

有機トランジスタ界面系の大規模電子状態計算

Large-scale electronic state calculation of organic transistor interface

鳥取大¹ 分子研² 山形大³

角田皓亮¹, 桑田亨成¹, 藤田貴敏², 松井弘之³, 星健夫¹

Tottori U.¹, Inst. Mol. Sci.², Yamagata U.³

K. Kakuda¹, A. Kuwata¹, T. Fujita², H. Matsui³, T.. Hoshi¹,

E-mail: M18J3015K@edu.tottori-u.ac.jp

松井らの電子スピン共鳴(ESR)実験[1]を対象として、ペンタセン(半導体層)・パリレン C(アモルファス状有機高分子絶縁体層)からなる有機トランジスタ界面の大規模(数万原子系)電子状態計算を行った。 ESR スペクトル解析から波動関数の空間的広がり P (分子数単位の Participation Ratio) が定量的に議論でき、 $P \leq 10^2$ の準局在波動関数(分子 1 個よりは広がっているが、系全体には広がっていない)が得られている[1]。一方、星らは独自数値手法やスーパーコンピュータを用いた大規模電子状態計算 (最大 1 億原子;第一原理にもとづくモデル(TB)理論を用いる)や波束ダイナミクス計算を行っており[2], 実験と直接比較できる大規模系が扱える。図 1 に予備的結果を示す。結晶状ペンタセン(360 分子)1 層とアモルファス状パリレン C 層からなる、界面系である。最高占有状態付近の π 型準局在波動関数($P \approx 10$)を描き、実験的知見と一致する結果を得た。パリレン C に含まれる塩素原子がランダム双極子として、ペンタセン層にランダムポテンシャルを与え、準局在波動関数が現れる[1]。絶縁体層を他物質とした系との比較も述べる。このメカニズムは、デバイス材料デザイン(絶縁体層物質選択)の基礎を与える。

[1] H. Matsui, *et al.*, PRL104, 056602 (2010); 松井, Mishchenko, 長谷川達生, 日本物理学会第 68 回年次大会 27pXP-4 (2013). [2] Hoshi, *et al.*, Proc. ScalA16 in SC16, 33 (2016); Code 名 ELSESES.

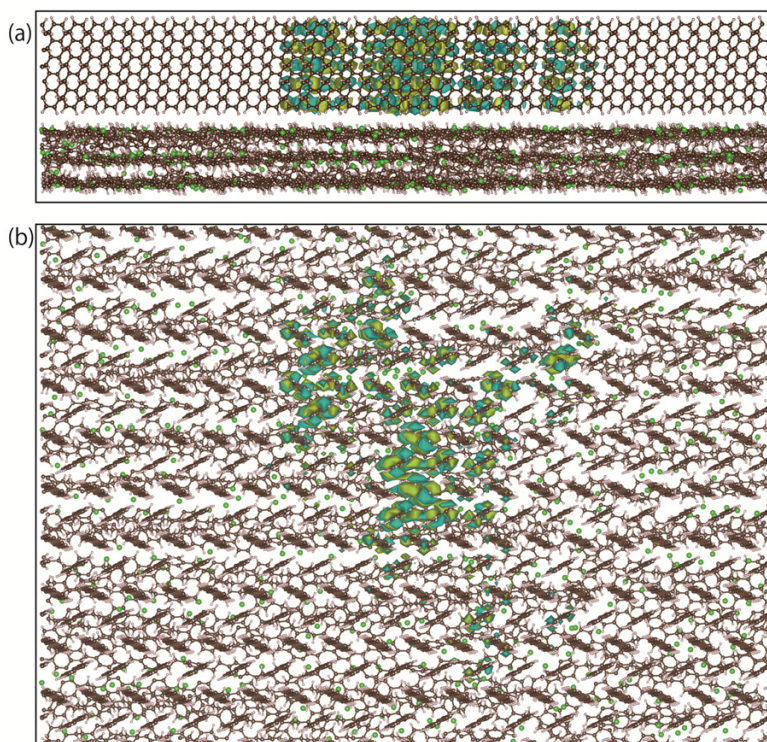


Fig.1 (a) Side view of the calculated interface system between crystalline pentacene layer (upper region) and amorphous Parylene C layer (lower region). Chlorine atoms in Parylene C are drawn as green balls. The figure depicts a semi-localized (π -type) electronic wavefunction. (b) Top view of (a)