

大規模第一原理電気伝導計算による電子デバイスの理論

Theory of electronic 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

第一原理電気伝導計算理論を基に、熱電デバイスや有機トランジスタの理論設計を行う。1 億個の原子・分子系に対し、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を開発するとともに、非平衡グリーン関数法と密度汎関数理論の融合による電気伝導計算プログラムパッケージを開発してきた。これを用いて筑波大学計算科学研究センターを拠点として研究の展開を行う。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進め、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。また、熱を電気に変換する高効率な熱電変換材料の理論設計を行う。

2. 研究成果の内容

独自に開発してきた大規模電気伝導計算理論を用いて、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、従来型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行った。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を行うとともに、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を行った。また、第一原理電気伝導計算プログラム Simulation code for Atomistic Kohn–sham Equation (SAKE) の整備も進め、分子の電気伝導とその構造依存性、磁性半導体の電子状態、磁性状態、熱電特性評価を行った。不純物濃度による特性変化を明らかにし、最適化設計を行った。

3. 学際共同利用が果たした役割と意義

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高移動度有機半導体の高精度な移動度予

測によりさまざまな有機半導体材料の設計、性能予測を行うことができる。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、熱電特性の解析により、高性能熱電材料開発のための理論設計が期待される。

5. 成果発表

(1) 学術論文

- [1] 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)
- [2] 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

- [1] N. Kobayashi, Theory of organic devices by large-scale first-principles charge transport calculations, 12th symposium on Discovery, Fusion, Creation of New Knowledge by Multidisciplinary Computational Sciences, online, 2020/10/6

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。			