

理論・計算分子科学研究部門

藤田 貴 敏（特任准教授（若手独立フェロー））（2016年4月1日着任）

A-1) 専門領域：理論化学，計算物質科学

A-2) 研究課題：

- a) 有機半導体の励起子ダイナミクスの理論研究
- b) π 共役分子集合体の構造－機能相関の理論研究

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 有機半導体の光物性を考えるうえで，励起子の形成や拡散を考えるのは重要である。我々は電子状態理論や量子動力学法を組み合わせることにより，有機半導体中の励起子ダイナミクスを取り扱える方法を開発した。本研究で p 型有機半導体薄膜の励起子ダイナミクスを解析した結果，有機半導体の光物性が従来考えられてきたフレンケル励起子モデルでは説明つかないこと，光励起後にフレンケル型励起子と電荷移動型励起子が混合した状態が生成することを見出だした。
- b) 有機分子を使った機能性材料を設計する試みが行われており，様々の π 共役分子系の合成が行われている。本研究ではピロール環を持つ π 電子系分子結晶多形に着目し， π - π スタッキング構造と電荷移動度の関係について理論研究を行った。3種の結晶構造について電子状態計算と電荷移動理論を用いた解析を行った。3種の結晶はいずれもヘリンボーン状の結晶構造を持つにもかかわらず，スタッキング様式の違いにより電荷移動の次元性や異方性が変化することが分かった。

B-1) 学術論文

T. FUJITA, S. ATAHAN-EVRENK, N. P. D. SAWAYA and A. ASPURU-GUZIŁ, “Coherent Dynamics of Mixed Frenkel and Charge Transfer Excitons in Dinaphtho[2,3-*b*:2'3'-*f*]thieno[3,2-*b*]-thiophene Thin Films: The Importance of Hole Delocalization,” *J. Phys. Chem. Lett.* **7**, 1374–1380 (2016).

B-4) 招待講演

藤田貴敏，「励起子の計算物理化学——分子集合体の光物性と励起ダイナミクス——」，第248回自然環境論セミナー，神戸大学，神戸（日本），2016年3月。

藤田貴敏，「分子集合体の光物性と励起子についての理論研究」，第59回量子物理化学セミナー，横浜市立大学，横浜（日本），2016年7月。

藤田貴敏，「低分子有機半導体の光物性と励起子ダイナミクス」，日本物理学会秋季大会シンポジウム，金沢大学，金沢（日本），2016年9月。

T. FUJITA, “Exciton Dynamics in DNTT Thin Films,” EMN Meeting on Theory and Computation, South Point Hotel, Las Vegas (U.S.A.), October 2016.

T. FUJITA, “Theoretical characterization of energy transport in the chlorosome light-harvesting antenna from green sulfur bacteria,” The 9th Korea-Japan Seminars on Biomolecular Sciences: Experiments and Simulations, Commodore Hotel, Gyeongju (Korea), November 2016.

T. FUJITA, “Dynamics of Frenkel and Charge Transfer Excitons in DNTT Thin Films,” The 4th Workshop on Physics in Organic Optoelectronics, Soochow University, Suzhou (China), December 2016.

C) 研究活動の課題と展望

今後は有機半導体のpn接合やイオンペア分子集合体などのより複雑な系に展開したい。より複雑な系を扱う上では電子状態理論を高精度化する必要がある。特に軌道エネルギー・励起エネルギーの差や電子カップリングをより正確に計算する必要がある。フラグメント分子軌道をベースにしたカップリング計算の開発を進めており、全電子計算から準粒子の有効ハミルトニアンを導出する手法を検討中である。