング構造に対応したパターンを得ることができるが、その構造の完全な推定は実験のみでは困難である。これを理論的に探索するために **Materials Studio** を活用したいと考えている。また、特定した構造に対して **Guassian** などを活用し、電子状態計算も行い、実験により得られた物性との相関について評価・探求したいと考えている。