

ナノ構造体界面の光励起電子ダイナミクス

Photoinduced Electron Dynamics at Nanostructured Interfaces

分子研¹ ○野田 真史¹, 信定 克幸¹IMS¹ ○Masashi Noda¹, Katsuyuki Nobusada¹

E-mail: noda@ims.ac.jp

高効率・広帯域光応答特性を持つ光・電子機能性量子デバイス（太陽電池、光触媒、光導波路、バイオセンサー等）を開発する際、異種物質相界面、特に光と電子の相互作用が鍵を握るナノ界面における光励起電子ダイナミクスの理解が極めて重要になる。しかし、ナノ界面の電子レベルでの実験的、理論的理解は共に未だ十分ではない。理論的研究の観点からは、ナノ界面の静的な電子状態計算は以前から行われているが、光と電子の相互作用を扱った研究例は格段に少なくなる。ナノ界面として意味を持つ程度のサイズ（数 nm 以上）の系に対して、光励起電子ダイナミクスの第一原理計算を実行することは現状では極めて難しいためである。最近、我々は数～十数 nm サイズの孤立系ナノ構造体の光励起電子ダイナミクスを扱うことができる第一原理計算手法 GCEED (Grid-based Coupled Electron and Electromagnetic field Dynamics)を開発し、光励起電子ダイナミクスとしては、世界最大規模レベルのナノ構造体の光応答計算を実行することに成功した[1]。

本研究課題においては、この計算手法を 2 次元周期系構造

（多層薄膜構造）への展開を試みた。GCEED では時間依存コーンシャム方程式を、実時間・実空間グリッド点上で差分法を用いて数値的に直接解く手法を用いている。簡便なアルゴリズムに基づいており、また、一般的な量子化学計算やバンド計算で使われる対角化やFFTのルーチンが存在しないために、超並列計算が可能である。図 1 は銀クラスターコアとシリコンシェルから構成されるナノクラスターの構造を表し、図 2 はその光吸収スペクトルを図示したものである。銀コアのみ、シリコンシェルのみ、光吸収スペクトルを比較のために示した。この図からコアシェル構造化することにより光応答を変化させることができ、更にはコアやシェルのサイズや厚み、コアとシェルの組み合わせを変えることにより光応答を広範に制御することも期待できる。これは多層薄膜構造を使った光・電子機能性デバイス開発へと展開できる事を示していると考えられる。当日は 2 次元周期構造の光励起電子ダイナミクスについての結果も議論する予定である。

[1] M. Noda et al., J. Comput. Phys. 265, 145 (2014).

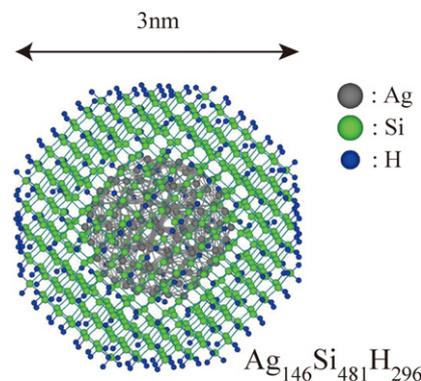


図 1: コアシェルナノクラスター

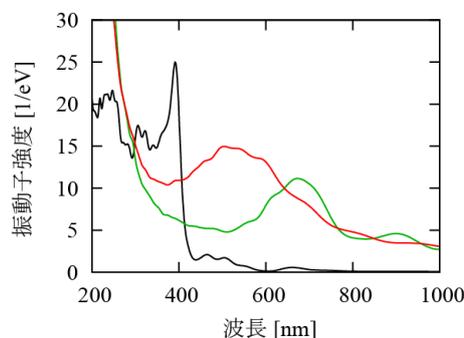


図 2: 光吸収スペクトル。赤線はナノクラスター、黒線は銀コアのみ、緑線はシリコンシェルのみのものである。