第一原理計算に基づく量子波束ダイナミクスを用いた様々な有機半導体の移動度評価

Evaluation of mobility for various organic semiconductors using quantum wave-packet dynamics based on first-principles calculations

筑波大数物　°石井宏幸，小林伸彦

Univ. of Tsukuba, °Hiroyuki Ishii, Nobuhiko Kobayashi

E-mail: ishii@bk.tsukuba.ac.jp

プリンテッドエレクトロニクスのための半導体材料の一つとして有機半導体が期待されている。様々なデバイスへ有機半導体を応用するためには、出来るだけキャリア移動度を向上させる必要があり、現在も様々な有機材料の探索・開発が行われている。しかしながら、有機材料は無数に種類があり、さらに側鎖や置換基を変える自由度も考えると全ての材料を実際に合成してデバイス特性を評価・比較することは困難である。そこで我々は、原子・分子描像からミクロンスケールの有機半導体材料のキャリア移動度を第一原理計算に基づいて迅速に評価可能なシミュレーション法を開発している[1]。

通常、有機半導体は分子間の弱いファンデルワールス結合からなるために構造乱れが多いが、最近では単結晶デバイスの作成も可能になりつつある。単結晶の場合、キャリア移動度はフォノン散乱によって支配されていると考えられる。我々が開発している計算手法は、超高速な量子波束ダイナミクス計算と分子動力学計算を連立して解くことにより、摂動論を超える強い電子ーフォノン相互作用を導入可能で、有機材料の特性評価に有利である。

今回、我々は本手法をルブレンやペンタセン、DNTT, BTBT など代表的な低分子系有機半導体材料に適用し、その移動度の大小関係を系統的に調べ、実験結果や従来型のバンド伝導理論、ホッピング伝導理論などと比較・検討した結果について紹介する。

Experiment	Our method	Band	Hopping
Rubrene	Rubrene	Naphthalene	Rubrene
C_8-BTBT	C_8-BTBT	DNT-W	Pentacene
DNTT	DNTT	C_8-BTBT	DNTT
Pentacene	DNT-W	Rubrene	DNF-V
DNT-W	Pentacene	DNTT	DNT-W
DNT-V	DNT-V	DNT-V	DNT-V
DNF-V	DNF-V	DNF-V	Naphthalene
Naphthalene	Naphthalene	Pentacene	C_8-BTBT

TABLE I.
Observed and our calculated mobilities of various organic semiconductors in descending order. For the comparison, the band mobilities and hopping mobilities obtained by conventional theories are also shown.

[1] H. Ishii, *et al.*, Phys. Rev. B **85**, 245206 (2012); Phys. Rev. B **90**, 155458 (2014); Phys. Rev. B (accepted).

© 2017年 応用物理学会