

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~2021年3月31日)*)

千葉 史朱香(事務支援員)

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) 有機太陽電池における界面配向と電荷移動状態の相関の解析
- c) 非フラーレン系アクセプター太陽電池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) 有機半導体の電子物性の予測は合理的な材料開発のために必要不可欠である。本年度は、本グループで開発を行ってきた大規模電子状態計算手法を非局在化した励起状態に計算できるように拡張した。具体的には、GW/Bethe-Salpeter equation (BSE) 法, フラグメント分子軌道 (FMO) 法, 励起子モデルを組み合わせることにより、分子集合体の非局在化した励起状態を効率的に計算できる手法の開発に成功した。
- b) 電子ドナー/電子アクセプター界面の電子状態は界面のモルフォロジーや分子配向に依存するため、界面構造を適切に制御することが電荷分離の高効率化に必要である。そこで、本研究では face-on 配向と edge-on 配向のペンタセン/C₆₀ 界面を作成し電子状態計算を行うことにより、界面で形成される電子状態 (CT) 計算と界面配向の相関を解析し、特に電荷分離に関与する lowest CT 状態と光吸収に寄与する bright CT 状態に着目した。face-on 配向では、lowest CT 状態と bright CT 状態の両方が局在化している。一方、edge-on 配向では lowest CT 状態は局在化しているが、bright CT 状態が非局在化している。本研究により、電荷の非局在化を生かした太陽電池を設計するためには、界面分子を edge-on 配向に制御することが重要であることがわかった。
- c) 近年、フラーレン以外の分子を電子アクセプターに用いる試みが進められており、エネルギー変換効率が上昇を続けている。エネルギー変換効率が大きくなるのは、電荷再結合に伴うエネルギーロスを抑えつつ、電荷分離が効率的に起きるためである。しかし、なぜ非フラーレン系で効率的な電荷分離と電荷再結合の抑制が両立できるかはわかっていない。そこで、ペンタセン/C₆₀ とペンタセン/C8-PTCDI に対して電子状態計算を行い比較することにより、非フラーレン系太陽電池に特有の性質を解明した。本グループで開発した手法により解析を行った結果、ペンタセン/C8-PTCDI 系では光吸収により形成される励起電子より非局在化しているため、励起子束縛エネルギーと再配置エネルギーが減少することを明らかにした。これらはそれぞれ、電荷分離の効率化と電荷再結合の抑制に関与しており、非フラーレン太陽電池特有の性質であるといえる。

B-1) 学術論文

T. FUJITA, Y. NOGUCHI and T. HOSHI, "Revisiting the Charge-Transfer States at Pentacene/C₆₀ Interfaces with the GW/Bethe-Salpeter Equation Approach," *Materials* **13**, 2728 (15 pages) (2020). DOI: 10.3390/ma13122728

B-3) 総説, 著書

T. FUJITA, “First-Principles Investigations of Electronically Excited States in Organic Semiconductors,” in *Organic Solar Cells*, Springer; Singapore, pp. 155–193 (2021). DOI: 10.1007/978-981-15-9113-6_7

T. FUJITA and T. HOSHI, “FMO-Based Investigations of Excited-State Dynamics in Molecular Aggregates,” in *Recent Advances of the Fragment Molecular Orbital Method*, Springer; Singapore, pp. 547–566 (2021). DOI: 10.1007/978-981-15-9235-5_27

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 (2020–).

学会誌編集委員

理論化学会誌「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 (2016–2021).

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).

C) 研究活動の課題と展望

今後の研究計画として, (i) 第一原理計算をベースとしたデバイス特性予測手法の開発と, (ii) FMO法とデータ科学的手法の連携を遂行していく。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。(i)では, 我々が開発を行ってきたFMO法と量子ダイナミクス法を組み合わせ手法に分子接合理論の考え方を取り入れることにより, FMO法から電流–電圧曲線などを予測できる手法を開発する。(ii)では, フラグメント間の様々な記述子に対してデータ科学的手法を用いて解析することにより, 分子集合体の構造に関する特徴量と光電子物性の特徴量の間の相関関係を抽出できる手法を開発する。

*) 2021年4月1日量子科学技術研究開発機構主幹研究員