

令和 4 年 6 月 14 日現在

機関番号：12102

研究種目：基盤研究(B) (一般)

研究期間：2018～2021

課題番号：18H01856

研究課題名(和文) 第一原理に基づく熱電変換計算理論の開発と有機材料への応用

研究課題名(英文) Development of thermoelectric simulation methodology based on density functional theory and application to organic materials

研究代表者

石井 宏幸 (Ishii, Hiroyuki)

筑波大学・数理物質系・准教授

研究者番号：00585127

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 13,300,000円

研究成果の概要(和文)：弱いファンデルワールス結合からなる有機半導体は、電子-フォノン相互作用が強いために、変形ポテンシャル近似などの従来の固体物理で使われてきた摂動論が使えない。そこで私たちは実時間で電子-フォノン相互作用を直接評価し、それを用いて量子論に基づく波束の時間発展計算から伝導物性を算出する方法論「時間依存波束拡散法」を拡張し、熱電物性の計算も可能にした。またこれを実際の有機半導体に適用し、その有用性を示した。さらに開発の遅れているn型有機半導体の電子状態も調べたところ、p型と違って分子内振動との相互作用が無視できず、その相互作用が移動度にも重要な影響を及ぼすことを明らかにした。

研究成果の学術的意義や社会的意義

高価な装置を必要とするシリコンデバイスに対して、基板に溶液を塗布するだけでアモルファスシリコンを超える移動度を達成できる有機半導体は、安価な材料として大きな強みをもつ。例えばIoT社会の実現に必要な年間1兆個のセンサの半導体材料や、それに電源を供給する熱電材料として有望である。しかし有機半導体は応用研究が先行し、原子レベルでの物性理解が遅れている。シリコンを想定した半導体物理学が、柔らかい有機半導体に適用できないためである。本研究成果の学術的意義は柔らかい材料に特徴的な未知の物性解明で、社会的意義は既存材料の性能向上に貢献する知見を与えることでより良い社会の実現に貢献することである。

研究成果の概要(英文)：Well-used perturbation theory, such as deformation potential approximation, is not applicable to organic semiconductors, since electron-phonon coupling of organic semiconductors is much larger than that of inorganic ones. To compute the thermoelectric properties without use of perturbation theory, we extended our “time-dependent wave-packet diffusion TD-WPD” approach, which enables us to calculate the charge transport properties using the wave-packet dynamics based on quantum theory. We applied the approach to an organic semiconductor, and showed validity of the approach. Furthermore, we investigated the electronic state and transport properties of n-type organic semiconductors, because not only p-type but also n-type organic semiconductors with high mobility are required to realize organic thermoelectric devices. As the result, we found that, different from p-type organic semiconductors, intramolecular vibrational (phonon) modes significantly affect the mobility of n-type ones.

研究分野：物性理論、大規模伝導シミュレーション、有機半導体

キーワード：熱電変換物性 大規模計算 有機半導体 時間依存波束拡散法 波束ダイナミクス

### 1. 研究開始当初の背景

IoT (Internet of Things) 社会の実現には、どんなものにも貼り付けられる柔軟で軽量の IC タグやセンサーが年間 1 兆個必要になると言われている。更にこれらのデバイスは電池を使わずエネルギーハーベスティング技術による電力供給が望まれる。上記の要件を満たす半導体材料として、シリコンと違って、柔らかいプラスチック基板に印刷可能で軽く安価な有機半導体が注目されている。実際に印刷プロセスで作製した有機半導体のキャリア移動度は、アモルファスシリコンよりも 1 桁高い  $10\text{cm}^2/\text{Vs}$  を超えて IC タグへの応用例も報告されている。有機半導体は緻密な分子設計と結晶成長技術の進歩によって数十年の間にキャリア移動度 (電気伝導率) が桁違いに向上してきた。一方、熱伝導率はどの有機材料もほぼ同じで極めて低く  $0.1\sim 1.0\text{W/mK}$  の間にある。高い電気伝導率と低い熱伝導率は、熱を電流に変える熱電変換材料の基本的特徴なので、有機半導体は熱電発電を利用したエネルギーハーベスティング材料としても期待されている。研究開始当初、熱電変換効率を表す無次元性能指数  $ZT$  は有機半導体で最高  $0.2\sim 0.4$  が報告されていた (G-H. Kim, et al., Nat. Mater., 12, 719 (2013).)。実用化の目安である  $ZT=1$  を目指して世界中で有機材料の開発が行われているが、その熱電変換機構は未だ明らかになっていないと言われている。これは弱いファンデルワールス結合からなる有機半導体では電子-フォノン相互作用が強いため、変形ポテンシャル近似などの従来の固体物理で使われてきた摂動論が使えないためである。このように有機半導体の熱電物性は応用上重要であるだけでなく、その物性の原子レベルからの理解は学術的にも大変興味深い。

