

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

代表者氏名 小林伸彦

所属 筑波大学数理物質系

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高性能化のための理論設計を行う。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時間依存波束拡散伝導法を用いて有機半導体の輸送特性計算を行い、実験データと比較検証を行ってきた。この方法ではキャリアの運動を波束として数値的に計算する。様々な波長を有する波を塊にすることで粒子的性質を表すことが可能となり、バンド伝導としての波の性質とホッピング伝導としての粒子の性質を統一的に解析することができる。この数値計算プログラムは計算時間およびメモリー容量が原子数 N に比例するオーダー N 法になっていると同時に高い並列性能を示している。電子格子相互作用を高精度に解析し取り入れることにより輸送特性を定量的に評価することができる。この手法を用いて代表的な有機半導体の輸送特性の解析を行い、実験値との比較を行うとともに、従来型の輸送理論解析手法では困難であった高精度な予測がこの方法により可能になることを実証した。

3. 学際共同利用として実施した意義

高性能な並列計算が実施され、フォノンの並列解析により、電子・格子相互作用の高速かつ高精度な計算が行えることを示すことができ、詳細な理論設計の見通しを得ることができた。

4. 今後の展望

代表的な有機半導体材料に対して、従来型の輸送理論解析手法では困難であった高精度な予測がこの方法により可能になることを示した。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. N. Kobayashi, H. Ishii, K. Hirose, Theory of electron transport at the atomistic level, Jpn. J. Appl. Phys. 57, 08NA01 (2018).
2. H. Ishii, J. Inoue, N. Kobayashi, K. Hirose, Quantitative mobility evaluation of organic semiconductors using quantum dynamics based on density functional theory, Phys. Rev. B 98, 235422 (2018).
3. Y. Wakabayashi, M. Nakamura, K. Sasaki, T. Maeda, Y. Kishi, H. Ishii, N. Kobayashi, S. Yanagisawa, Y. Shimo, Y. Kubozono, Surface Structure of Organic Semiconductor [n]Phenacene Single Crystals, J. Am. Chem. Soc. 140, 14046 (2018).

(2) 著書

1. N. Kobayashi, H. Ishii, K. Hirose, Theory of Electrical Conduction in 3D Local Structure and Functionality Design of Materials, Eds. H. Daimon and Y. C. Sasaki (World Scientific 2019)

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
COMA	○	46000	
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。			