

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

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、およびフッ化物溶融塩中でのシリコンオキシフルオライド [1] の格子振動または分子振動を反映したラマン散乱スペクトルに関する共同研究を遂行し、実験及びデータ解析を行った。後者については Gaussian 09 をもちいた汎関数 B3LYP, 基底関数 6-311+G(d) でのラマン散乱スペクトルのシミュレーションも行った。

さらに、溶融 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 Gaussian 09 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。前年度までに続き、ダイナミクスの計算を進めている。

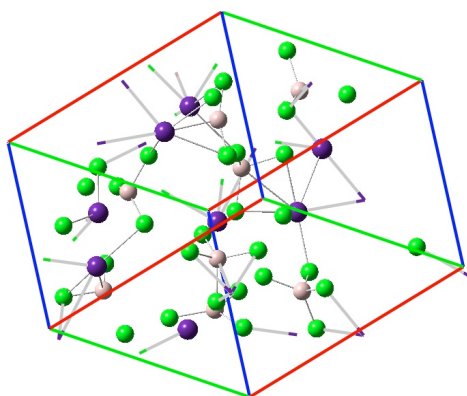


FIG. 1 Examples of ionic configurations after 1.25 ps, following another 1.0 ps of equilibration calculated with ADMP dynamics for molten CsCl-AlCl₃ at 700 K.

発表論文(謝辞あり)

なし

発表論文(謝辞なし)

[1] Y. Suzuki, T. Park, K. Hachiya, T. Goto, *J. Fluorine Chem.*, **238**, 109616 (2020)