

エネルギー機能材料の電子構造と光物性

Electronic states and optical properties of the functional energy materials

京都大学 大学院エネルギー科学研究科 エネルギー基礎科学専攻

量子エネルギープロセス分野 蜂谷 寛

研究成果概要

Nbドープ酸化チタンエネルギー機能薄膜 [1]、および光機能発現への応用の期待される究極のワイドギャップ半導体とされるダイヤモンド [2] に関する実験及びデータ解析を行った。

さらに、熔融 CsCl-AlCl₃ 二元系での第一原理分子動力学法 ADMP (Atom-centered Density Matrix Propagation) によるイオン拡散のダイナミクスの計算も行った。(8×CsAlCl₄)を配置したユニットセルに対して GAUSSIAN09 を用い、汎関数 HSE06 (HSEh1PBE)、基底関数 Modified def2-SVP, time step 0.2 fs で時間発展を計算し、温度を 700 K に設定した。現在までに 2.2 ps にわたるダイナミクスの計算を進めている。

FIG. 1 にイオン配置および構成イオンの平均二乗変位の平方根の例を示す。Cl⁻ イオンは、AlCl₄⁻ ユニットとして動くものと、拡散の大小が二分される Cs⁺ イオンに追随するもの、さらにユニットを越えて大きく拡散するものに分かれることがわかる。

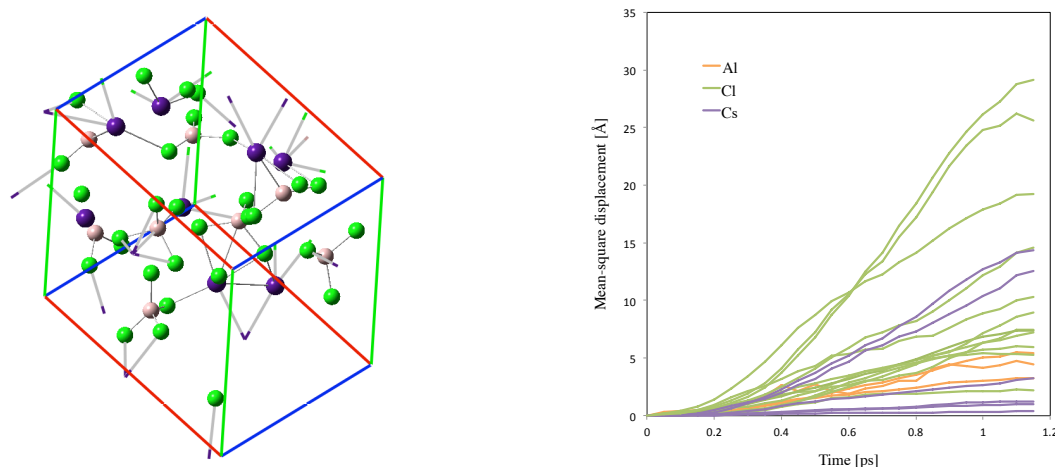


FIG. 1 Examples of ionic configurations after 1.15 ps (left) and mean-square displacement of ions for 1.2 ps (right) following another 1.0 ps of equilibration calculated with ADMP dynamics for molten CsCl-AlCl₃ at 700 K

発表論文(謝辞あり)

なし

発表論文(謝辞なし)

[1] T. Kimura, K. Hachiya, T. Sagawa, *MRS Advances*, **4**, 2665 (2019).

[2] O. Sato, K. Yoshida, H. Zen, K. Hachiya, T. Goto, T. Sagawa, H. Ohgaki, *Physics Letters A*, **384**, 126223 (2020).