### 2. 研究の目的

本研究の目的は、「電子-フォノン相互作用が強いため従来理論が適用できない有機半導体の熱電変換機構は原子・分子レベルからどのように理解できるのか? 無機半導体と何が違うのか?」を明らかにすることである。また、有機半導体特有の大きな熱的構造揺らぎの効果とポーラロン生成効果が熱電物性に与える影響を明らかにする。最終的には開発した計算理論を基に、有機・無機半導体の違いに関わらず熱電物性を系統的に解析できる基礎理論を構築する。

### 3. 研究の方法

研究代表者が先駆的に開発してきた大規模電子伝導計算理論である「時間依存波束拡散法」では量子論に基づく電子波束の時間発展計算と、分子振動を記述する分子動力学計算を毎時間ステップ連立して解くので、電子-フォノン相互作用を摂動論を使わずに扱える利点がある。さらにアルゴリズムレベルでの効率化によって本研究で扱う面積  $1\mu\text{m}^2$  あたり 1 億個の原子・分子を含む周期性の無い有機半導体への応用も可能とした。本計算理論は密度汎関数法と連携させることで様々な有機材料の電子伝導物性を第一原理に基づいて計算可能である。これによって移動度の実験結果を定量的に再現できることを実証している。そこで、本研究では第一原理に基づいて、ゼーベック係数やパワーファクター等の熱電変換物性も計算できるように本計算理論の拡張・改良を行った。

本計算理論はもともと有機半導体の Hall 効果を計算するために開発された手法で、それぞれ直交する向きに流れる電流演算子  $j_x$  と  $j_y$  の相関関数を線形応答理論に基づいて計算している。この  $j_y$  をエネルギー流演算子に置き換えることで、電流-エネルギー流の相関である熱電物性、すなわちゼーベック係数を算出できる。今回、エネルギー流演算子を新たに定義し、「時間依存波束拡散法」の枠組みの中で扱えるようにアルゴリズムの拡張を行った。この拡張した「時間依存波束拡散法」を有機半導体や無機半導体に適用し、熱電物性の解析を行った。

### 4. 研究成果

まず初めに開発した「時間依存波束拡散法」を、単純な 2 次元正方格子に適用し、熱電物性を正しく計算できているか確認を行った。図 1 にその計算結果を示す。単一の放物線バンドを仮定して、かつ緩和時間にエネルギー依存性がない場合、出力因子はバンド端付近で最大となり、そのときのゼーベック係数は約  $200\mu\text{V/K}$  程度になることが解析的に示せる。本計算結果もそれを再現できており、本計算理論の有効性を確認できた。さらに図 2 に示すように、原子数に対して計算時間やメモリ使用量が線形にしか増大しないオーダー-N (大規模) 計算可能であることも実証できた。これは実際の材料のマクロスケ

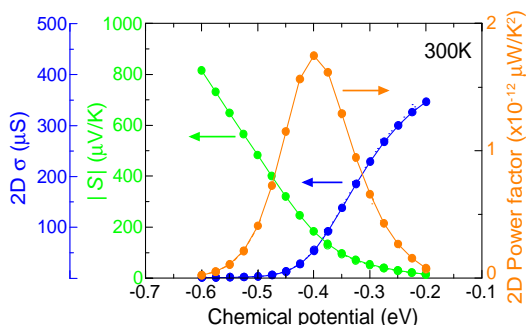


図 1 .「時間依存波束拡散法」で計算された 2 次元正方格子の 300K における電気伝導率 (青)、ゼーベック係数 (緑)、出力因子 (橙) の化学ポテンシャル依存性。

