

有機材料系の光電子物性評価のためのフラグメント分子軌道法の開発

Development of Fragment Molecular Orbital Method for Predicting Optoelectronic

Properties of Organic Materials

分子研¹, ○藤田貴敏¹

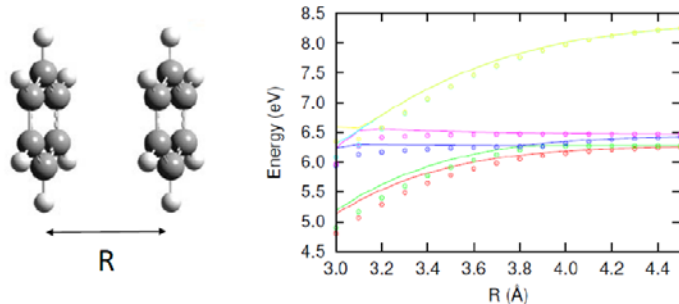
Institute for Molecular Science¹,

E-mail: tfujita@ims.ac.jp

[研究背景] 有機デバイス系の高効率化のためには、デバイス物性を決めている分子レベル・電子レベルの因子を特定する必要がある。しかしながら、有機材料系の電子物性評価のためには、数百分子程度の有機分子集合体の電子状態計算が必須であり、従来の量子化学計算の手法では取り扱うことができなかった。そこで我々はフラグメント分子軌道(FMO)法による有機材料系の光電子物性評価手法を開発してきた。FMO法は系をフラグメントに分割し、フラグメントモノマーやダイマーの量子化学計算を行うことにより、全系の物理量を近似する手法である。計算の過程でフラグメント間の相互作用を計算できるため、凝縮系での分子間相互作用の解析としても有用である。

本研究では、FMO法の考え方を励起状態に拡張することを目的とする。全系の励起状態波動関数をフラグメント内局在励起と、フラグメント間電荷移動励起の線形結合で記述する。開発した計算手法の特徴として、(1)大規模分子系の非局在化した電子励起を取り扱うことができ、(2)多数の励起状態を効率的に計算することができる。これらは大規模有機分子集合体の電子励起スペクトルを解析する上で有用である。さらに、計算の過程でエネルギー移動・電荷移動・電荷再結合などの電子カップリングを定義することができるため、励起状態のダイナミクスや電荷移動度の解析にも用いることができる。

[結果] FMO法は分子軌道法の近似であるため、フラグメント分割を行っていない conventional CIS と比較することにより、FMO-CIS の精度評価を行う。ベンゼン2量体のような π スタック系の安定構造付近では、数十 meV 以下の精度で conventional CIS の結果を再現できることが分かった。他のベンチマークや応用計算については当日報告する。



ベンゼン2量体の構造と励起状態のエネルギーのR依存性。
実線が conventional CIS であり、円が FMO-CIS の結果。