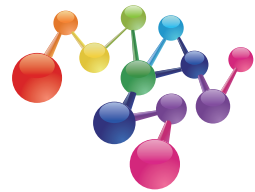


第126回

分子システム デバイスセミナー



九州大学大学院 博士課程教育リーディングプログラム
分子システムデバイスコース
Advanced Graduate Course on Molecular Systems for Devices



Open Seminar

参加費無料

日時：2017年7月7日(金) 16:30～18:30

会場：伊都キャンパス 総合学習プラザ 110

Ito: Open Learning Plaza 1F Seminar Room(110)

JNC(株)における計算化学の活用事例のご紹介 —電荷移動特性計算を例として—



近藤 正一 先生

JNC石油化学株式会社
市原研究所
研究第4センター

計算機の性能向上と計算プログラムの充実化が相まって、材料シミュレーションは研究開発ツールのひとつにまで進展しました。JNC(株)でも種々の時間/空間スケールのシミュレーション技術を液晶材料や有機EL材料の開発に利用しております。本セミナーでは、電荷移動特性計算を題材として、企業での理論計算の取り組み事例を紹介します。ここで、電荷移動は自然界における基本的な物理過程のひとつであり、微視的スケールからの機構解明・特性予測は科学的に興味深いのみならず、新材料探索やデバイス設計など産業分野においても重要な研究課題です。

講演内容は次の構成を予定しております：まず、電荷移動速度の基礎式であるMarcus-Hush式について、式に現れるパラメータ群(再配列エネルギー・移動積分・サイトエネルギー)の物理化学的な意味を議論します。次に、Marcus-Hush式と動的モンテカルロ法を連成したマルチスケールシミュレーション手法を有機EL分子系の移動度評価に適用し、サイトエネルギー項によりPoole-Frenkel的な電場依存性が発現する様子を示します。また、最近の取り組みとして、産学連携による新規有機半導体材料の開発についても触れたいと思います。

■お問い合わせ先

分子システムデバイス国際リーダー教育センター支援室
E-mail : office[at]molecular-device.kyushu-u.ac.jp
TEL : 092-802-2911 FAX : 092-802-2912
〒819-0395 福岡県福岡市西区元岡 744
九州大学伊都キャンパス ウエスト 2号館 627号室

■主催：九州大学 大学院博士課程教育リーディングプログラム
分子システムデバイスコース

事前登録はこちらから

