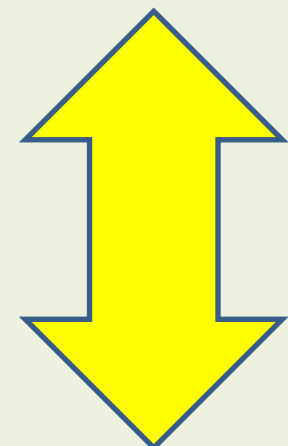


有機電子材料物質の計算シミュレーション

琉球大学理学部 柳澤 将

背景: 有機物のエレクトロニクス

有機物 (例:プラスチック) は、普通、電気を流さない。絶縁体。

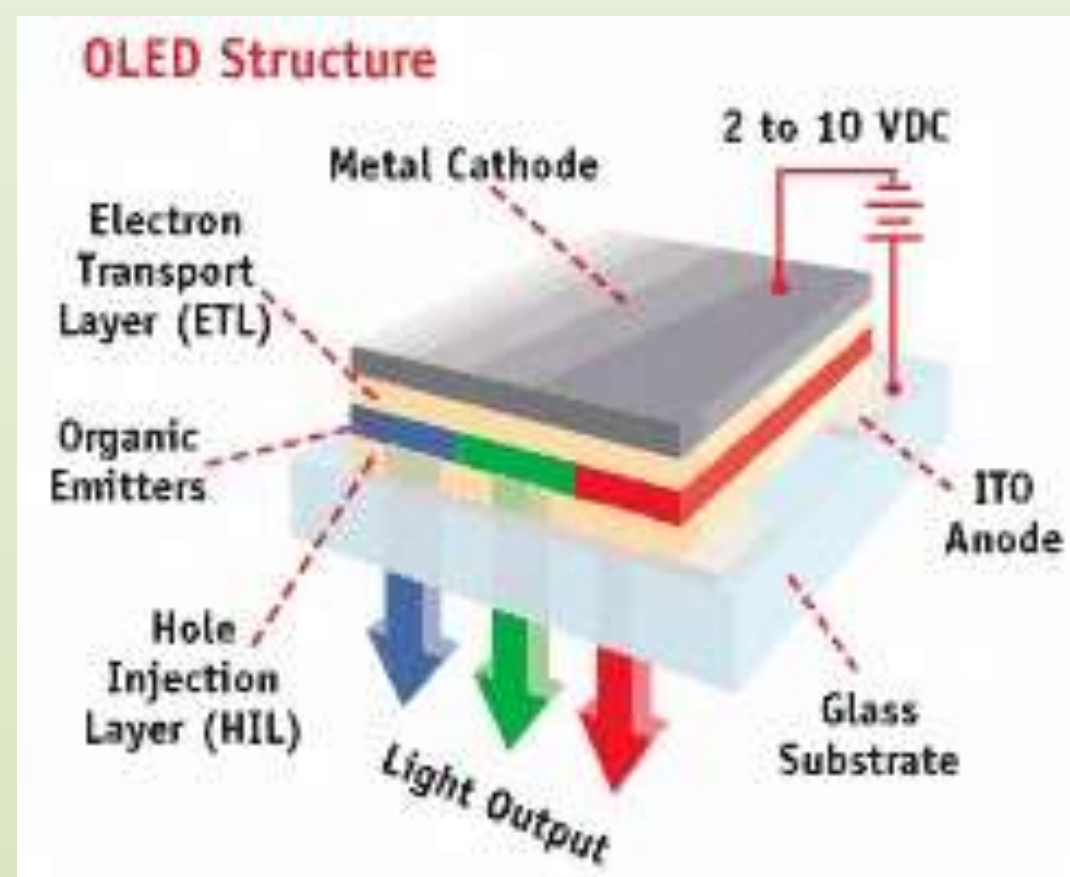


白川英樹 (筑波大名誉教授)
電気を流すことのできるプラスチックの発見(2000年ノーベル化学賞)

