



The 940th IMS colloquium
since 1976

(「若手独立フェロー業績報告会」)

大規模電子状態計算による 有機半導体材料の理論研究

Theoretical studies of organic semiconductor materials based on large-scale electronic structure calculations



藤田貴敏 特任准教授

分子科学研究所 理論・計算分子科学研究領域

日時: 2020年1月17日(金) 16:00-

場所: 分子科学研究所 研究棟201

本講演は教授会終了後になります。開始が遅れる場合がございますのでご了承ください。

IoT時代のフレキシブルデバイスとして有機半導体材料が注目を集めている。有機半導体材料の電子物性・光物性の解析や、デバイス中で起こる電荷輸送・エネルギー変換の解明のためには、電子状態計算に基づくアプローチが有用である。しかし、有機材料は乱れた分子集合体であるため、孤立分子向けの量子化学プログラムや周期系向けのバンド計算プログラムでは容易に取り扱うことができない。我々はフラグメント分子軌道法と多体グリーン関数理論に基づいて、有機半導体材料の電子物性を高精度で計算できる手法を開発してきた。本講演では開発してきた計算手法について説明した後、有機薄膜太陽電池のドナー/アクセプター界面に適用した例について紹介する。

