

2024 年度年次報告書

物質探索空間の拡大による未来材料の創製

2023 年度採択研究代表者

浦谷 浩輝

京都大学 大学院工学研究科／科学技術振興機構

特定助教／さがけ研究者

量子ダイナミクスを理解と制御に立脚した機能材料設計の実現

研究成果の概要

当該年度得られた成果のうち、主なものは次の通りである。

- ① 量子ダイナミクスシミュレーションの計算効率や結果解釈の複雑さは、系の電子状態の表現方法に大きく依存する。量子化学計算で一般的に用いられる断熱表現に代えて、状態の性質が連続的に保たれるような透熱的表現を採用することで、時間変化する電子状態を簡潔に表現できる。本研究では、時間依存密度汎関数理論に基づいて透熱的表現をその場構築する手法を提案した。プログラムを実装してその数値的振舞いを調べた結果、多数の断熱状態が密集している状況下においても、連続な電子状態表現が自然に得られることが明らかとなった(論文準備中)。
- ② 有機太陽電池におけるドナー・アクセプター界面を対象に、大規模な量子ダイナミクスシミュレーションを実施し、界面電荷分離過程の実時間追跡を行った。現実のドナー・アクセプター界面には構造的な乱れが存在する。本研究ではこの構造乱れを明示的に考慮したシミュレーションを実施し、構造乱れのある界面において、電荷分離ダイナミクスが局所構造に強い影響を受けることを見出した(論文 2)。
- ③ 領域内共同研究を通じて、有機電荷移動錯体結晶における分子間及び分子内電荷揺らぎの存在を量子分子動力学シミュレーションと電荷密度解析により明らかにした。また、その起源を振電相互作用の観点から解明した。その上で、当該系において観察される特徴的な相転移挙動との関連を示唆した(論文準備中)。
- ④ 領域内共同研究に基づき、量子化学計算を用いてワイヤ状多核ジピリン錯体における励起子分布及び励起子ダイナミクスの起源を解明した(論文 4)。

以上の成果により、量子ダイナミクスシミュレーション手法開発の進展に加え、領域内共同研究を通して、量子ダイナミクスと実在系の物性や機能との関連についても新たな知見が得られた。

【代表的な原著論文情報】

- 1) S. Ohno, **H. Uratani**, and H. Nakai, *J. Phys. Chem. A* **128**, 5999 (2024).
- 2) P. Pananusorn, H. Sotome, **H. Uratani**, F. Ishiwari, K. Phomphrai, A. Saeki, *J. Chem. Phys.* **161**, 184710 (2024).
- 3) **H. Uratani** and S. Horiuchi, *J. Chem. Phys.* **161**, 201101 (2024).
- 4) R. Toyoda, N. Fukui, H. Taniguchi, **H. Uratani**, J. Komeda, Y. Chiba, H. Takaya, H. Nishihara, and R. Sakamoto, *Nat. Commun.* **16**, 1367 (2025).