次世代フレキシブルエレクトロニクス

有機EL素子(OLED)の
実用化

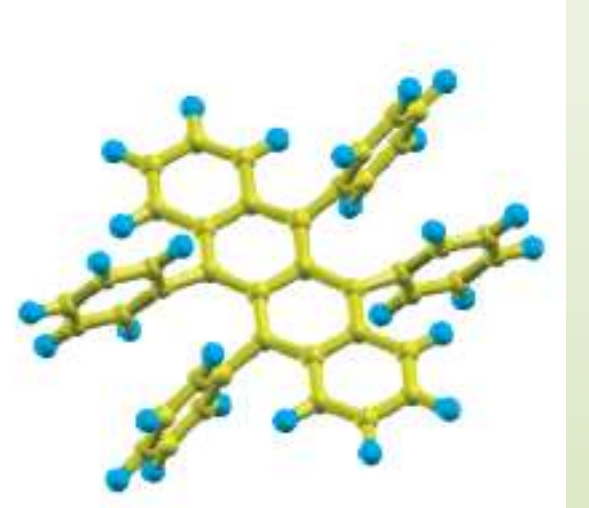
有機トランジスタ、
有機太陽電池、...



[oled-display.net]

どうやって電気が流れるのか?

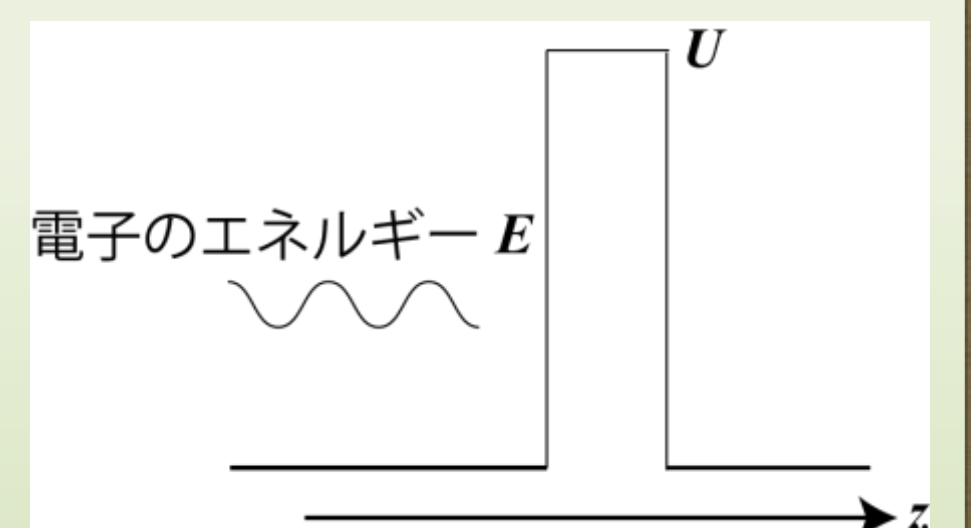
- すでに実用化した半導体材料 (無機シリコン系) に匹敵するほど電気が流れることも。1分子だけの性質では説明できない現象。
- 無機半導体と同じ仕組みかどうか、詳細は不明。



ルブレン (C₄₂H₂₈)

