

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) 有機分子集合体のための高精度電子状態理論の開発
- b) 有機／有機界面の電荷移動状態の解析

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 大規模分子集合体に対する高精度電子状態理論の確立を目指して，フラグメント分子軌道法と GW/Bethe-Salpeter 方程式（GW/BSE）法を組み合わせた計算手法の開発を行った。GW/BSE 法は誘電関数を第一原理的に考慮しつつ，軌道エネルギーや励起エネルギーを計算できる手法であり，比較的低計算コストで信頼性の高い結果が得られる。本研究では，分極関数のフラグメント近似と，分子内の電子相関を GW で扱いつつ環境の分極効果を COHSEX で考慮する方法を組み合わせることにより，大規模系における GW 準粒子エネルギーを効率よく計算する手法を提案した。また，BSE 法による励起状態計算の実装もおこなった。本計算手法は，不均一環境にある分子集合体の取り扱いに適しているため，有機トランジスタや有機／有機界面などの有機デバイス系の電子状態計算に有用である。
- b) 有機太陽電池系のペンタセン／C₆₀ 界面の電荷移動（CT）励起状態の解析を行った。界面電荷移動状態は電荷分離・電荷再結合の中間状態に関与することから，有機光デバイス系のエネルギー変換過程において重要な役割を担う。本研究では開発した FMO-GW/BSE 法をペンタセン／C₆₀ 界面構造に適用し，界面 CT 状態の誘起分極エネルギーや励起子束縛エネルギーの解析を行った。また，得られた界面 CT 状態のエネルギーが外部量子収率スペクトルから見積もられる実験値とよく一致していることも確認した。

B-1) 学術論文

T. FUJITA, Y. NOGUCHI and T. HOSHI, “Charge-Transfer Excited States in the Donor/Acceptor Interface from Large-Scale GW Calculations,” *J. Chem. Phys.* **151**, 114109 (8 pages) (2019).

T. HOSHI, H. IMACHI, A. KUWATA, K. KAKUDA, T. FUJITA and H. MATSUI, “Numerical Aspect of Large-Scale Electronic State Calculation for Flexible Device Material,” *Jpn. J. Ind. Appl. Math.* **36**, 685–698 (2019).

B-4) 招待講演

T. FUJITA, “Development of the Large-Scale GW+Bethe-Salpeter Equation Method Based on Fragment Molecular Orbital Method for Applications to Organic Materials,” The Asia-Pacific Association of Theoretical and Computational Chemists (APATCC 2019), University of Sydney, Sydney (Australia), October 2019.

T. FUJITA, “Charge Transfer States at the Organic Donor–Acceptor Interface from the Many-Body Green Function Method,” IMS-IAMS Joint Discussion, Institute for Molecular Science, Okazaki, Aichi (Japan), September 2019.

藤田貴敏, 「大規模第一原理計算による有機半導体材料の電子物性研究」, ELSEES 研究会, 中央大学, 東京 (日本), 2019 年 9 月.

T. FUJITA, “Theoretical Investigation on Effects of Polarization and Delocalization on Excited States in Organic Semiconductors,” CEMS Topical Meeting on Organic Photoelectrons: Theory, Materials, Interfaces, and Spectroscopy, Riken, Wako, Saitama (Japan), July 2019.

藤田貴敏, 「フラグメント分子軌道法の開発と有機半導体材料への応用」, 物性研究所スパコン共同利用・CCMS 合同研究会「計算物質科学の新展開」, 東京大学物性研究所, 千葉, 柏(日本), 2019年4月.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

量子生命科学会評議員 (2019-).

学会誌編集委員

理論化学会会誌「フロンティア」編集委員 (2019-).

その他

量子化学スクール世話人 (2016-).

有機固体若手の会世話人 (2018-2019).

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(C), 「第一原理計算による光励起物性予測と有機光電子材料への応用」, 藤田貴敏 (2019年-2021年).

科研費特別研究員奨励費, 「大規模電子状態計算を用いた水クラスターの理論的研究」, 藤田貴敏 (2010年-2011年).

C) 研究活動の課題と展望

今後はFMO-GW/BSE法の開発を進める予定である。現在の実装では電子励起が一分子に局在化した励起状態しか取り扱うことができないが、今後開発を進めることにより分子集合体で形成される非局在化した励起状態も計算できる手法を実装する予定である。さらに、FMO法による励起状態計算と波束ダイナミクス法と組み合わせることにより、エネルギー変換過程の実時間量子ダイナミクスへと展開していく。開発した手法を太陽電池系に適用することにより、エネルギー変換効率を上昇させるための分子設計の指針を得る。