

# コアシェル量子ドットの光物性予測における第一原理計算と AI 逆設計手法の応用

## Optical dynamics prediction by first-principles simulation and AI based inverse design approach for core-shell colloidal quantum dot

電通大 i-PERC&基盤理工<sup>1</sup>, 東大先端研<sup>2</sup>, 株)グリッド<sup>3</sup>

°(B4) 吉田 響<sup>1</sup>, 坂本 克好<sup>1</sup>, 山口 浩一<sup>1</sup>, 沈 青<sup>1</sup>, 岡田 至崇<sup>2</sup>, 曾我部 東馬<sup>1,2,3</sup>

<sup>1</sup>Univ. of Electro-Comm., <sup>2</sup>The Univ. of Tokyo, <sup>3</sup>Grid inc.

E-mail : sogabe@uec.ac.jp

はじめに これまで、複数の半導体物質からなるコアシェル量子ドットが注目され、実験解析行われてきた。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、量子ドットの物性を計算により予測できるようになった。

[1]しかし、第一原理計算による予測は計算コストが高いため、ごく小規模の分子の計算に限られた。本研究は大きなコアシェル量子ドットの光物性の予測及びコアシェル量子ドットの逆設計のため、第一原理計算、機械学習と強化学習を融合した AI 逆設計手法の構築を目指す。(図 1)

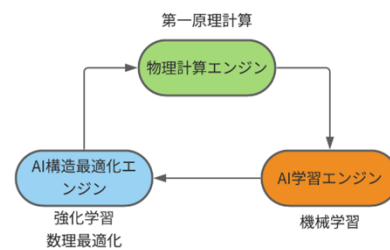


図 1 コアシェル量子ドットの AI 逆設計の仕組み

実験結果 図 2 は、作成した量子ドットの Gaussian16 による計算で得られた結果を示している。量子ドットは Cd,Se,Te から構成される様々な大きさの小規模のコアシェル量子ドットを作成した。

図 2(a)は作成した CdSe/CdTe コアシェル量子ドットである。また、量子ドットの計算は TD-DFT/CAM-B3LYP を用いて行った。図 2(b),(c)は TD-DFT 計算によって得られた CdSe/CdTe コアシェル量子ドットの吸収・蛍光スペクトルと HOMO,LUMO の電子構造である。計算結果と文献[2]で報告されている方法を用いて、蛍光寿命の計算をした。

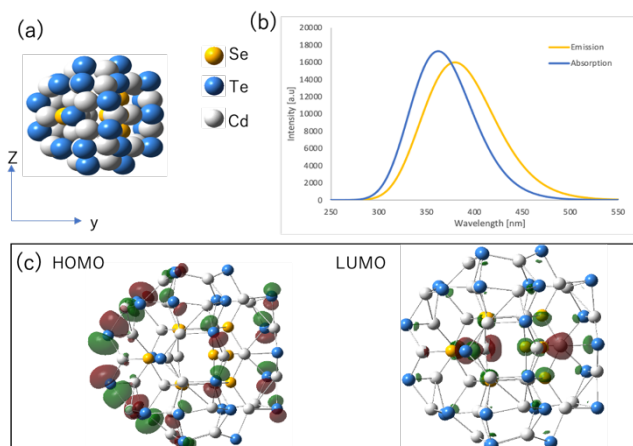


図 2 (a)作成した量子コアシェルドット, (b)量子ドットの吸収・蛍光スペクトル, (c)量子ドットの HOMO,LUMO の電子構造

今後、コアシェル量子ドットの第一原理計算と AI 予測最適化を用いた逆設計手法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] Kocevski, Vancho, et al. *Scientific reports* 5 (2015): 10865.

[2] Wong, Z. C., et al. *RSC advances* 6.90 (2016): 87237-87245.