電流は、電子の流れによる

- 原子・分子スケールの物質の性質を支配する原理 (量子力学) に基づく理解が必要。
- 原子・分子スケールの分解能での実験・観察は容易ではない。



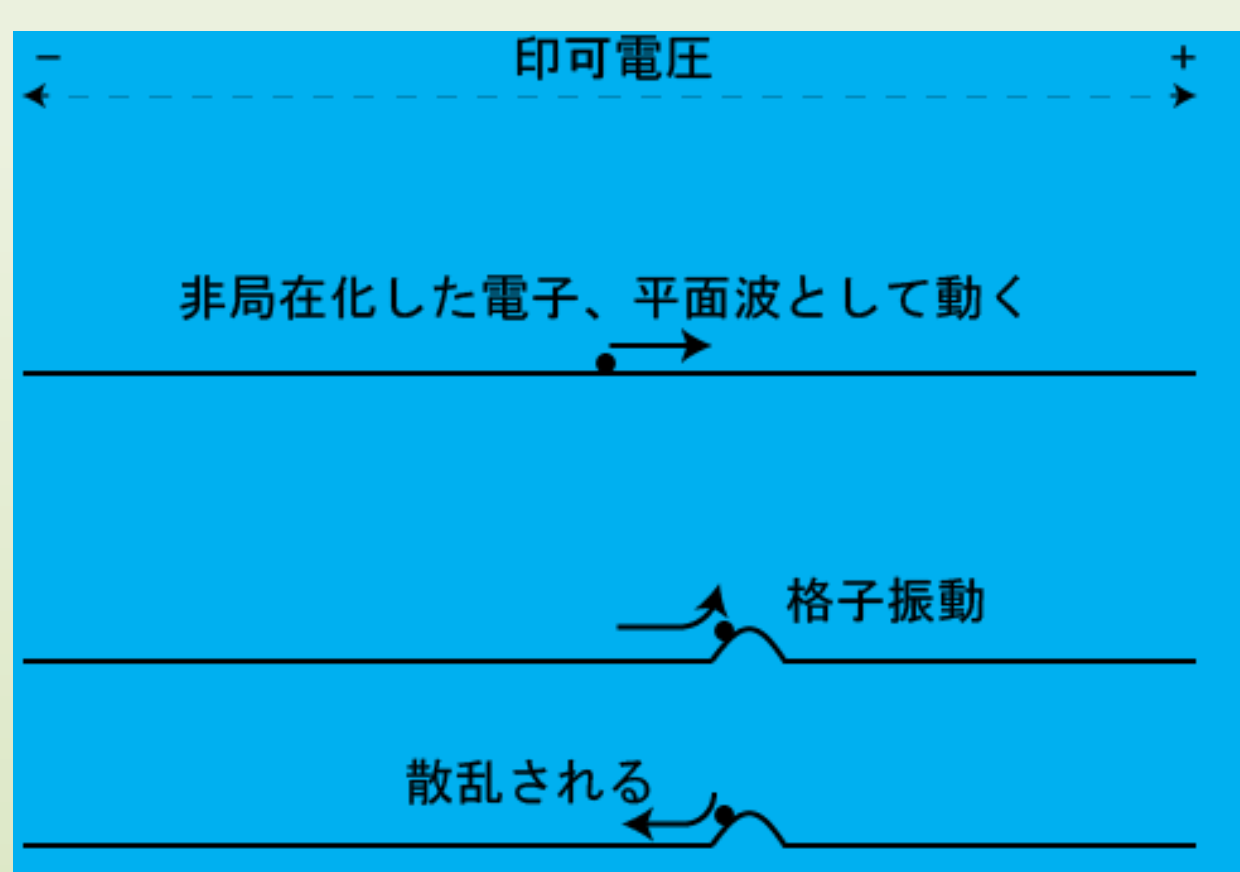
目標、期待される成果

- 原子・分子スケールでの電子のふるまいを理論計算で予測。
- 有機物の導電性の新たな基礎学理の確立、エレクトロニクスへの寄与。

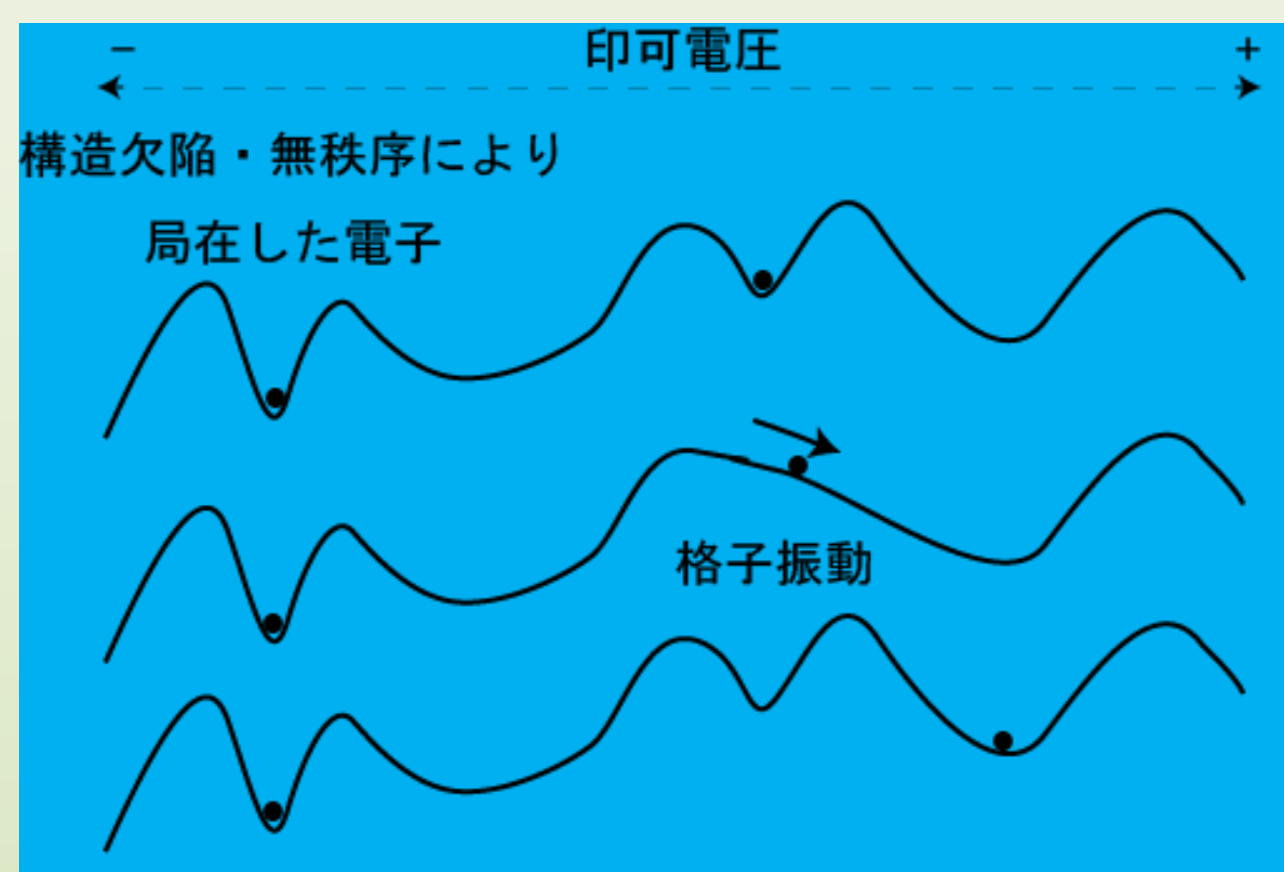
SX-ACE上での、十分な空間・時間分解能での電子 (波) のシミュレーション

