

# 分子自己組織化膜の第一原理伝導計算

名古屋大学大学院工学研究科 大戸達彦

目的 分子デバイスの電気伝導・熱電特性予測

内容 耐電圧性能の高い分子膜に対する第一原理伝導計算

結果 これまでにない高い電圧で、100を超える整流比を計算でも確認した。通常は伝導に寄与しない非フロンティア軌道であるHOMO-2がバイアス窓に侵入することで、高い整流作用が起こることを明らかにした。

J. Mater. Chem. A 11, 16233 (2023).

Small, 20, 2305997 (2024).

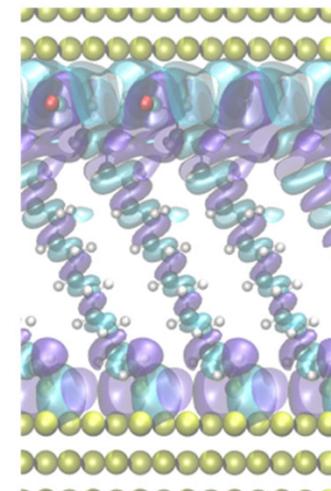
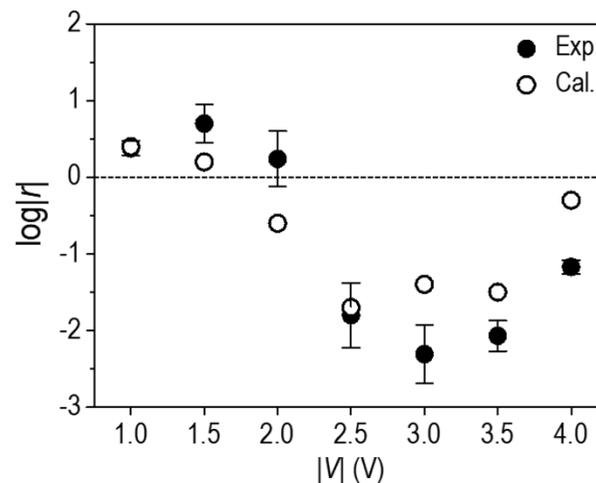
利用した計算機

ノード時間  
使用メモリ  
並列化

OCTPUS

14000時間  
180GB  
48並列

Small  $r$  at low bias



Large  $r$  at high bias