

受付 ID	17a35
分野	物質科学

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 carrier transport calculations

小林伸彦
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、高性能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. 研究成果と学際共同利用として実施した意義および今後の展望

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いる。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。電気伝導の一般論として知られる線形応答に基づく久保公式を用いて得られる移動度に対して、キャリア波束の時間に依存した運動座標を計算する。時間発展演算子をチェビシェフ多項式に展開することで高速計算を行う。有機半導体への応用に際し、密度汎関数理論に基づく第一原理計算とともに、時々刻々と変化する柔らかい有機半導体における分子運動を記述する分子動力学計算とを連立させて、キャリアの波束の時間発展計算を行う。これにより原子座標変位を考慮した荷電キャリアに伴う格子歪に伴う電子格子散乱やポーラロン生成、また分子振動の熱揺らぎの効果を取り入れたキャリアの緩和時間・平均自由行程・移動度などが計算される。また結晶構造の乱れを表す不純物散乱やトラップポテンシャル等の様々な散乱を考慮したキャリア輸送機構の解析も行うことができる。これにより、有機半導体の伝導特性におけるバンド伝導型からホッピング伝導型への変化、Holstein型やPeierls型など様々な形態として現れるポーラロン結晶歪を伴った電子格子相互

作用効果の解析が可能となる。これらの計算において、COMA を利用した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。今後、性能予測材料の検証と有機デバイス理論設計を行う。

3. 成果発表

(1) 学術論文

N. Kobayashi, H. Ishii, K. Hirose, Theory of electron transport at the atomistic level, Jpn. J. Appl. Phys. 57 (2018) in press.

(2) 図書

N.Kobayashi, H.Ishii, and K.Hirose, Theory of Charge Transport, Introduction of 3D Active-site Material Sciences, Eds. H. Daimon and Y. Sasaki (World Scientific Publishing, 2018) in press.

(3) 学会発表

1. N. Kobayashi, Theory of charge and heat transport at the atomistic level, 25th International Colloquium on Scanning Probe Microscopy, Atagawa, 2017/12/7-9 (invited)
2. N. Kobayashi, Electrical and thermal transport calculations at the atomistic level, Energy Materials Nanotechnology 2D Materials, Lyon, France, 2017/8/8-12 (invited)
3. 小林伸彦、大規模計算による有機半導体の熱・電荷輸送、日本物理学会第73回年次大会シンポジウム「柔らかな界面における熱・電荷輸送」東理大野田、2018/3/22-25.

(4) その他

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
HA-PACS/TCA			
COMA	○	6000	
Oakforest-PACS	○	25000	
※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。			