すでに知られた電子輸送のしくみの概念図(a, b)

(a) 無機半導体で典型的なしくみ。
温度が上がると、移動度は減少。



(b) 格子振動とともに伝導する。
温度が上がると、移動度は増大。

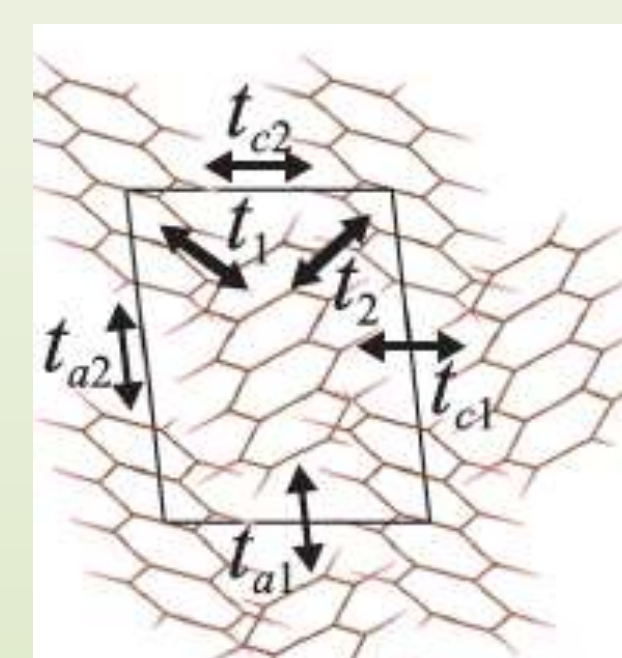


これらのしくみは、どう関与するのか?

スーパーコンピュータ
SX-ACE



電子 (キャリア) の輸送の予測:
(テトラセンC₁₈H₁₂の結晶の場合)



左図: 矢印 (↔) は、キャリアが輸送されやすい方向を表す。

下図: 電子 (波) のようです。色の違いは、波の符号 (位相) を表す。波の重ね合いにより、輸送されやすさが決まる。

