

**科学研究費助成事業 研究成果報告書**

平成 29 年 6 月 26 日現在

機関番号：18001

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2014～2016

課題番号：26810009

研究課題名(和文) 精密な構造決定・バンド計算による有機結晶でのキャリア輸送の理論的研究

研究課題名(英文) Theoretical study on the carrier transport properties of organic crystals based on the precise determination of the crystal geometry and the band structure

研究代表者

柳澤 将 (YANAGISAWA, Susumu)

琉球大学・理学部・准教授

研究者番号：10403007

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,200,000円

研究成果の概要(和文)：有機半導体結晶でのキャリア移動の性質を支配する物理的・化学的要因を理解することを目標に、高精度な非経験的電子状態計算による理論的研究を行なった。近年提案された、分子結晶中の分子間力を記述可能な理論計算を用い、実験的に注目の高い有機結晶の構造を理論的に高精度で決定できた。予測された結晶構造下で、構造パラメータと電子状態との関係を詳細に検討し、結晶中のキャリア移動の性質を支配する構造パラメータを明らかにできた。

結晶に注入されるキャリアのエネルギー準位を高精度に再現することで、キャリアのエネルギー準位を支配する構造的要素についての知見を得ることができた。

研究成果の概要(英文)：To obtain the insights on the physical or chemical origins dominating the carrier transport properties in organic semiconductors, first-principles electronic structure calculations of organic molecular crystals were performed. With the recently proposed theoretical method accurately determining the intermolecular forces in molecular solids, we accurately predicted the lattice constants and the molecular configuration of the typical organic solids. We indicated the structural parameters dominating the carrier transport, through the examination of the impact of the geometrical parameters upon the electronic structure. We applied the accurate theoretical method for determination of the quasiparticle energies of the injected hole or electron, and clarified the geometrical factors dominating the energy levels of the injected charge.

研究分野：物理化学、物性物理、量子化学

キーワード：有機半導体結晶 分子間力 飛び移り積分 キャリア輸送 結晶構造 バンド構造 ファン・デル・ワールス力 GW近似

## 1. 研究開始当初の背景

有機物からなる電子デバイスは、既存の無機半導体に比べ、印刷工程で安価に作成可能、材料が柔軟、などの特長があり、研究開発が盛んである。しかしながら、材料に注入されるキャリア（電子・正孔）の輸送される機構が無機半導体に比べ、明らかではない。

有機分子の結晶では、注入キャリアは一方の分子に局在するパイ電子雲から他の分子のパイ電子雲へホッピング機構で移動し、無機半導体のように結晶中に広がった電子雲の中をキャリアが移動するよりも移動度は著しく低いと考えられてきた。

しかし近年、ルブレンなどの有機半導体の結晶が無機半導体に匹敵する正孔キャリア移動度が測定され、有機半導体でも、結晶中に広がる電子雲を介した輸送の機構が関与する可能性が示された。しかし、非局在性に反し、室温では分子間をキャリアが飛び移る輸送が支配的、とする研究もある。

このようなキャリアの輸送の理解には、局在・非局在の両方の効果を考慮した、実験結果のパラメータを用いない理論計算（第一原理計算）での解析が必要である。これまで、標準的な第一原理計算でルブレン単結晶のキャリア輸送が研究され、実験と整合する結果を得た。一方、有機結晶では一般に分子間の相互作用が弱く、孤立単分子やダイマーの第一原理計算のみからキャリア移動度をよく予測できるという研究もある。モデルや方法論によって異なった結論となるのが現状であり、高精度でモデルに依存しない理論計算による統一的解釈が求められる。

研究代表者は近年、固体中の荷電粒子を精密に記述する第一原理計算(*GW* 近似)で、ルブレン単結晶の価電子・伝導帯の構造を予測した。その結果、有効正孔質量を従来の計算よりも実験値に近く再現し、結晶中の異方的な波動関数の混成の役割を指摘した。

