

BCP の電子状態に関する理論的研究

Theoretical investigation on the band gap and the optical gap of bathocuproine

○柳澤 将^{1,2}, 畑田真之介², 森川良忠², 吉田弘幸³ (1. 琉球大理, 2. 阪大院工, 3. 京大化研)○Susumu Yanagisawa^{1,2}, Shin-nosuke Hatada², Yoshitada Morikawa², Hiroyuki Yoshida³

(1. Univ. of the Ryukyus, 2. Osaka Univ., 3. Kyoto Univ.)

E-mail: shou@sci.u-ryukyu.ac.jp

有機半導体の電子物性について、近年では実験技術や理論計算法の進歩により、原子・分子スケールの電子状態の観点からバンド構造の形成やキャリア伝導の仕組みなどが議論されるようになった。有機半導体の単結晶や薄膜について占有バンドの分散や正孔移動度の正確な測定結果が報告されるようになったが、電子注入や伝導の役割を担う非占有準位の情報は、実験・理論計算ともに技術的に容易ではなく、その報告例は限られてきた。

最近、吉田によって低エネルギー逆光電子分光法 (LEIPS) が開発され、これまで測定が難しかった有機半導体の非占有準位を非破壊・高分解能で測定できるようになった[1]。この実験法により、有機半導体の電子物性の理解がさらに深まることが期待される。

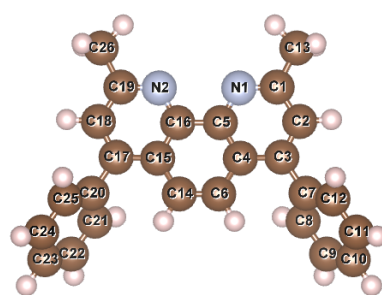


図 2. BCP の分子構造

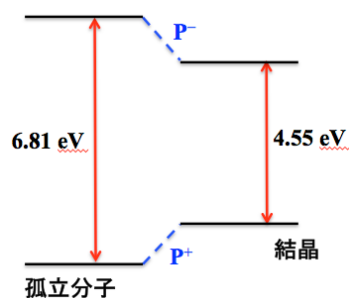


図 1. BCP 分子と結晶でのエネルギーギャップ

本研究では、有機電子材料として注目される bathocuproine (BCP) について、高精度な第一原理計算から結晶のバンドギャップや分極エネルギーを決定し、電子状態に関する理解を深める事を目的とする。BCP の結晶・分子 (図 1) のエネルギー準位の計算には *GW* 近似を用いた。

結晶・分子での最高占有・最低非占有 (HOMO・LUMO) 準位の計算結果を示す。結晶のバンドギャップは 4.55 eV となった。実験ではイオン化エネルギーは光電子分光で 6.5 eV [2]、電子親和力は LEIPS で 1.9 eV [3]と報告された。よってバンドギャップは 4.6 eV と見積もられ、よく一致する。HOMO・LUMO 準位の分極エネルギーもそれぞれ計算でき、1.1 eV 程度であった。分極エネルギーの実験値の報告はないが、以前報告された様々な有機結晶の分極エネルギーの値[4]とも近く、固体中の多体電子間のクーロンポテンシャルを正しく取り扱う *GW* 近似で正しく計算できたと考えられる。

光学的性質に関しても、光学ギャップについて検討を行っており、その詳細も当日報告する。

[参考文献]

[1] H. Yoshida, Chem. Phys. Lett. **539-540**, 180 (2012); H. Yoshida, Anal. Bioanal. Chem. **406**, 2231 (2014).

[2] I. G. Hill and A. Kahn, J. Appl. Phys. **86**, 4515 (1999).

[3] H. Yoshida, and K. Yoshizaki, *submitted*.

[4] N. Sato, K. Seki, and H. Inokuchi, J. Chem. Soc. Faraday Trans. **77**, 1621 (1981).