ールな物性を定量的に計算可能であることを意味する。代表者が知る限り、このような大規模計算は、国内外でも他に例がない。

次に有機熱電材料の一つとして実測例のあるポリチオフェンの熱電物性計算を行った。先行理論研究では、実験の状況と異なり、ほとんどがポリマー一本鎖の計算例であった。そこで代表者は、密度汎関数計算を利用して単結晶構造を同定し(図3(a))、その電子状態を計算した(図3(b))。その結果からポリマー鎖内およびポリマー鎖間の物性パラメータを抽出し、「時間依存波束拡散法」を用いてゼーベック係数の計算を行ない(図3(c))、先行研究では理論的に議論されてこなかったポリマー鎖間の相互作用が熱電物性に与える影響などを明らかにした。

また最近、本計算理論を代表的な無機半導体の熱電材料である  $\text{CoSb}_3$  に対しても本計算理論を適用、ゼーベック計算を計算した。理想的な単結晶では、先行研究の結果を定量的に再現できることを確認できている。現在、有機と無機の違いについて、熱電物性の観点から考察を進めている。

有機半導体を熱電デバイスに応用する際、p型半導体にくらべてn型半導体の性能が低いという課題がある。一般に、ゼーベック係数は移動度にある程度比例するが、実際、p型有機半導体の移動度は室温で最高  $20 \sim 40 \text{cm}^2/\text{Vs}$  の報告値があるのに対し、n型有機半導体の移動度は高くても  $5 \text{cm}^2/\text{Vs}$  程度しかない。この差の微視的起源を調べていった結果、p型有機半導体では無視できていた電子-フォノン相互作用が、n型有機半導体では無視できないという事実を明らかにすることができた。これは熱電応用に限らず、n型とp型両方の半導体を必要とする有機エレクトロニクス全般に重要な知見である。さらに、電子と正孔には電荷の符号以外に本質的な差があることを意味し、学術的にもとても興味深い結果である。これに関しては現在も研究を進めている。

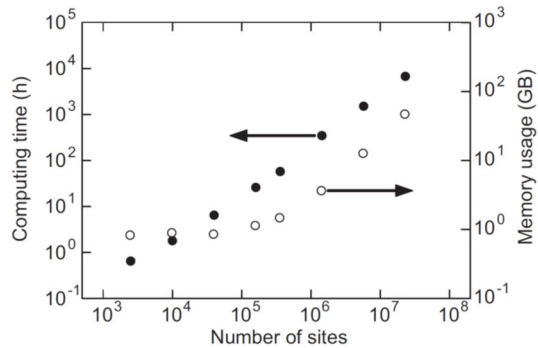
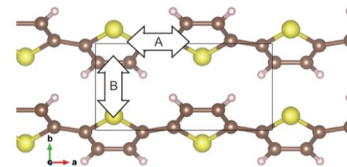
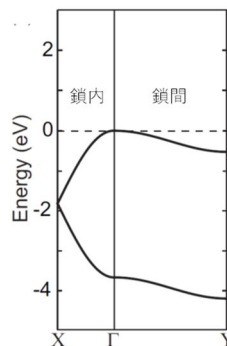


図2 .「時間依存波束拡散法」を用いて、熱電物性を計算したときの、計算時間とメモリ使用量のサイト(基底)数依存性。

(a) ポリチオフェンの結晶構造



(b) 価電子バンド



(c) Seebeck係数 ( $\mu\text{V}/\text{K}$ )

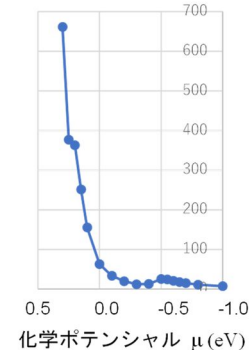


図3 .ポリチオフェンの熱電物性の計算例。

本研究では、電子-フォノン相互作用を非摂動的に扱って熱電物性も計算可能にする「時間依存波束拡散法」を開発して、実際の有機半導体へ適用できることを実証した。さらに開発の遅れているn型有機半導体の電子状態も調べたところ、p型と違って分子内振動との相互作用が無視できず、その相互作用が熱電物性にも重要な影響を及ぼすことを明らかにした。

