

課題名 (タイトル) :

Calculation of metamaterial devices and plasmonics devices.

利用者氏名 :

竹田晴信, Zhengli Han, 時実悠

理研での所属研究室名 :

テラヘルツ光源研究チーム

| | |
|--|--|
| <p>1. 本課題の研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係</p> <p>テラヘルツ帯におけるメタマテリアルやプラズモニクスデバイスの設計に向けた計算をする予定であったが、HOKUSAI 上に所望するソフトウェアおよび環境がなかった。そこで当初の予定を変更し、テラヘルツ波応答材料の探索に向けた量子化学計算を行った。</p> <p>有機蛍光分子のテラヘルツ波に対する応答を理解する事は、新奇発光・受光デバイス開発に重要となる。しかしその遷移構造の物理的パラメータの詳細を実験的に確認することは容易ではない。特に有機蛍光分子の一種である熱活性遅延蛍光 (TADF) 分子の最低励起一重項(S1)-最低励起三重項(T1)間の遷移過程は未知の部分が多い。そこで、密度汎関数法(DFT)を用いた単分子、また結晶構造の量子化学計算を行うことで、それらの物理的パラメータの検討をつけて、デバイス開発への足掛かりとする。</p> <p>2. 具体的な利用内容、計算方法</p> <p>量子化学計算ソフト Gaussian09 および Gaussian16 と、分子モデリングソフト Gaussview6 を利用して DFT 計算を行っていった。分子構造などの情報については文献から調査した値をもとに Gaussview6 でモデリングしたものを使用した。DFT 計算では主に functional として Cam-B3LYP および M06-2X, basis set として 6-311G(d,p)を利用した。TADF 材料である 2CzPN および 4CzIPN 分子について以下のような計算を実施した。</p> <ul style="list-style-type: none"> ● TADF 材料 <p>2CzPN および 4CzIPN は分子内のカルバゾール基を電荷のドナー、ジシアノベンゼンを亜アクセプタとしており、分子内の立体障害が電子遷移構造</p> | <p>に大きく影響していると考えられる。そこで、テラヘルツ励起時の立体障害の大きさの変化と電子遷移への相互作用についてみるため、それぞれの材料について S1 および T1 の構造最適化、振動数解析を行った。この結果をもとにフランクコンドン項を考慮したテラヘルツ領域における S1-T1 の Absorption と Emission の計算を行った。</p> <p>3. 結果</p> <p>TADF 材料の計算について、S1 と T1 それぞれの振動構造についての PES(Potential energy surface)が得られ、また S1-T1 間の振動緩和を考慮した吸収・発光についての知見が得られた。特に振動構造についてはクライオスタットを利用した低温における分光測定実験の結果とよく一致しており、分子の運動と共鳴周波数との帰属が行えた。</p> <p>4. まとめ</p> <p>新奇発光・受光デバイス開発にむけて有機蛍光分子のテラヘルツ波に対する応答を計算した。DFT を用いた分子の遷移過程にかかる物理的パラメータを計算することができた。計算時間短縮のため使用するパラメータの少ない計算であったが実験結果と良い一致をした。</p> <p>5. 今後の計画・展望</p> <p>今回の計算では単分子のみの計算を行ってきた。実際の分子においては凝集構造、周期構造をとっており、多体効果を考える必要がある。今後は結晶性のある材料についての周期的境界条件を考慮にいたした計算を行い、物理的パラメータの理論計算を行う予定である。また、当初の目的であるメタマテリアル、プラズモニクスデバイスの計算に必要な環境の準備を検討していく。</p> |
|--|--|