

トリプチセン分子膜における光吸収と偏光依存性に関する理論的研究

関西学院大学理工^A, 筑波大学数理物質^B秋田将志^A, 藤井廉丸^B, 丸山実那^B, 岡田晋^B, 若林克法^A

Theoretical study on optical properties and polarization dependence of triptycene molecular membrane

^A School of Science and Technology, Kwansei Gakuin University^B Graduate School of Pure and Applied Science, University of TsukubaM. Akita^A, Y. Fujii^B, M. Maruyama^B, S. Okada^B, K. Wakabayashi^AEmail : ecj93978@kwansei.ac.jp

トリプチセン分子の二次元重合体として提案される人工分子膜 (TMM) は sp^2 炭素原子から構成される π 電子系である。TMM はトリプチセン分子同士を繋ぐ架橋構造の違いによって Zigzag 型 (図.(a)), と Armchair 型 (図.(b)) に分類される。これらの TMM は密度汎関数理論 (DFT) によって熱力学的にも安定した半導体物質であることが指摘されている。[1][2] 特に、TMM の π 電子のネットワークはカゴメ格子を運動する。したがって、そのエネルギーバンド構造は複数のフラットバンドと Dirac 分散から構成される。カゴメ格子が有するフラットバンドと Dirac 分散関係は光吸収に対して興味深い振る舞いを示すことが期待できる。

本研究では、Zigzag 型と Armchair 型の二種類の TMM に関して、DFT で得られた電子状態を Tight-Binding model によって再現し、TMM が持つバンド間遷移における光学特性を理論的に解析した。本講演では、TMM について直線偏光もしくは円偏光照射に対する偏光依存特性について議論する。TMM は直線偏光の偏光方向、また円偏光によって特定の運動量を持つ電子を選択的に励起できる。[3] 図(c)は Armchair 型 TMM に円偏光を照射した際の波数空間における吸収強度である。円偏光による選択励起の性質から TMM は光バレートロニクスデバイスに適した材料であることがわかった。

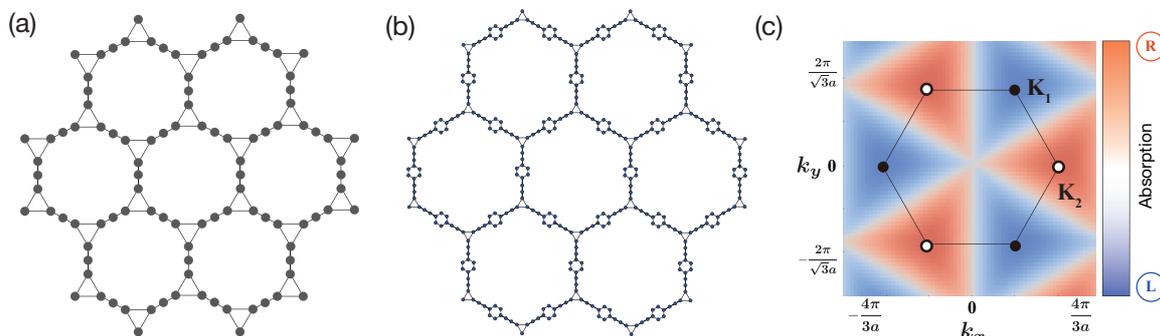


図: 各架橋構造における格子模型 (a)Zigzag 型 TMM。 (b)Armchair 型 TMM。 (c)Armchair 型 TMM に円偏光を照射した際の波数空間における吸収強度。

Reference

- [1] Y. Fujii, M. Maruyama, K. Wakabayashi, K. Nakada, and S. Okada, J. Phys. Soc. Jpn. 87, 034704, (2018).
 [2] Y. Fujii, M. Maruyama, and S. Okada, Jpn. J. Appl. Phys. 57, 125203, (2018).
 [3] M. Akita, Y. Fujii, M. Maruyama, and S. Okada, K. Wakabayashi, Phys. Rev. B (under review)