

大規模第一原理電気伝導計算による有機デバイスの理論

Theory of organic devices

by large-scale first-principles charge transport calculations

小林伸彦

筑波大学 数理物質系 理工学域

1. 研究目的

大規模第一原理電気伝導計算理論を用いて次世代電子デバイスとして期待される有機半導体の理論設計を行う。この手法は1億個の原子・分子系に対し、量子論に基づき原子スケールから第一原理に基づき伝導特性を明らかにできる独自の計算理論である。これを基礎として、構造が柔軟・フレキシブルで環境に優しい高性能有機単結晶薄膜トランジスタの伝導特性の解析予測を行い、実験研究者と連携してデバイス作成評価と予測材料の検証を行うとともに、究極の高移動度キャリア伝導を実現するための材料・デバイス理論設計を行う。

2. 研究成果の内容

独自に開発してきた大規模電気伝導理論を用いて、有機デバイスの新材料の理論設計、性能予測を行った。特に、他の方法論で不可能な第一原理による超大規模原子系の伝導特性計算を実証してきた。キャリア輸送理論、デバイス性能予測に構造解析を連動させ、新材料に対する有機半導体設計、デバイス性能予測を行うとともに、デバイス実験研究者の新材料合成評価によって、新規高性能材料の理論設計を展開した。特に、分子の化学構造式から単結晶有機半導体の移動度を予測するシミュレーションに成功し、論文発表を行った。これにより、有機半導体の材料開発を効率化することができ、新規材料開発の加速化が期待される。また、筑波大学で開発整備を行ってきた第一原理電気伝導計算プログラム Simulation code for Atomistic Kohn–sham Equation (SAKE)に関する論文も公表した。

3. 学際共同利用が果たした役割と意義

電子・格子相互作用の解析などにおいて効率的な並列計算の実施により詳細な理論設計が可能となった。また、第一原理電気伝導計算プログラム開発整備の拠点として学際共同利用の果たした意義が大きい。

4. 今後の展望

従来型の輸送理論解析手法では困難であった有機半導体の高精度な移動度予測が行え、分子の化学構造式から単結晶有機半導体の移動度を予測が可能である。今後、この手法を

基にさまざまな有機半導体材料の設計、性能予測が行われる。

5. 成果発表

(1) 学術論文

- [1] Y. Kuroda, H. Ishii, S. Yoshino, N. Kobayashi, Second highest occupied molecular orbital effects on the valence band structure of organic semiconductors, *Jpn. J. Appl. Phys.* 58 SIIB27 (2019)
- [2] H. Ishii, N. Kobayashi, and K. Hirose, Carrier transport calculations of organic semiconductors with static and dynamic disorder, *Jpn. J. Appl. Phys.* 58, 110501 (2019).
- [3] H. Ishii, S. Obata, N. Niitsu, S. Watanabe, H. Goto, K. Hirose, N. Kobayashi, T. Okamoto, and J. Takeya, Charge mobility calculation of organic semiconductors without use of experimental single-crystal data, *Sci. Rep.* 10, 2524 (2020)
- [4] H. Takaki, N. Kobayashi, K. Hirose, SAKE: First-principles electron transport calculation code, *J. Phys.: Condens. Matter* 32 325901 (2020).

(2) 学会発表

N. Kobayashi, Workshop on Advances in Solid State Chemistry and Physics & Nanoscience for Energy Harvesting Technologies 2019/9/27-28, Tsukuba (Invited).

使用計算機	使用計算機 に○	配分リソース※	
		当初配分	追加配分
Cygnus	○	1000	
Oakforest-PACS	○	20000	
※配分リソースについてはノード時間積をご記入ください。			