

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** などを用いた **Covalent organic framework (COF)** の物性評価を理論的に行う予定である。**COF** は小さいリンカー分子からなる巨大高分子で、その多孔性からガス吸着・光触媒反応などに有用と考えられる材料系である。さらに、このような材料系における電荷輸送は有機 **FET** や有機 **EL** 等の分子エレクトロニクス素子として有用である。これらの特性はその薄膜構造と結びつけて考えることが重要であるが、高分子であるがゆえに単結晶ならびにそのパッキング構造を得ることが非常に困難である。粉体の X 線回折ピークを **Fitting** 解析することで構造を少しではあるが推定することができるが知られている。実験データだけでの構造推定は困難であるため、**Materials Studio** や **Gaussian** を活用して構造最適化やバンド構造の量子化学計算を行い、実験および理論的な両方の観点から物性の解明に努める予定である。