

実空間実時間での TDDFT 法による有機物の光学特性の解析

○加藤舞、遠越光輝、善甫康成

法政大学情報科学部 (〒184-8584 東京都小金井市梶野町 3-7-2)

1. はじめに

PCや携帯電話、TVなどに用いられる有機発光材料を開発する上で材料の特性や特徴を予め解析することは非常に重要である。その一手法として最近注目されているのが時間依存密度汎関数法(TDDFT法)であり、電子状態を時間発展させることで発光に必要な励起状態の記述が期待できる重要な計算手法である。我々は実空間実時間におけるTDDFT法[1,2]を用いて有機物の光学吸収スペクトルを算出し、分子の構造によるスペクトルを求めてきた。

2. 手法

光学スペクトルの振動子強度を算出する過程では、MEM(Maximum Entropy Method)を用い、効率的な解析を試みる。光学吸収スペクトルは、双極子モーメントの時間発展で得られるデータにMEMを用い、比較的短いステップ数で全振動子強度を算出する。[3]

3. 解析結果

図1はFFT、MEMによるフルオレンの光学スペクトルである。双極子モーメントの20,000ステップまでの結果でFFTよりスペクトルを求めた結果と、10,000ステップまでの結果でMEMよりスペクトルを求めた結果を比較したものである。MEMでは半分程度の比較的短いデータでFFTと同様のスペクトルを求めることができる。とわかる。

また、FFTではステップ数を上げれば、スペクトルをある程度正確に求めることができるが、有機物の場合、分子が大きくなると計算に時間がかかり効率的なスペクトルの算出にも時間がかかる。MEMを用い

ると、上述の通り、計算時間の効率化を図ることができ有利である。また、材料のスクリーニングを行う場合など実時間のTDDFTの場合、ある程度のスペクトルが判明した時点で計算を打ち切ることができる。これに加え、MEMをもちいると更にその時間を短縮することができるものと期待される。報告では他の光学材料に適用した結果についても述べる。

参考文献

- [1] K. Yabana, G.F. Bertsch, *Int. J. Quant. Chem.* **75**, 55 (1999)
- [2] J. R. Chelikowsky, N. Troullier, K. Wu and Y. Saad, *Phys. Rev.* **B50**, 11355 (1994)
- [3] 遠越、加藤、狩野、善甫、SCCJ 2013春期年会 2O05 (SCCJ秋年会 1P11参照)

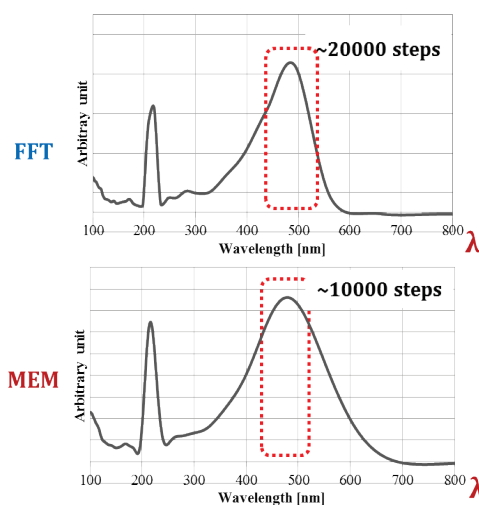


図1 FFT、MEMによるフルオレンの光学スペクトル