

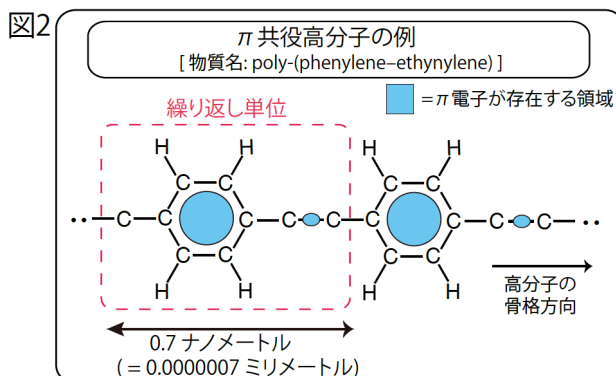
## 高分子上を走る電子の波 ～京スーパーコンピュータで目指す、21世紀のものづくり～

「京」コンピュータによる $\pi$ 共役高分子系の大規模量子電気伝導計算  
(鳥取大院工, JST-CREST)○星健夫, (鳥取大院工)横山誠也, (鳥取大院工, JST-CREST)井町宏人,  
(鳥取大院工)梶貴美, (東工大元素)多田朋史  
[2PD15]

(Tel:0857-31-5448)

鳥取大学大学院工学研究科の星健夫准教授、同大学院生の横山誠也・井町宏人・梶貴美、および、東京工業大学元素戦略研究センターの多田朋史准教授の研究グループは、次世代エレクトロニクス材料開発の基礎として、高分子上を「走る」電子の波を、独自開発の物理シミュレーションソフト ELSSES(エルセス)を用いて、京(けい)スーパーコンピュータ上に再現した。今後、様々な高分子に適用していくことで応用がひろがり、スーパーコンピュータを用いた「21世紀のものづくり」へと続くことが期待できる。

電気が流れる高分子(導電性高分子)は、白川英樹(2000年ノーベル化学賞)らの先駆的研究などにより、飛躍的に研究が進んでいる。柔らかい(フレキシブル)構造をもつため、特に近年は、Internet of Things (IoT)の中心となるウェアラブルデバイスへの期待が大きい。電気を運ぶのは、ベンゼン環(炭素が亀の甲型にならんだ環状構造)などに存在する、 $\pi$ (パイ)電子と呼ばれる特別な電子である。こうした構造がたくさんつらなって出来た高分子では、その上を $\pi$ 電子が「走り」、電気の流れをうむ。こうした高分子の総称を $\pi$ 共役(パイきょうやく)高分子と言う(図1, 図2)。



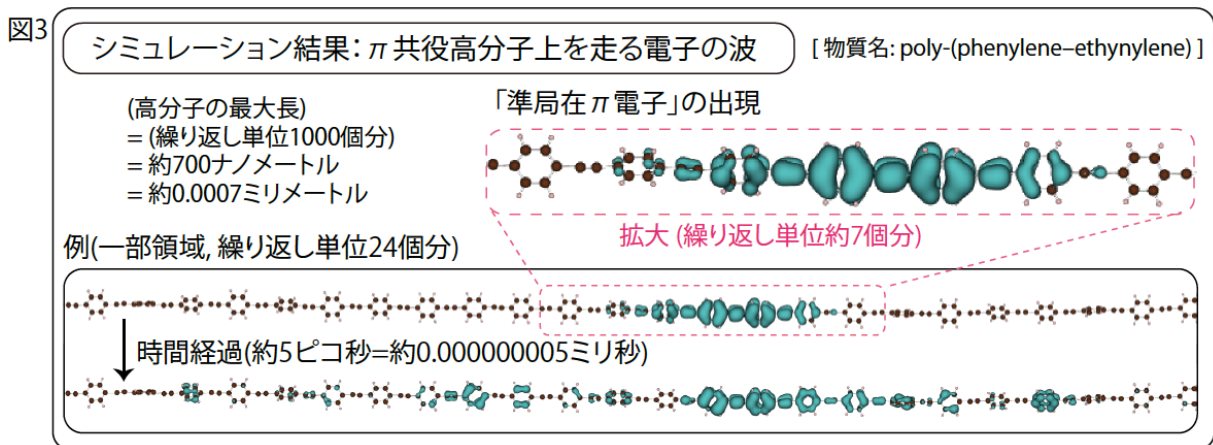
エレクトロニクス材料物質の基本性能指標として、電子の動きやすさを表す「移動度(mobility)」という量がある。移動度が高い物質、すなわち、電子が動きやすい物質が望ましい。しかし、現実の構造には乱雑さが常にあり、電子を動きにくくする。デコボコした道は走りにくいことを思い起こすと、分かりやすい。製造プロセスに巨額のコストをかけ、乱雑さを抑えることはできるかもしれないが、それでは(価格が高くなりすぎて)工業製品には使えない。分子のもつ本来の性質をうまくつかって、「自然に」乱雑さをおさえることが重要となる。

