

## ソフトな分子とハードな量子ドットのナノ複合体が実現する 超効率的電子移動

(京大院理) 金賢得

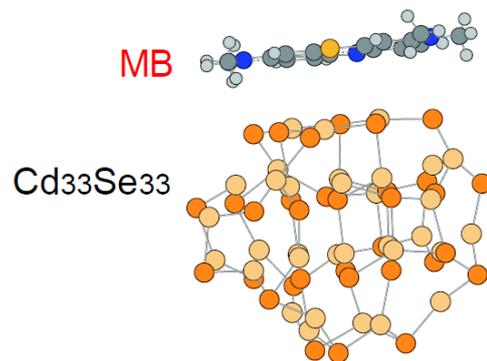
### 【はじめに】

光励起によって半導体量子ドット内部に生成したキャリア（電子または正孔）の非平衡ダイナミクスはその興味深い物理的・化学的特性から大きな注目をあびている。その一方で、量子ドット内部に生成したキャリアをどのように効率的に量子ドット外部に取り出すかは、ほとんど手つかずの未解決問題であり、そこにまた多くの新たな非平衡現象が存在する可能性がある。

我々は、量子ドット単体だけでなく、ハードマターである量子ドットにソフトマターである蛍光色素を修飾したソフトーハードマター複合ナノ構造体において、光励起後の量子ドットから蛍光分子への電子移動を実時間で第一原理的に数値実験できる新しい手法を開発した。この手法によって、量子ドット内部の Auger 相互作用（電子-正孔の強い相互作用）を考慮した蛍光分子へ電子移動を実時間で追うことが可能となった。

### 【結果と考察】

我々は、開発した手法を用いて、右図のようなハードマターである CdSe 量子ドットにソフトマターであるメチレンブルー分子が付着した「ソフトーハードマター複合体」において量子ドットからメチレンブルーへの電子移動を調べた。



計算の結果、マーカス理論における電子移動速度の反転（減少）領域が存在しない新しいタイプの超効率的電子移動が発生することを発見した。

また、量子ドット中に電子とともに生成した正孔が電子移動に伴った余剰エネルギーを受け取り励起することを数値実験的に実証した。我々は、このような電子移動に伴う電子と正孔のエネルギー授受は、量子ドット内に閉じ込められた電子と正孔の強い Auger 相互作用によって発生すると結論付けた。

この電子移動速度に減少領域のない電子移動は、従来のマーカス理論に従わない新しいタイプの電子移動という意味で物理的に重要であるとともに、ナノ素子界面・表面における効率的な電子移動を目指す実用面からも価値ある結果である。

### 【参考文献】

- (1) Haiming Zhu, Ye Yang, Kim Hyeon-Deuk, Marco Califano, Nianhui Song, Youwei Wang, Wengqing Zhang, Oleg V. Prezhdo, Tianquan Lian, *Nano Letters, in press (2014)*.
- (2) Kim Hyeon-Deuk and Oleg V. Prezhdo, *submitted*.