

大規模電子状態計算とデータ科学による有機デバイス材料研究

Organic device material research

by large-scale electronic state calculation and data science

鳥取大¹ 東大² 分子研³ 立教大⁴ 東大生研⁵

星健夫¹, 安部友樹也¹, 大平健太郎¹, 福島孝治², 藤田貴敏³, 望月祐志^{4,5}

Tottori U.¹, U. Tokyo², Inst. Mol. Sci.³, Rikkyo U.⁴, Inst. Ind. Sci. U. Tokyo⁵

T. Hoshi¹, Y. Abe¹, K. Oohira¹, K. Hukusima², T. Fujita³, Y. Mochizuki^{4,5}

E-mail: hoshi@damp.tottori-u.ac.jp

大規模電子状態計算とデータ科学を融合することで、非理想構造有機デバイス材料研究を行なった。有機高分子 poly-(phenylene-ethynylene) (PPE)系およびペンタセン/C₆₀ 界面系(予備的結果)を報告する。現実的(工業的)な有機材料系は複雑な乱雑さ(disorder)をもつ非理想構造をとり、デバイス特性につながる系統的・定量的議論が必要となる。筆者らは、京コンピュータを用いた 100 ナノメートルスケール(1 億原子)系の大規模電子状態計算およびキャリア波束ダイナミクス計算[1-3](第一原理に基づく強束縛理論を用いた)、および、エキシトン波束ダイナミクス計算[4,5](フラグメント分子軌道法を用いた)を行っており、発展として本課題に取り組んでいる。高分子系としては、パラ(直線)型およびメタ(ジグザグ)型 PPE1200 原子系 4 万サンプルについて、データ科学(主成分解析)を用いた分類を行なった。記述子としては、各波動関数(固有状態)にたいする広がりを表す Participation Ratio を選んだ[2,3]。これまでに、ベンゼン環同士の 2 面体角の乱雑さが電気伝導(移動度)に重要であるとの指摘がなされており[6]、これをデータ科学的に裏付ける結果を得た(Fig. 1(a))。一方、界面系の予備的結果では、約 50-70 万原子系(例:Fig.1(b))に対して、伝搬関数による伝導経路解析[1,3]が有用と分かった。これらはデバイス特性議論の基礎をなす。謝辞：本研究の一部は井町宏人[3] (現:Preferred Networks Inc.)との議論に基づく。

[1] Hoshi, *et al.*, Proc. ScalA16 in SC16, pp.33-40 (2016). [2] Imachi, *et al.*, ASIAN19, Taiwan, 2016 年 10 月. [3] Imachi, D. Thesis, Tottori U, Mar. 2017. [4] Fujita *et al.*, J. Phys. Chem. Lett. 7, 1374 (2016); 藤田他, 応物, 2017 年 3 月. [5] 星他, 応物, 2017 年 3 月. [6] Terao, *et al.*, Nat. Commun. 4, 1691 (2013).

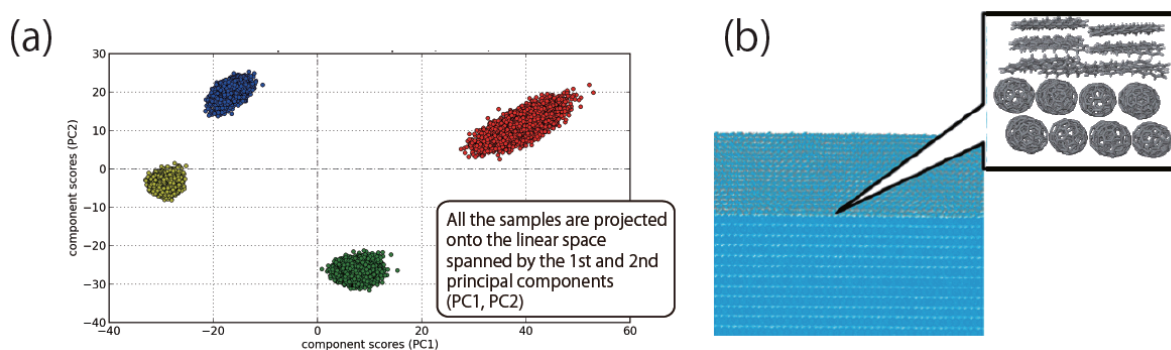


Fig.1 (a) Data science for the classification of disordered 40,000 organic polymers with 1200 atoms. (b) Example of a pentacene/C60 interface model with 600K atoms.