

ポリアセン結晶の格子振動計算と安定性に関する考察

(日大医) ○小松徳太郎

Stability and Phonon Spectrum of Polyacene Crystal (School of Medicine, Nihon University)

○Komatsu, Tokutaro

The prediction that polyacene (PA) may be a 1000 K - class superconductor¹⁾ has attracted many theoretical chemists.²⁾ As successful synthesis of PA has been reported in 2023³⁾, PA-based organic conductor / superconductor becomes much realistic. DFT calculations gave a stable structure that has the band dispersion and the density of states shown in Fig. 1. The one-dimensional electronic structure may have Peierls instability resulting in metal-insulator transition. To elucidate the concern, the stability of the crystal structure was studied by phonon calculation.

Keywords : Polyacene; Phonon Calculation; Peierls Instability

ポリアセン(PA)は、1000 K オーダーの高い超伝導転移温度を示すとの予想が出されたことをきっかけに¹⁾、精力的に理論的研究が行われてきた²⁾。2023 年に多孔質配位高分子を用いた合成法が報告され³⁾、有機導体／超伝導体としての PA の利用が視野に入ってきた。結晶状態の安定構造と電子構造を密度汎関数法により調べたところ、図 1 のようなバンド構造が得られた。フェルミ準位付近のエネルギーバンドはポリアセンの LUMO と HOMO で構成されており、ポリアセンの重合方向以外にほとんど分散を持たない一次元的なバンド構造になっている。一次元電子構造に起因するパイエルス不安定性により絶縁化することが懸念されるため、フォノンスペクトルを計算し、結晶構造の安定性を調べた。

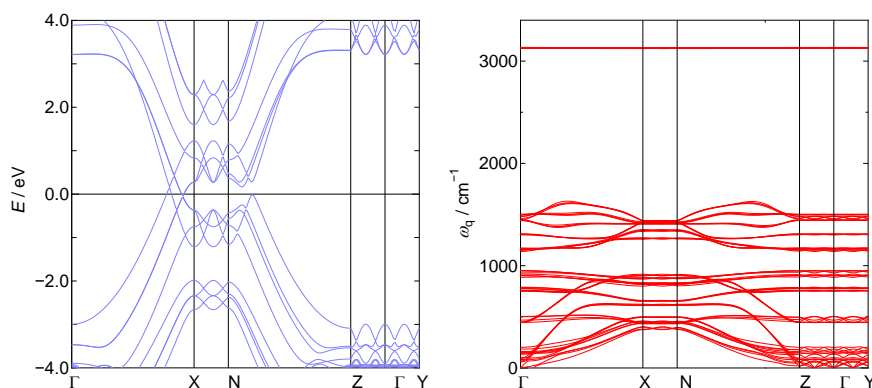


図 1 : ポリアセン結晶のバンド構造 (左) とフォノン分散。

- 1) S. Kivelson *et al*, *Phys. Rev. B* **1983**, 28, 7236.
- 2) A. Mishima *et al.*, *Synt. Met.* **1985**, 11, 75., Y. Otsuka *et al.*, *J. Phys. Soc. Jpn.* **2009**, 78, 024713., G. Karakonstantakis *et al.*, *Phys. Rev. B* **2013**.
- 3) T. Kitao *et al.*, *Nat. Synth.* **2023**, 2, 848.