寺尾潤(京大)らによる実験・理論の共同研究[1]では、 $\pi$ 共役高分子 poly-(phenylene-ethynylene)において、高分子骨格方向軸(図2)に対するベンゼン環の回転角(ねじれ角)に乱雑さが入ることに着目し、高性能(高移動度)分子系を得るための新しい分子デザイン原理(設計指針)が提案された。

本研究では、上記デザイン原理[1]の理論的發展を目指して、 $\pi$ 共役高分子上を「走る」電子を、理化学研究所の京スーパーコンピュータ上で再現した。物質中の電子は波であり、20世紀生まれの物理学である量子力学を用いて、数式として記述される。数式に基づき「波としての電子」をコンピュータで再現することは、コンピュータ自体の高速化も手伝って爆発的に発展し、21世紀のものづくりを担うまでになろうとしている。特に京コンピュータは、現在世界屈指の計算能力を有している。しかし、その計算能力を持ってしても、高分子はシミュレーションが困難である。一般に分子長が長くなると(含まれる原子の個数が増えると)計算量が爆発的に増えてしまう。そのうえ、柔らかいということは原子が動き回ることを前提に理論を作る必要があり、さらに計算量が激増してしまう(「写真を1枚撮る手間」と「映画を1本撮る手間」の違いを考えると良い)。星らは物理学と数理学を融合した研究を基礎として、京スーパーコンピュータに適した計算理論(超並列型大行列数理論アルゴリズム)を考案し、シミュレーションソフト ELSSES (<http://www.elses.jp/>)

を独自開発した[2]。世界最大スケールの大規模計算が実現されている。本研究は、波の動きを表す理論(量子波束ダイナミクス法)を ELSESES で実現することで、成し遂げられた。

図3に、poly-(phenylene-ethynylene)でのシミュレーション結果(正孔型電子波のもたらす電荷分布;予備的データ)を例示した。特徴的な知見として、くりかえし単位数個から数十個にわたる広がりをもつ波である、準局在 $\pi$ 電子(semi-localized  $\pi$  electron, 図3)が得られた。準局在 $\pi$ 電子の理解と制御が、デバイス設計の核心と言える。電荷分布の空間的広がり(平均二乗変位)の時間変化から、移動度が計算できる。構造や条件が異なる多数の系でシミュレーションを実行し、扱った高分子の最大長は、繰り返し単位1000個分(約700ナノメートル=約0.0007ミリメートル)である。論文[1]にあげられた、para(直線)型構造(図3)・meta(ジグザグ)型構造に対して、シミュレーションを行った。共通した結果として、高分子骨格方向軸(図2)に対するベンゼン環の回転角(ねじれ角)に大きな乱雑さがある場合、波の広がりがおさえられた。計算条件によってばらつきが大きいものの、実験と同オーダーの移動度が得られた。また、para型構造よりmeta型構造が高移動度となる場合も得られ、これは論文[1]の分子デザイン原理に対応する。今後は、計算理論の向上に努めつつ、他物質への応用も行っていきたい。



本研究の発展として、シミュレーションで「高分子上を走る電子の波」が自在に制御できるようになれば、21世紀のものづくりの基礎、いうなれば、ものづくりのための「ちえづくり」と言えるだろう。将来的には、ソフトウェアとデータをスーパーコンピュータ上の一体化(クラウド型)サービスに昇華させ、誰でも、どこにいても(インターネット経由で)研究・開発を行えるようにしたい。

#### <適用分野>

ウェアラブルデバイス、スーパーコンピュータを用いたものづくり

#### <謝辞>

本研究は、以下の支援を受けている：JST-CREST「ポストペタスケールに対応した階層モデルによる超並列固有値解析エンジンの開発」；科研費「超大規模超並列電子状態理論による100ナノスケール系デバイス研究」；HPCI「有機デバイス材料系の100ナノスケール電子状態計算」(課題番号:hp150144)。シミュレーション中の一部数学的処理(固有値計算)には、今村俊幸(理化学研究所)らが開発した基盤的数学ソフトウェア(数値計算ライブラリ)EigenExaが利用された。

#### <文献>

[1] J. Terao, A. Wadahama, A. Matono, T. Tada, S. Watanabe, S. Seki, T. Fujihara, Y. Tsuji, “Design principle for increasing charge mobility of  $\pi$ -conjugated polymers using regularly localized molecular orbitals”, Nature Communications 4, 1691 (2013)

[2] T. Hoshi, S. Yamamoto, T. Fujiwara, T. Sogabe, S.-L. Zhang, “An order- $N$  electronic structure theory with generalized eigenvalue equations and its application to a ten-million-atom system”, Journal of Physics Condensed Matter 24, 165502 (2012); ELSESES = Extra-Large-Scale electronic structure calculation.