## 5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計15件（うち査読付論文 13件 / うち国際共著 0件 / うちオープンアクセス 7件）

1. 著者名 Ishii Hiroyuki, Kasuya Naotaka, Kobayashi Nobuhiko, Hirose Kenji, Kumagai Shohei, Watanabe Shun, Takeya Jun	4. 巻 119
2. 論文標題 Gate induced modulation of electronic states in monolayer organic field-effect transistor	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Applied Physics Letters	6. 最初と最後の頁 223301 ~ 223301
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0058666	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Ishii Hiroyuki	4. 巻 27
2. 論文標題 Prediction of Intrinsic Charge Mobility for Materials Developments of Organic Semiconductors	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Proceedings of the International Display Workshops	6. 最初と最後の頁 151 ~ 151
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.36463/idw.2020.0151	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -
1. 著者名 Mikie Tsubasa, Hayakawa Masahiro, Okamoto Kenta, Iguchi Keitaro, Yashiro Shuhei, Koganezawa Tomoyuki, Sumiya Masatomo, Ishii Hiroyuki, Yamaguchi Shigehiro, Fukazawa Aiko, Osaka Itaru	4. 巻 33
2. 論文標題 Extended $\pi$ -Electron Delocalization in Quinoid-Based Conjugated Polymers Boosts Intrachain Charge Carrier Transport	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Chemistry of Materials	6. 最初と最後の頁 8183 ~ 8193
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.chemmater.1c02072	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Yu Craig P., Kojima Naoya, Kumagai Shohei, Kurosawa Tadanori, Ishii Hiroyuki, Watanabe Go, Takeya Jun, Okamoto Toshihiro	4. 巻 4
2. 論文標題 Approaching isotropic charge transport of n-type organic semiconductors with bulky substituents	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Communications Chemistry	6. 最初と最後の頁 155
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s42004-021-00583-2	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Kumagai Shohei, Watanabe Shun, Ishii Hiroyuki, Isahaya Nobuaki, Yamamura Akifumi, Wakimoto Takahiro, Sato Hiroyasu, Yamano Akihito, Okamoto Toshihiro, Takeya Jun	4. 巻 32
2. 論文標題 Coherent Electron Transport in Air Stable, Printed Single Crystal Organic Semiconductor and Application to Megahertz Transistors	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Advanced Materials	6. 最初と最後の頁 2003245 ~ 2003245
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/adma.202003245	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Toshihiro Okamoto, Craig P. Yu, Chikahiko Mitsui, Masakazu Yamagishi, Hiroyuki Ishii, and Jun Takeya	4. 巻 142
2. 論文標題 Bent-Shaped p-Type Small-Molecule Organic Semiconductors: A Molecular Design Strategy for Next-Generation Practical Applications	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of the American Chemical Society	6. 最初と最後の頁 9083-9096
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/jacs.9b10450	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Toshihiro Okamoto, Shohei Kumagai, Eiji Fukuzaki, Hiroyuki Ishii, Go Watanabe, Naoyuki Niitsu, Tatsuro Annaka, Masakazu Yamagishi, Yukio Tani, Hiroki Sugiura, Tetsuya Watanabe, Shun Watanabe, and Jun Takeya	4. 巻 6
2. 論文標題 Robust, high-performance n-type organic semiconductors	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Science Advances	6. 最初と最後の頁 eaaz0632
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1126/sciadv.aaz0632	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Chizuru Sawabe, Shohei Kumagai, Masato Mitani, Hiroyuki Ishii, Masakazu Yamagishi, Hajime Sagayama, Reiji Kumai, Hiroyasu Sato, Jun Takeya, and Toshihiro Okamoto	4. 巻 8
2. 論文標題 Band-like transporting and thermally durable V-shaped organic semiconductors with a phenyl key block	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of Materials Chemistry C	6. 最初と最後の頁 14172-14179
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1039/d0tc03318a	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Shohei Kumagai, Hiroyuki Ishii, Go Watanabe, Tatsuro Annaka, Eiji Fukuzaki, Yukio Tani, Hiroki Sugiura, Tetsuya Watanabe, Tadanori Kurosawa, Jun Takeya, and Toshihiro Okamoto	4. 巻 32
2. 論文標題 Cooperative Aggregations of Nitrogen-Containing Perylene Diimides Driven by Rigid and Flexible Functional Groups	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Chemistry of Materials	6. 最初と最後の頁 9115-9125
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.chemmater.0c01888	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Ishii Hiroyuki, Obata Shigeaki, Niitsu Naoyuki, Watanabe Shun, Goto Hitoshi, Hirose Kenji, Kobayashi Nobuhiko, Okamoto Toshihiro, Takeya Jun	4. 巻 10
2. 論文標題 Charge mobility calculation of organic semiconductors without use of experimental single-crystal data	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Scientific Reports	6. 最初と最後の頁 2524
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41598-020-59238-2	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Okamoto Toshihiro, Kumagai Shohei, Fukuzaki Eiji, Ishii Hiroyuki, Watanabe Go, Niitsu Naoyuki, Annaka Tatsuro, Yamagishi Masakazu, Tani Yukio, Sugiura Hiroki, Watanabe Tetsuya, Watanabe Shun, Takeya Jun	4. 巻 6
2. 論文標題 Robust, high-performance n-type organic semiconductors	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Science Advances	6. 最初と最後の頁 eaaz0632
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1126/sciadv.aaz0632	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Kuroda Yuki, Ishii Hiroyuki, Yoshino Sayaka, Kobayashi Nobuhiko	4. 巻 58
2. 論文標題 Second highest occupied molecular orbital effects on the valence band structure of organic semiconductors	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Japanese Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 S11B27
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7567/1347-4065/ab19b0	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Zhang Chunyang, Tsuboi Hiromu, Hasegawa Yuri, Iwasawa Masato, Sasaki Masahiro, Wakayama Yutaka, Ishii Hiroyuki, Yamada Yoichi	4. 巻 4
2. 論文標題 Fabrication of Highly Oriented Multilayer Films of Picene and DNTT on Their Bulklake Monolayer	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 ACS Omega	6. 最初と最後の頁 8669 ~ 8673
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acsomega.9b00826	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている(また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Ishii Hiroyuki, Inoue Jun-ichi, Kobayashi Nobuhiko, Hirose Kenji	4. 巻 98
2. 論文標題 Quantitative mobility evaluation of organic semiconductors using quantum dynamics based on density functional theory	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 235422-1 --8
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.98.235422	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Kobayashi Nobuhiko, Ishii Hiroyuki, Hirose Kenji	4. 巻 57
2. 論文標題 Theory of electron transport at the atomistic level	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Japanese Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 08NA01 ~ 08NA01
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7567/JJAP.57.08NA01	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計18件(うち招待講演 5件/うち国際学会 7件)

