

# コアシェル量子ドットにおける第一原理非平衡輸送解析と構造最適化

## First-principle non-equilibrium analysis and structural optimization in core-shell quantum dots

電通大基盤理工<sup>1</sup>, 電通大 i-PERC<sup>2</sup>

°(M1) 吉田 響<sup>1</sup>, 坂本 克好<sup>1</sup>, 山口 浩一<sup>1</sup>, 曾我部 東馬<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Univ. of Electro-Comm.

E-mail : sogabe@uec.ac.jp

**はじめに** 量子ドット(QD)は体積に対する表面の割合が大きいため、コロイド状の QD の光学特性に影響を与える上で、QD の表面は不可欠である。そこで、コア/シェル構造が開発され、QD のフォトルミネッセンス (PL)、PL 量子収率 (QY)、光安定性が劇的に向上した[1]。近年、第一原理計算による信頼性の高い計算を行うことが可能になったことにより、QD の物性を計算により予測できるようになった[2]。QD のデバイス応用には QD の物性だけでなく、電荷輸送も重要になってくる。図 1 は電荷輸送解析のモデルである。ここで、コアシェル QD のデバイス応用に向けて、第一原理計算と非平衡グリーン関数法を用いて、コアシェル QD の作成および電荷輸送の解析を目指す。

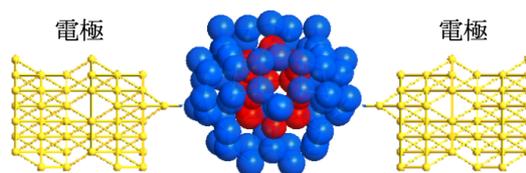


図 1 電荷輸送計算モデルの模式図

**実験結果** 図 2(a),(b)は、作成した量子ドットの Gaussian16 と QuantumATK による計算で得られた最適な構造の模式図を示している。図 2(c),(d) は作成した QD の HOMO,LUMO の電子状態である。Gaussian16 の密度汎関数法を用いて、計算により作成したコアシェル QD の構造最適化を行う。さらに、QuantumATK を用いて非平衡グリーン関数法により最適化された構造のコアシェル QD の電荷輸送の解析を行う。

今後、厚さの異なるコアシェル QD を作成し、コアシェル QD の第一原理計算と非平衡グリーン関数法を用いた電荷輸送解析について研究を行い、会議の際にその結果について報告する。

[1] Sowers, Kelly L., et al. *Chemical Physics* 471 (2016): 24-31.

[2] Kocevski, Vancho, et al. *Scientific reports* 5 (2015): 10865.

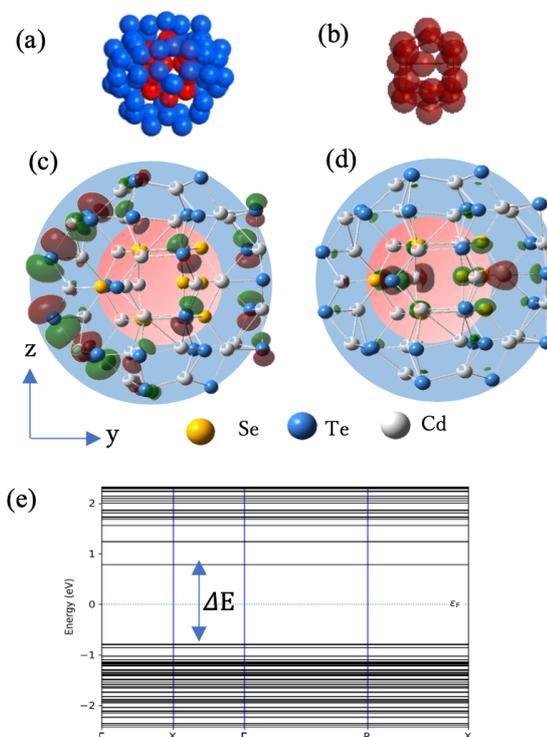


図 2 (a)コアシェル量子ドット模式図, (b)(a)のコアの図, (c),(d) コアシェル量子ドットの HOMO,LUMO の電子状態, (e) コアシェル量子ドットのバンド構造