

有機半導体の結晶構造とキャリア移動度の予測： 移動度予測シミュレーション

Prediction of Crystal Structure and Carrier Mobility for Organic Semiconductors: Simulation of Mobility Prediction

筑波大数物¹, コンフレックス², 豊橋技科大³, 東大新領域⁴, NEC⁵

○石井 宏幸¹, 小畑 繁昭^{2, 3}, 新津 直幸⁴, 渡邊峻一郎⁴,

後藤 仁志³, 広瀬 賢二⁵, 小林 伸彦¹, 岡本 敏宏⁴, 竹谷 純一⁴

Univ. of Tsukuba¹, CONFLEX², Toyohashi Univ. of Tech.³, Univ. of Tokyo⁴, NEC⁵

○Hiroyuki Ishii¹, Shigeaki Obata^{2,3}, Naoyuki Niitsu⁴, Shun Watanabe⁴, Hitoshi Goto³, Kenji Hirose⁵,

Nobuhiko Kobayashi¹, Toshihiro Okamoto⁴, Jun Takeya⁴

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

IoT 社会を担う低コストで軽量な次世代デバイス材料として有機半導体が注目され、その材料開発が盛んに行われている。有機半導体の結晶構造にみられる分子配列様式の違いはキャリア移動度に大きく影響する。より高移動度な有機半導体デバイスを開発するには、有機半導体分子の種類や構造の他、分子配列を含めた材料設計が重要となる。そこで我々は、有機分子の構造式からその分子の結晶構造を予測する技術[1]を応用し、有機半導体の結晶構造、さらにキャリア移動度を予測する技術[2]の開発を進めている。本講演では、これらの予測技術を有望な有機半導体分子である C10-DNBDT に適用した結果[3]、特に移動度予測に焦点を当てて述べる。

移動度予測には、これまで我々が開発してきた「時間依存波束拡散法」[2]を用いた。有機半導体の移動度は、分子間のトランスファー積分と電子-分子振動相互作用によって記述される。結晶構造予測で得られた構造に対して密度汎関数理論に基づくバンド計算を行い、ワニア関数を生成することで、高精度な分子間のトランスファー積分値を得た。さらに電子-分子振動相互作用定数も密度汎関数理論から第一原理的に評価した。図は予測された移動度の温度依存性（赤）と実験で測定された単結晶トランジスタの移動度（△）を示す。両者の良い一致は、本予測技術の精度の高さを表している。講演では計算手法や結果について詳細に議論する。

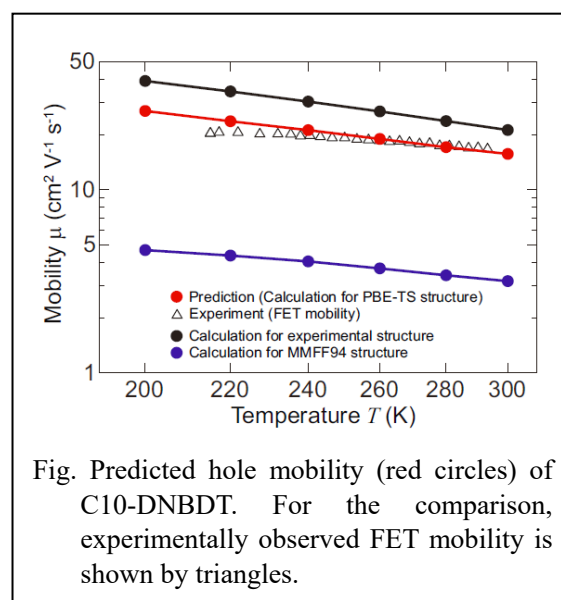


Fig. Predicted hole mobility (red circles) of C10-DNBDT. For the comparison, experimentally observed FET mobility is shown by triangles.

[1] S. Obata, H. Goto, AIP Conf. Proc. **1649**, 130 (2015); A. M. Reilly, et al., Acta Cryst. B **72**, 439 (2015).

[2] H. Ishii, J. Inoue, N. Kobayashi, and K. Hirose, Physical Review B **98**, 235422 (2018).

[3] H. Ishii, and S. Obata, et al., *submitted*.