本研究ではこの *GW* 近似を中心に用い、有機結晶の構造と、その構造下での電子状態を高精度に再現し、実在物質系での昇温や構造欠陥などの効果も議論しながら、キャリア輸送を支配する要因の理解を目指す。

## 2. 研究の目的

本研究では、次の問題、すなわち

- ・モデル式なしの第一原理の範囲で、どの程度正確に有機結晶中のキャリア輸送を記述できるのか？結晶構造はキャリア輸送にどのような影響を与えるか？
- ・第一原理計算による理論値が室温の実験値を再現することもあるが、実験結果と一致しない時もあり、どのような効果がキャリア輸送を支配するのか？

に答えることを目的に、次の研究を進める。

- (1) 絶対零度下で、構造欠陥の影響のない、有機半導体固有の電子状態・キャリア輸送の精密評価
- ① 分子間力を考慮した第一原理計算による、

## 結晶構造の精密予測

- ② 高精度バンド計算(*GW* 近似)による、バンド構造や有効質量・キャリア移動度の評価

本研究では有機結晶を形成する分子間力を効率良く正確に再現可能な第一原理計算法を用い、格子定数と格子内の原子位置を正確に決定する。従来の研究では、実験値の結晶構造、または孤立分子やその二量体モデルを考慮するにとどまっていた。結晶内の分子間相互作用をすべて精密に記述し、一見微弱な相互作用が、どのように価電子帯・伝導帯(バンド)構造やキャリア輸送に影響するかを検討する。

物性研究で広く使われる標準的な第一原理計算法(密度汎関数理論;*DFT*)は様々な物性の解釈に寄与してきたが、1電子有効ポテンシャルによる近似汎関数のため、半導体・絶縁体のバンド構造の評価では、定量的・定性的に問題のあることが少なくない。*GW* 近似は、固体中の多体電子の効果を取り込み、光電子分光の実験での光電子(準粒子)を物理的に正しく記述する。この高精度化で、実験と定量的に一致するだけでなく、特に分子性結晶では構成分子の間での波動関数の混成がバンド構造やキャリア輸送にどう影響するか議論できる。さらに計算結果を実験結果と比較し、その差異として現れる、計算に入らない効果(結晶の熱膨張や電子-振動相互作用など)の大きさを評価し、そのバンド構造やキャリア輸送への影響を議論する。このような計算を、ルブレンをはじめ、ペンタセン、ピセン、フタロシアニンなど代表的な有機単結晶に展開する。

- (2) 有機材料の電子的性質を、実験では観測できない波動関数の描像から理論的に明らかにし、従来の無機半導体の概念と異なる新たな基礎学理に貢献する。

固体・結晶中では一般に波動関数は遍歴し、理論研究で電荷密度や波動関数の空間分布が精査されることは多くない。しかし有機半導体では、一般に分子同士の結合は弱く、波動関数も元々の分子軌道の特徴を残すため、電子状態の理解には、実験で直接観測できない波動関数の空間分布の再現が極めて有効である。本研究で中心的に用いる計算プログラム *STATE* は、汎用プログラムでは容易でない、結晶の波動関数の空間分布の再現を得意とし、海外の競合グループに対しても独自の研究を展開できる。

有機半導体の電子状態の実験研究は国内で歴史と実績を誇る分野であり、近年は単結晶・薄膜の高分解能の紫外光電子分光(*UPS*)やキャリア移動度測定、高分解能角度分解 *UPS* などが世界に先駆けて展開されている。いずれの成果も理論的解釈が求められており、本研究はそれら実験成果との融合から日本を発信源とする有機半導体の新しい基礎学理の発信に貢献できる。

### 3. 研究の方法

ルブレン、ペンタセン、ピセン、フタロシアンニンなどの代表的な有機単結晶を対象に、分子間力を考慮した結晶構造の精密決定を中心に進める。その構造下でのバンド構造を標準的な第一原理計算で評価する。計算プログラムは、上述の STATE プログラムコードや、分子間力を考慮した格子体積の決定にすぐれた VASP プログラムコードを使用した。

