

## 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 物理工学域

#### 1. 研究目的

申請者が筑波大学で開発してきた第一原理電気伝導計算理論を基に、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として SAKE (Simulation code for Atomistic Kohn sham Equation) を開発してきた。また、機械学習や理論計算による一分子からの有機結晶の構造予測法も開発した。筑波大学計算科学研究センターを拠点としてこれらを用いた研究の展開を行う。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。

#### 2. 研究成果の内容

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。従来型の方法論で不可能な第一原理による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て新材料に対する有機半導体設計を行うために、結晶構造予測法を発展させた。単一分子構造式の情報のみから、多形を含めた有機結晶構造を予測する方法を開発し、結晶構造、原子座標、伝導特性を求めることができることを実証し、応用した。有機半導体材料に応用してきた機械学習による構造設計理論を応用して、高性能電子デバイス開発を加速するための設計理論を発展させた。さらに、高密度キャリアドーピングによる金属転移後の電子相関効果が発達するようすを解析し、相図を作成した。JST 戦略的創造研究推進事業の支援を受け、実験グループと共同して、理論設計、合成、応用の研究を進めている。

#### 3. 学際共同利用プログラム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、新規に開発した結晶構造予測法との連携によりさまざまな有機半導体材料の設計、性能予測が可能で、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。これらの手法を基に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っている。

5. 成果発表

(1) 学術論文

- 1) N. Kasuya, T. Furukawa, H. Ishii, N. Kobayashi, K. Hirose, H. Takayanagi, T. Okamoto, S. Watanabe, and J. Takeya,  
*Nat. Commun.* 16 3214 (2025)

使用計算機	使用計算機に○	配分リソース※		
		当初配分	移行*	一般利用による追加
Pegasus	○	2800		
Miyabi-G	○	9450		
Miyabi-C	○	1800		
※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。 *バジェット移行を行った場合、「+2000」「-1000」のように記入				