1. 発表者名 石井 宏幸、吉田 弘幸、小林 伸彦
2. 発表標題 有機半導体における電子と正孔の移動度の差とその微視的起源
3. 学会等名 第69回応用物理学会春季学術講演会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 福谷 圭祐、村上 雅紀、岡上 大二郎、福井 賢一、石井 宏幸、田中 清尚、解良 聡
2. 発表標題 有機単結晶ルフレンの電子構造と電子-分子振動相互作用に関する研究
3. 学会等名 第69回応用物理学会春季学術講演会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Hiroyuki Ishii
2. 発表標題 Charge Transport Simulations of Organic Semiconductors for Materials Development
3. 学会等名 Korea-Japan joint symposium in 2021 KPS Spring Meeting (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Hiroyuki Ishii, Hiroyuki Yoshida, Nobuhiko Kobayashi
2. 発表標題 Impact of Small Polaron with Low-Frequency Molecular Vibrations on Electron Mobility of Organic Semiconductors
3. 学会等名 The 10th workshop on Advanced Spectroscopy of Organic Materials for Electronic Applications (ASOMEA-X) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 石井宏幸、吉田弘幸、小林伸彦
2. 発表標題 有機半導体の電荷輸送におけるポーラロンと動的構造揺らぎの影響
3. 学会等名 第82回応用物理学会秋季学術講演会
4. 発表年 2021年