計算結果を、対応する実験結果や従来の理論計算と比較し、結晶中の分子間相互作用によって、バンド構造やキャリア移動度がどう変化するかを詳細に調べる。分子間相互作用の強さや、相互作用の結晶中での異方性を検討し、結晶中のキャリア輸送の性質が昇温などの現実的条件でどう変化するか検討する。遍歴電子雲による輸送（バンド伝導）、または、電子状態と格子振動（フォノン）の結合に支配される輸送（ホッピング・ポーラロン伝導）のどちらの性質が支配的かを議論する。

研究代表者は、以前から有機結晶や有機/金属界面の計算シミュレーションを進め、研究室の標準的な PC クラスタでも高精度・高効率に有機結晶の計算が可能なプログラムに習熟してきた。まず、手元の PC クラスタでの準備計算を出発点に、対象とする有機結晶の計算を進める。

計算で得られた結晶構造の下で、高精度なバンド計算 (*GW* 近似) を行なう。このシミュレーションにより、温度や構造欠陥の影響のないバンド構造やキャリア移動度について、先例のない高精度な理論値を得る。この計算結果に対応する実験結果との比較から、キャリア輸送の性質や、結晶の熱膨張や格子振動の影響の大きさについて議論する。

研究代表者が近年報告したルブレン単結晶のバンド計算では、*GW* 近似によって、標準的な DFT 計算よりも大きな価電子帯幅を与えたが、その理由として、結晶中の特定の方向に異方的に分子間の波動関数に混成があることを指摘した。この知見に基づき、結晶でのキャリア輸送の性質を、波動関数の特徴と関連づけ議論を深めていく。

*GW* 近似の計算は、標準的な第一原理計算に比べ、必要計算時間・資源が膨大である。研究代表者は、数年前から *GW* 近似の計算プログラムを、スーパーコンピュータでの大規模並列計算に向け整備・拡張しており、結果、本研究対象の有機結晶での計算実行の目処がたった。

*GW* 近似プログラムと、その前処理のために STATE プログラムを大規模に実行する必要があるため、所属研究室外の大規模計算機を使用する。そのような計算機は一般に混むため、必要計算時間の見積もりなどの十分な準備・テストが必要である。そのテストを、本研究計画を進めながら並行して行う。東北大学サイバーサイエンスセンター (CC) と共同研究を進め、同センターの大規模計算機を比較的安価で使用する。

### 4. 研究成果

#### (1) 金属フタロシアンニンにおける、結晶構造とバンド構造の関係

有機結晶中の分子間力を考慮した結晶構造の理論予測を、有機太陽電池の材料として注目される亜鉛フタロシアンニン (ZnPc) について進めた。実験的に Au 基板上的薄膜で見られる  $\alpha$  多形 ( $\alpha$ -ZnPc) は、格子定数が実験的に決まっていない。そこで、分子間力を考慮し、格子定数を理論的に決めた。計算には、研究協力者が開発した密度汎関数 (vdW-DF) を用いた。vdW-DF を用いた結果、最安定な  $\beta$  多形で、格子定数を 1% 以内の誤差で再現した。準安定な  $\alpha$ -ZnPc について、計算での最適化構造のもと、最大占有 (HOMO) バンドの幅は 64 meV と予測され、低温での薄膜の実験値 (92 meV) に近くなった。*GW* 近似を適用すると、77 meV と、さらに実験値に近い数値を得た。

このようなバンド幅がどのような分子間の軌道相互作用で決まるかについて洞察を得るため、遍歴する電子波をユニタリ変換し、結晶中の分子を中心に局在する波 (ワニエ関数) を定義して、分子間の飛び移り積分を評価した。

