

2022 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 機械システム工学専攻
役職名	准教授
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	2022 年 4 月 1 日～2023 年 3 月 31 日

### 研究成果の概要

本年度は第一原理計算による光熱変換過程評価、過渡吸収計測によるヘテロ構造粒子の光熱変換評価、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】

光と物質の相互作用において、物質を構成する電子と核がそれぞれに作用を引き起こしあうが、その物理過程は極めて複雑かつ高速に進行する。このような状況を再現する物質のシミュレーションにおいては、典型的に Born-Oppenheimer 近似が施され、電子の運動と核の運動は切り離される。一方で、強い外場下で運動する分子では、電子と核の間に無視できない非断熱的作用が働くことが報告されている。本研究では、そのようなパルス外場が印加される物質において、電子系と格子（核）系の連成計算を行い、系のエネルギーにどのような影響を及ぼすか評価した。

#### 【過渡吸収計測】

金属ナノ粒子は、局所的な表面プラズモン共鳴 (LSPR) により、特定の波長の光で大きな光吸収の増大、スペクトルシフト、表面電磁場の増大などの光学特性を有している。光熱変換プロセスにおける電子ダイナミクスが、半導体と貴金属のヘテロ接合によって変化することを報告されている。しかし、この電子ダイナミクスの変化が光熱変換プロセスにどのように寄与しているかはまだ不明である。本研究では、半導体ヘテロ接合による電子励起に伴う Au ナノ粒子の電子ダイナミクスの変化を過渡吸収分光法で評価した。