

課題名 (タイトル) :

シリコン上有機分子の電子状態

利用者氏名 : 湊 丈俊

理研での所属研究室名 : 和光研究所 基幹研究所 Kim 表面界面科学研究室

報告内容

1. 本課題の研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

近年、有機半導体を用いた有機電子デバイスへの関心が高まっているが、電極表面と有機分子の界面における構造や電子状態については未だ不明な点が多い。本研究では、密度汎関数を用いて代表的な半導体であるシリコン表面における有機半導体分子の吸着状態、電子構造を明らかにすることを目的とする。

2. 具体的な利用内容、計算方法

密度汎関数計算ソフト D-mol3 を用いて、有機半導体であるベンゾフェノンのシリコン(110)表面における吸着状態、電子状態を計算する。

3. 結果

現在、ソフトの使い方を学びながら、シリコン清浄表面やベンゾフェノンの真空中での構造、および電子状態を計算している。

4. まとめ

現在、ソフトの使い方を学びながら、シリコン清浄表面やベンゾフェノンの構造、および電子状態を密度汎関数を用いて計算している。

5. 今後の計画・展望

シリコン清浄表面やベンゾフェノン単体の構造と電子状態を計算し、既報の成果を再現した後、未知の系であるシリコン上のベンゾフェノンの吸着状態と電子状態を明らかにする。

6. RICC の継続利用を希望の場合は、これまで利用した状況 (どの程度研究が進んだか、研究においてどこまで計算出来て、何が出来ていないか) や、継続して利用する際に行う具体的な内容

現在、ソフトの使い方を学びながら、シリコン清浄表面やベンゾフェノンの構造、および電子状態を密度汎関数を用いて計算している。今後、シリコン清浄表面の構造と電子状態を計算し、既報の成果を再現した後、未知の系であるシリコン上のベンゾフェノンの吸着状態と電子状態を明らかにする。

7. 一般利用で演算時間を使い切れなかった理由

簡易利用のため記述せず

8. 利用研究成果が無かった場合の理由

まだソフトの使い方を学んでいる段階であり、今後成果を挙げていく予定である