得られた平衡構造付近で格子定数を 0.01 nm 程度ずらすと、バンド幅を支配する第一近接・第二近接分子間の飛び移り積分は数 10 meV のオーダーで変化した。このように、構造変化にともなって数 ~ 10 meV 程度のオーダーでバンド幅が変化するのは、分子軌道間の相互作用が、結合性・反結合相互作用のせめぎ合いで決まっているためであることが分かった。

分子間力を考慮した結晶構造の精密決定が電子状態の再現・予測において重要であることが分かり、一般に、そのような微妙なエネルギーオーダーによって、キャリア移動の性質が左右されるのが分かった [S. Yanagisawa et al., Phys. Rev. B **90**, 245141 (2014)]。

#### (2) ピセン単結晶における、高精度なバンド構造の予測。

有機半導体材料としてや、超伝導の性質などで注目される、ペンタセンの構造異性体であるピセンの単結晶について、実験値の格子定数下で、*GW* 近似によるバンド構造の予測に成功した。得られたバンド構造によって、特定の結晶軸方向に異方的に正孔の有効質量が軽くなるのが確かめられた。その起源として、ルブレン単結晶と同様、対応する方向に分子軌道間相互作用が強くなっていることが分かった。

室温下でのバンド分散の実験値と比較すると、本計算ではバンド幅の異方性を定性的に再現された。しかし、定量的には、バンド幅の実験値は、本計算での数値よりも一般にかなり小さく、理論的に再現されるバンドは、実験では分裂してしまっている様子も確認された。

このことから、ピセンではルブレンと違って室温付近でもバンド構造に電子-振動結合が少なからず影響し、キャリア伝導の性質も、室温下にてルブレンで指摘されたバンド伝導的描像と違う可能性がある、ことが示唆される [S. Yanagisawa et al., Jpn. J. Appl. Phys. **53**, 05FY02 (2014)]。

(3) オリゴアセン結晶での分子間力を考慮した結晶構造の決定と、結晶構造とバンド構造の関係に関する検討

5種類のオリゴアセン結晶（ベンゼンからペンタセン）について、ファン・デル・ワールス密度汎関数 (vdW-DF) によって構造最適化計算を行なった。可能な限り計算の収束性を高めることにより、同汎関数によって有機半導体結晶の構造や、結晶多形の安定性を高い信頼性で予測できることを確認した [S. Yanagisawa et al. J. Electron Relat. Phenom. **204**, 159 (2015); S. Yanagisawa and I. Hamada, J. Appl. Phys. **121**, 045501 (2017)]。

そのように精密に決定した結晶構造に対して、状態密度やバンド構造を  $GW$  近似で正確に評価することにより、低温の紫外光電子分光の状態密度の実験値とよく一致した。従来の精度の劣る計算法では再現のできなかった、結晶多形の違いによるバンド構造・バンドギャップの変化や、振動効果の考慮の有無による格子の熱膨張の影響も再現することができた [S. Yanagisawa and I. Hamada, J. Appl. Phys. **121**, 045501 (2017)]。この結果は、有機結晶における有限温度下での振動や熱膨張の効果についての洞察を与えるものである。

(4) 結晶中の分極エネルギーと、その分子配向依存性

有機半導体結晶中への注入電荷（電子・正孔）は、周囲の電子雲が反対符号に動的に荷電（動的に分極）することで安定化される。この効果は  $GW$  近似で記述可能であり、典型的な有機半導体 (Bathocuproine; BCP) で検証したところ、注入準位は、孤立分子と比べてそれぞれ 1 eV 以上も安定化されることを確かめた。定量的にも光電子・逆光電子分光による薄膜試料の実験結果と一致した [S. Yanagisawa et al., J. Chin. Chem. Soc. **63**, 513 (2016)]。

実物質系では、光電子分光の測定は試料表面に対して行われ、実験値は、表面にいる分子の配向に依存すると考えられる。実際、表面の分子配向に依存した四極子能率に由来する静電ポテンシャルが注入準位をシフトさせる、と理論的または実験的に提案されており、固体中の多体電子の性質に由来する動的分極の効果と合わせて、表面の分子配向に依存した電荷注入準位の再現が可能である。

