

rev-vdW-DF2 を用いた金属表面上へのベンゼンの吸着エネルギー計算

Calculation adsorption energy of benzene on metal surface using rev-vdW-DF2

阪大院工¹, 住友電工², 阪大ナノセンター³

○木下 貴裕¹, 稲垣 耕司^{1,3}, 道内 真人^{2,3}, 濱本雄治^{1,3}, 濱田幾太郎^{1,3}, 下司雅章³, 森川 良忠^{1,3}

Osaka Univ.¹, SEI², INSD Osaka Univ.³

○Takahiro Kinoshita¹, Koji Inagaki¹, Masato Michiuchi^{2,3}, Yoshitada Morikawa¹

E-mail: kinoshita@cp.prec.eng.osaka-u.ac.jp

有機発光ダイオード (OLED)、有機電界効果トランジスタ (OFET)、有機太陽電池などの有機デバイスは、低コストのプロセスや柔軟性などの有望な特性のため、大きな注目を集めている。有機デバイスの有機/金属界面は、キャリア注入の効率に影響を与え、最終的に有機デバイスの性能を決定する。特に、最高被占分子軌道(HOMO)と最低空分子軌道(LUMO)を制御し、界面双極子層の形成を決める要因を明らかにすることは必要不可欠である。有機/金属界面は吸着距離により占有状態が大きく変化してしまうため、より高い精度の汎関数を用いることが材料のさらなる理解に直結する。近年、ファンデルワールス力を含んだ汎関数の開発により、さらに精度よく有機/金属界面を計算できるようになった。ベンゼン/金属界面は、機能性芳香族化合物と金属電極間の界面の最も簡潔なシステムであり、実験的、理論的ともに広く研究されている。先行研究である豊田らの Cu(111), Ag(111), Au(111)表面上のベンゼン吸着系の計算^[1]では vdW-DF が用いられたが、本研究では最近提案された汎関数である rev-vdW-DF2^[2]を用いて、各金属表面へのベンゼンの吸着エネルギーを計算した。以前考慮されていなかった Al(111), Fe(110), Ni(111)表面上での吸着構造も新たに検討した。

下図は Fe 上のベンゼン吸着系の計算例であるが、物理吸着状態に加え、ベンゼンの π 結合電子と Fe の d 軌道に起因する化学吸着状態の存在が確認された。講演では他の金属も含めて、吸着系における電子状態の詳細な解析について述べる。

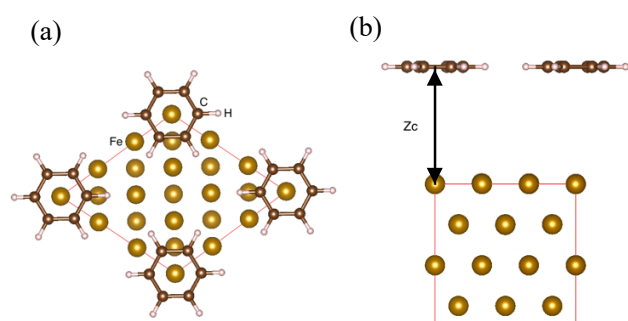


Fig1.(a) Top view of Fe(110)/benzene model.

(b) Side view of Fe(110)/benzene model

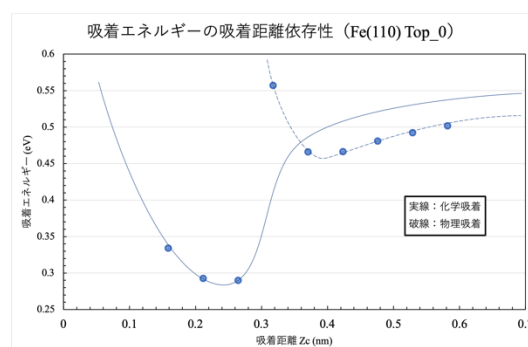


Fig2. Z_c - E_{ads} graph of Fe(110)/benzene model

[1] K.Toyoda, et al., Surf.Sci. **603** (2009) 2912-2922.

[2] I.Hamada, et al., Phys.Rev.B 82, 153412 (2010).