

受付 ID	16a45
分野	物質科学

## 有機半導体の材料設計理論の構築

### Development of Materials Design Theory for Organic Semiconductor

後藤 仁志

豊橋技術科学大学 情報・知能工学系

#### 1. 研究目的

本研究では、新規有機エレクトロニクス材料の研究開発プロセスを加速するために、計算化学と理論物理の分野の研究者が連携して新たな計算科学技術を確立するとともに、実験観測データを活用することによって理論予測精度の向上を図る。さらに、複数の有機材料に対してこれらを適用し、多くの解析データを蓄積することによって、有機半導体の材料設計理論を確立することを目的とする。

#### 2. 研究成果の内容

本研究では、計算機を駆使する計算化学（豊橋技科大）と理論物理（筑波大）、および実験による半導体物性（東大新領域）の各グループが密に連携して研究を推進している。今年度は、計算化学班の結晶多形探索法と理論物理班の第一原理電子状態計算法を COMA に移植し、高速化を図った。移植と高速化が完了した後、半導体物性班が合成している有機結晶の粉末 X 線回折パターンと、結晶多形探索から得られた予測結晶構造のそれを比較する技術の開発を開始した。さらに、既知の有機半導体結晶を対象に、予測結晶構造に対して第一原理計算を適用し、バンド構造解析やキャリア輸送特性解析を行い、理論予測精度を確認した。

ハイブリッド並列性能を最適化するため、まず、ホスト CPU と Xeon Phi によるスレッド並列性能を調べた。結晶多形探索にかかる CPU の 1 core 当たりの計算時間は Xeon Phi のそれよりも約 22 倍高速であることが分かった。実際、Xeon Phi 240 cores で 4.8 秒かかる結晶計算が、CPU 5 cores で 4.2 秒、20 cores で 1.3 秒だった。この結果から CPU のみを使う MPI/OpenMP ハイブリッド並列を採用し、MPI 並列の場合と比較した。前者の方が圧倒的に高い並列性能と効率を示す結果となった（図 1）。

並列性能を確認後、標的有機分子の結晶多

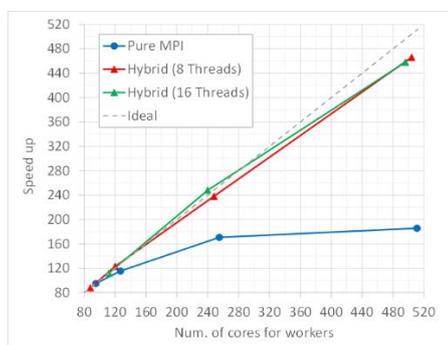


図 1 MPI vs MPI/OpenMP

形探索を行い、実験で得られた粉末 X 線回折パターンを基準にした回折パターン比較アルゴリズムを開発した。現在、粉末結晶中に含まれる複数の結晶構造を高精度に決定できる新しい手法の確立を進めている。

第一原理電子状態計算法の並列性能を確認後、既知の有機半導体結晶のバンド構造解析とキャリア輸送解析を行った。結晶多形探索で予測された結晶構造に対してフォノン解析を適用し、その結果を電子状態計算に取り入れることで、実験によるキャリア移動度を比較的高い精度で再現できることが分かった（共同論文執筆中）。

### 3. 学際共同利用として実施した意義

本研究目標を実現するためには、物性予測（結晶多形探索、結晶構造予測、第一原理電子状態計算、バンド・キャリア解析）にかかる計算時間が、実験（合成、精製、（粉末）結晶化、測定）よりも圧倒的に短時間かつ高精度に完了することが望ましい。今回、実験にかかる時間よりも短時間で物性予測を完了するために必要な計算規模を実践的な意味で見積もることができた意義は大きい。

### 4. 今後の展望

我々の物性予測システムは複数の計算プログラムで構成される。今後は、各プログラムの連携を効率化するとともに、様々な要素技術の改善を進め、システム全体の予測精度の向上を図る。また、計算結果に基づく新規有機材料の実験も進めており、これらの解析データを蓄積し、活用することによって、有機半導体の材料設計理論を確立する。

### 5. 成果発表

#### (1) 学会発表（招待講演）

1. 竹谷純一、「低分子有機半導体物性に関する最近の実験動向」、日本物理学会 2016 年秋季大会 領域 7 シンポジウム「有機半導体の柔らかい固体物理に対する計算科学と実験の最前線」、2016 年 9 月 13 日、金沢大学、13pAJ-2.
2. 後藤仁志、「低分子有機半導体の結晶構造予測」、日本物理学会 2016 年秋季大会、2016 年 9 月 13 日、金沢大学、13pAJ-3.
3. 小林伸彦、「低分子有機半導体のキャリア輸送計算」、日本物理学会 2016 年秋季大会、2016 年 9 月 13 日、金沢大学、13pAJ-4.

使用計算機	使用計算機に○	配分リソース*
HA-PACS		
HA-PACS/TCA		
COMA	○	2700
※配分リソースについては 32node 換算時間をご記入ください。		