そのような検証を、ペンタセンの薄膜について行なった。実験的に知られる結晶多形の表面を周期的スラブモデルで再現し、気相とのエネルギー準位の相違から、表面に依存す

る静電ポテンシャルの変化 ( $W_{es}$ ) を見積もった。それとともに、主に結晶・バルクの状態に由来すると考えられる動的分極の効果 ( $P$ ) も計算し、気相と結晶のエネルギー準位の違い (分極エネルギー) を  $P + W_{es}$  として見積もった。このような見積もりによって、分極エネルギーの面方位依存性を、実験値に整合して再現できることが確かめられた [S. Yanagisawa, AIP Conference Proceedings, *in press*]。

(5) 実験グループとの共同研究の成果

実験家による実験的観測の原理・機構の解明に理論計算によって寄与するための研究も進めた。

銀結晶表面上のピセン分子膜の吸着配置について、分子が面に対して平行、または、やや傾くことにより、複数の吸着配置のドメインが現れることが、走査トンネル顕微鏡・分光 (STM・STS) の実験で示唆された。その解釈のため、実際に第一原理計算によって、銀表面上にファン・デル・ワールス力で吸着する分子の配向を再現し、各配向での分子の電荷注入準位の変化を精査した。その結果、表面上の分子配向に依存する吸着ドメインの表面からの高さの変化に加え、分子と銀表面間での電荷密度の再配向の効果で、分子の準位が変化することが分かり、STM・STS のドメイン依存性を説明することができた [Y. Yoshida et al., J. Chem. Phys. **141**, 114701 (2014)]。

金属表面上の Diindenoperylene (DIP) の分子膜において、DIP と金属基板間の吸着相互作用により、DIP のパイ電子共役系に新たに共鳴安定化がもたらされることが、高分解能紫外光電子・逆光電子分光によって示唆された。第一原理計算で検討した結果、分子-基板間の電荷移動によって DIP 分子骨格の変化が誘起されることが分かった。このような、表面上で誘起されるパイ共役系の安定化 (SIAS) は、反応性の高いヘテロ原子の分子骨格への導入によってもたらされると提案されていたが、この研究によって、SIAS がそのようなヘテロ原子の導入がなくても、分子-基板間相互作用に由来する分子構造のわずかにひずみでも誘起されることが初めて示された [K. Yonezawa et al., Appl. Phys. Exp. **9**, 045201 (2016)]。

有機電界効果トランジスタ (OFET) の実用化に向け、高キャリア移動度の実現が不可欠である。有力な有機材料として、安価な印刷的処理による処理のみで成膜可能な、長い炭化水素骨格にヘテロ原子からなる環状構造をもつ分子が知られるが、塗布した薄膜をわずかにひずませるだけで、移動度が 70% も向上することが実験的に確かめられた。この移動度向上の起源を確かめるため、同一の材料の結晶構造を第一原理計算で正確に決定し、その構造下でのバンド構造とキャリア移動度の評価を行なった。その結果、移動度の向上は、分子への応力によって分子振動が抑制

されることでキャリアの散乱も抑えられることによって起こることが明らかになった [T. Kubo et al., Nat. Commun. 7, 11156 (2016)].