1. 発表者名 Hiroyuki Ishii
2. 発表標題 Charge transport simulations based on density functional theory
3. 学会等名 International conference on Solid State Devices and Materials 2020 (SSDM2020) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Hiroyuki Ishii
2. 発表標題 Prediction of Intrinsic Charge Mobility for Materials Developments of Organic Semiconductors
3. 学会等名 International Display Workshops 2020 (IDW'20) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 石井宏幸、小林伸彦、広瀬賢二
2. 発表標題 有機半導体の電荷輸送における分子間振動と分子内振動の影響
3. 学会等名 日本物理学会第76回年次大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Hiroyuki Ishii, J. Inoue, N. Kobayashi and K. Hirose
2. 発表標題 Quantitative Prediction of Mobility for Organic Semiconductors using Quantum Dynamics based on Density functional theory
3. 学会等名 10th International Conference on Materials for Advanced Technologies (ICMAT2019) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 石井宏幸、小林伸彦、広瀬賢二
2. 発表標題 有機半導体の熱電物性評価のための大規模計算法の開発
3. 学会等名 日本物理学会2019年秋季大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 石井宏幸、小林伸彦、広瀬賢二、
2. 発表標題 量子ダイナミクスによる有機半導体の電荷・熱輸送計算
3. 学会等名 日本物理学会第75回年次大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 石井宏幸、小林伸彦
2. 発表標題 有機半導体の熱電物性評価のための大規模計算法の開発
3. 学会等名 第67回応用物理学会春季学術講演会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Hiroyuki Ishii, Nobuhiko Kobayashi
2. 発表標題 High-Performance Simulation for Quantum Charge Transport in Large-Scale Materials
3. 学会等名 Americas international Meeting on Electrochemistry and Solid state science (AiMES2018) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Y. Kuroda, H. Ishii, S. Yoshino, and N. Kobayashi
2. 発表標題 Second-Highest-Occupied-Orbital Effects on Valence Band Structure of Organic Semiconductors
3. 学会等名 14th International Conference on Atomically Controlled Surfaces, Interfaces and Nanostructures (ACSIN-14) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 石井宏幸、小畑繁昭、新津直幸、渡邊峻一郎、後藤仁志、広瀬賢二、小林伸彦、岡本敏宏、竹谷純一
2. 発表標題 有機半導体の結晶構造とキャリア移動度の予測：移動度予測シミュレーション
3. 学会等名 第66回応用物理学会春季学術講演会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 石井宏幸、小林伸彦、広瀬賢二
2. 発表標題 波束拡散法を用いた有機半導体の熱電物性計算
3. 学会等名 日本物理学会第74回年次大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 石井宏幸
2. 発表標題 キャリア輸送理論による有機半導体の設計
3. 学会等名 日本物理学会 2018年秋季大会 (招待講演)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 石井宏幸、小林伸彦
2. 発表標題 第一原理に基づく有機半導体の電子伝導シミュレーション ～電子の遍歴性と局在性が紡ぐ伝導物性～
3. 学会等名 2018年 第79回応用物理学会秋季学術講演会（招待講演）
4. 発表年 2018年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

石井宏幸のホームページ <a href="http://www.bk.tsukuba.ac.jp/~ishii/index.html">http://www.bk.tsukuba.ac.jp/~ishii/index.html</a>  Hiroyuki Ishii, Ph. D. <a href="http://www.bk.tsukuba.ac.jp/~ishii/index-e.html">http://www.bk.tsukuba.ac.jp/~ishii/index-e.html</a>
---

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究分担者	岡本 敏宏  (Okamoto Toshihiro)  (80469931)	東京大学・大学院新領域創成科学研究科・准教授    (12601)	

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------