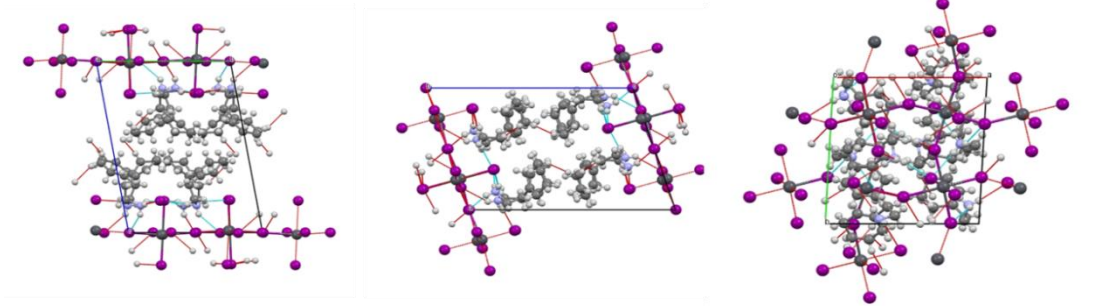


量子化学計算による材料設計

近年のパソコンの性能の向上により研究室レベルでも量子化学計算が容易に行えるようになってきました。計算法も年々進歩してきており、密度汎関数法での計算が一般的になってきています。これらの計算は材料設計において非常に有用であり、実験研究を効率的に進めるために有用な手段になってきています。例として、発光デバイスに用いられたヨウ化鉛系層状ペロブスカイトのバンド構造の計算結果を示します。この結果より、この物質は、層構造の面内方向の電子及びホールの有効質量がほぼ 0.2 と非常に小さいことがわかりました。これから、この物質が面内方向に高いキャリア輸送性を有する可能性が示されたわけです。この結果に基づいて、この材料の移動度測定や高移動度を利用した新しいデバイス提案に向けた研究を開始しています。図 1 はこの材料の結晶構造、図 2 にバンド構造を示します。



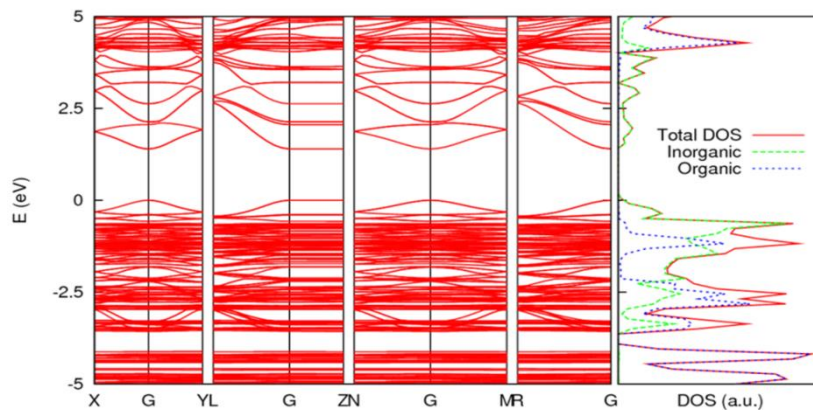
Space group : P-1

Triclinic ; a = 1.2172 nm, b = 1.2264 nm, c = 1.8014 nm

$\alpha = 80.652^\circ, \beta = 72.469^\circ, \gamma = 89.975^\circ$

図 1 ヨウ化鉛系層状ペロブスカイトの結晶構造 (有機層はシクロヘキセニルアミン)

Band structure and DOS of CHEPI



$$m_h = 0.25810, 0.27389 \quad (597.16384)$$
$$m_e = 0.17288, 0.19811 \quad (1636.64060)$$

図 2 ヨウ化鉛系層状ペロブスカイトのバンド構造