#### (6) まとめ

以上、第一原理計算によって有機結晶の格子定数・分子配置を、分子間力を考慮して正確に決定し、その構造下でのバンド構造も精密に評価することで、構造とキャリア移動の性質の関係について議論してきた。その結果、第一原理バンド計算によって、キャリア移動に影響のある構造的要因を指摘することができた。また、有限温度下での実物質系におけるキャリア移動の支配要因について、電子-格子振動結合などの重大な影響について洞察を得ることができた。結晶中のキャリア移動の性質に加え、表面からのキャリア注入準位への構造・分子配向の影響も理論的に検証することができた。また、本研究で用いた高度な構造決定法により、よく規定された実験結果の機構の説明に寄与することができた。

本研究での知見をもとに、今後は、有限温度下でバンド構造・電子状態の再現や、それに基づくキャリア輸送シミュレーションの確立を進めることで、有機半導体における、より現実的な電子物性の評価を展開したいと考える。

#### 5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計9件)

- ① S. Yanagisawa, “Theoretical determination of the ionization potential and the electron affinity of organic semiconductors”, AIP Conference Proceedings, 査読有, 掲載決定
- ② S. Yanagisawa and I. Hamada, “Determination of geometric and electronic structures of organic crystals from first-principles: Roles of the molecular configuration on the electronic structure”, Journal of Applied Physics, 査読有, Vol. 121, No. 4, 2017, pp. 045501-1-10, DOI: 10.1063/1.4974844
- ③ T. Kubo, R. Häusermann, J. Tsurumi, J. Soeda, Y. Okada, Y. Yamashita, N. Akamatsu, A. Shishido, C. Mitsui, T. Okamoto, S. Yanagisawa, H. Matsui, and J. Takeya, “Suppressing molecular vibrations in organic semiconductors by inducing strain”, Nature Communications, 査読有, Vol. 7, 2016, pp. 11156-1-7, DOI:10.1038/ncomms11156
- ④ K. Yonezawa, Y. Suda, S. Yanagisawa,

T. Hosokai, K. Kato, T. Yamaguchi, H. Yoshida, N. Ueno, and S. Kera, “Charge transfer states appear in the  $\pi$ -conjugated pure hydrocarbon molecule on Cu(111)”, Applied Physics Express, 査読有, Vol. 9, No. 4, 2016, pp. 045201-1-4, DOI:10.7567/APEX.9.045201

- ⑤ S. Yanagisawa, S. Hatada, and Y. Morikawa, “Theoretical Study on Electronic Structure of Bathocuproine: Renormalization of the Band Gap in the Crystalline State and the Large Exciton Binding Energy”, Journal of Chinese Chemical Society, 査読有, Vol. 63, No. 6, 2016, pp. 513-520, DOI:10.1002/jccs.201500379
- ⑥ S. Yanagisawa, K. Okuma, T. Inaoka, and I. Hamada, “Recent progress in predicting structural and electronic properties of organic solids with the van der Waals density functional”, Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena, 査読有, Vol. 204, 2015, pp. 159-168, DOI:10.1016/j.elspec.2015.04.007
- ⑦ S. Yanagisawa, K. Yamauchi, T. Inaoka, T. Oguchi, and I. Hamada, “Origin of the band dispersion in a metal phthalocyanine crystal”, Physical Review B, 査読有, Vol. 90, No. 24, 2014, pp. 245141-1-6, DOI:10.1103/PhysRevB.90.245141
- ⑧ Y. Yoshida, H.-H. Yang, H.-S. Huang, S.-Y. Guan, S. Yanagisawa, T. Yokosuka, M.-T. Lin, W.-B. Gu, C.-S. Chang, G. Hoffmann, and Y. Hasegawa, “Scanning tunneling microscopy/spectroscopy of picene thin films formed on Ag(111)”, Journal of Chemical Physics, 査読有, Vol. 141, No. 11, 2014, pp. 114701-1-8, DOI:10.1063/1.4894439
- ⑨ S. Yanagisawa, Y. Morikawa, and A. Schindlmayr, “Theoretical investigation of the band structure of picene single crystals within the  $GW$  approximation”, Japanese Journal of Applied Physics, 査読有, Vol. 53, No. 5S1, 2014, pp. 05FY02-1-6, DOI:10.7567/JJAP.53.05FY02

[学会発表] (計9件)

