

1. 粗視化モデル(Coarse-Grained model)MDシミュレーションによるTIPSペンタセンとポリスチレン界面の動的挙動解明

2. 有機半導体薄膜形成における最適構造を達成するコンビネーションの探索

キーワード：分子動力学(MD)シミュレーション、Full Atomistic/Coarse-Grained model、有機半導体トランジスタ、有機半導体、相分離、界面物性

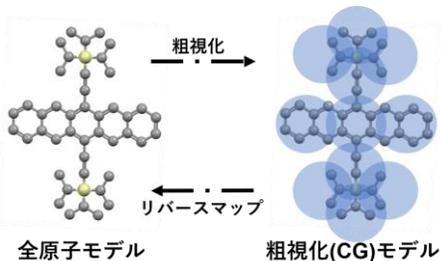
研究目的：有機半導体薄膜形成プロセスの理解

- 薄膜内における相分離構造、薄膜表面・界面物性の解明
- 結晶核生成メカニズムの探索

1. CGモデル構築 リバースマッピング法の確立

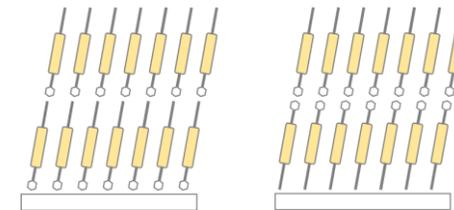
2. 有機半導体分子の置換 位置効果の解明

3. 有機半導体薄膜形成時の最適結晶構造を 達成するコンビネーション探索



層分離構造
薄膜表面・界面物性の理解

置換基位置のみが異なる分子構造を持つ有機半導体分子をターゲットとした分子構造の結晶性/溶解度への影響の解明



結晶核生成メカニズムの解明

有機材料システム研究科 有機材料システム専攻(副専攻:機械システム専攻)
博士後期課程1年 フレックス大学院3年
松井弘之研究室
鈴木朝香 (Tomoka Suzuki)
Email:t211341d@st.yamagata-u.ac.jp



Matsui Lab

Research Center for Organic Electronics, Yamagata University

