

2021 年度
創発的研究支援事業 年次報告書

研究担当者	江目 宏樹
研究機関名	山形大学
所属部署名	大学院理工学研究科
役職名	助教
研究課題名	光熱変換機構の解明と熱の自在制御技術の創成
研究実施期間	2021 年 4 月 1 日～2022 年 3 月 31 日

研究成果の概要

本年度は第一原理計算や機械学習の解析コードの確立、スパッタリングや気相合成法によるプラズモン粒子の作製、感温性ゲルを用いた自律型スペクトル伝熱制御機構の開発など、概ね計画通りに研究を遂行できた。本稿では第一原理計算とスパッタリング実験に関して詳報する。

【第一原理計算】

第一原理計算を用いて励起状態の物質の過渡的エネルギー散逸について評価を行った。密度汎関数理論に基づいて電子状態の解析を行い、さらに励起状態の電子を Fermi-Dirac 分布に従う占有率を与えた。この時の原子の時間発展を古典運動方程式により計算し、逐次的にこれらのステップを繰り返し解くことで分子動力学を行った。その結果、多くの材料でイオン温度の過渡的な上昇は 1 ps 以内で起こっていることを明らかにした。本研究項目の知見は光と物質の相互作用の原理解明に寄与するものである。

【スパッタリングによるプラズモン粒子の作製】

太陽エネルギーの収集には、プラズモニック・ナノ流体を用いた直接吸収型太陽集熱器が有効である。プラズモニック・ナノ粒子の太陽吸収性能を向上させれば、製造コストをさらに削減することができる。本研究では、広帯域の吸収スペクトルを示し、かつ大量生産が容易な多層スパッタリング（金属-絶縁体-磁性体）プラズモニック・ナノ粒子を構想している。この粒子の光学特性の物理を明らかにするために、COMSOL Multiphysics を用いた電磁場解析を行った。積層型プラズモンナノ粒子の電磁界解析の結果、吸収効率は粒子径と膜厚に依存し、吸収ピークは粒子径の増加とともに大きく増加し、長いシフトを示すことから、吸収スペクトルが広がっていることがわかった。また、金属層の数やプラズモニック・ナノ粒子の構造を変えることで、吸収スペクトルを制御することが可能であった。本研究は二層プラズモンナノ粒子の有用性を実証している。