- ① 柳澤 将、有機半導体のイオン化ポテンシャル・電子親和力に関する第一原理計算による研究、第64回応用物理学会春季学術講演会、2017年3月14~17日、パシフィコ横浜 (神奈川県横浜市)

- ② 柳澤 将、濱田幾太郎、第一原理計算による有機半導体の構造と電子状態の精密計算、第 77 回応用物理学会秋季学術講演会、2016 年 9 月 13～16 日、朱鷺メッセ（新潟県新潟市）
- ③ 柳澤 将、有機結晶・会合体における分子軌道間相互作用の電子構造への影響に関する理論的研究、第 4 回 CUTE シンポジウム：コンピュータ化学「京コンピュータと理論化学」（招待講演）、2016 年 6 月 16 日、三重大学新産業創成研究拠点（三重県津市）
- ④ S. Yanagisawa, S. Hatada, and Y. Morikawa, “Theoretical Study on Electronic Structure of Bathocuproine: Renormalization of the Band Gap in the Crystal and the Large Excitation Binding Energy”, APS March Meeting 2016, 2016 March 14-18, Baltimore (MD, USA)
- ⑤ S. Yanagisawa, “First-principles investigation on the electronic states of the organic single-crystals and the organic-metal interfaces: importance of accurate prediction of the crystal and the interface structures” (Invited Talk), OIST seminar, 2015 December 15, Okinawa Institute of Science and Technology (OIST), Okinawa (Japan).
- ⑥ 川那辺剛、柳澤 将、稲岡 毅、グラフアイト表面に吸着したペンタセン分子膜の電子状態に関する理論的研究、日本物理学会 2015 年秋期大会、2015 年 9 月 16～19 日、関西大学（大阪府吹田市）
- ⑦ 柳澤 将、山内邦彦、稲岡 毅、小口多美夫、濱田幾太郎、金属フタロシアニン結晶でのバンド分散の起源に関する理論的研究、日本物理学会第 70 回年次大会、2015 年 3 月 21～24 日、早稲田大学・早稲田キャンパス（東京都新宿区）
- ⑧ K. Okuma, S. Yanagisawa, K. Yamauchi, T. Inaoka, T. Oguchi, and I. Hamada, “Theoretical study on the cohesive properties of organic solids with the van der Waals density functional”, The 9th General Meeting of ACCMS-VO, 2014 December 20-22, Okinawa Institute of Science and Technology (OIST), Okinawa (Japan).
- ⑨ S. Yanagisawa, “Theoretical investigation of the impact of the intermolecular interaction on the electronic structures in organic semiconductors” (Invited Talk), International Workshop of Computational Nano-Materials Design on Green Energy, Osaka University, and S-1 International Workshop of Computational Nano-Materials Design on Green Energy, 2014 June 1-3,

Osaka University, Toyonaka, Osaka (Japan).

※（他 5 件）

〔図書〕（計 0 件）

〔産業財産権〕

○出願状況（計 0 件）

○取得状況（計 0 件）

〔その他〕

琉球大学研究者データベース

<http://kenkyushadb.lab.u-ryukyu.ac.jp/profile/ja.qZtdh4hR6RiaH1eRvB2gfw==.html>

Google Sites

<https://sites.google.com/site/syanagisawaunivoftheyukyus/home-japanese>

ResearchGate

[https://www.researchgate.net/profile/Susumu\\_Yanagisawa](https://www.researchgate.net/profile/Susumu_Yanagisawa)

## 6. 研究組織

### (1) 研究代表者

柳澤 将 (YANAGISAWA, Susumu)

琉球大学・理学部・准教授

研究者番号：10403007

### (2) 研究分担者 なし

### (3) 連携研究者 なし

### (4) 研究協力者

濱田 幾太郎 (HAMADA, Ikutaro)

物質・材料研究機構・エネルギー・環境材料研究拠点・主任研究員

研究者番号：80419465

森川 良忠 (MORIKAWA, Yoshitada)

大阪大学・大学院工学研究科・教授

研究者番号：80358184