

発光ガラス材料における光吸収・発光時の電子・格子ダイナミクスの計算科学的探索

国立研究開発法人産業技術総合研究所 宮本良之

目的 光デバイス向けの色中心を含む透明ガラスの材料探査

内容 YAG結晶中のCe発光中心における光吸収後の緩和過程の探査

結果 YAG結晶中のCe不純物および酸素欠陥導入時の光励起状態およびその格子緩和による発光波長の変調を調べた。酸素欠損はCe原子に一番近い部位に最も安定に発生しやすく、光励起後のFranck-Condon緩和によるCe近接酸素原子の運動により、より赤方偏移した発光があるいは無輻射緩和で非発光になる可能性を得た。

利用した計算機

ノード時間

使用メモリ

ベクトル化率

並列化

SX-ACE

131,690時間

632 GB

99.6%

80並列

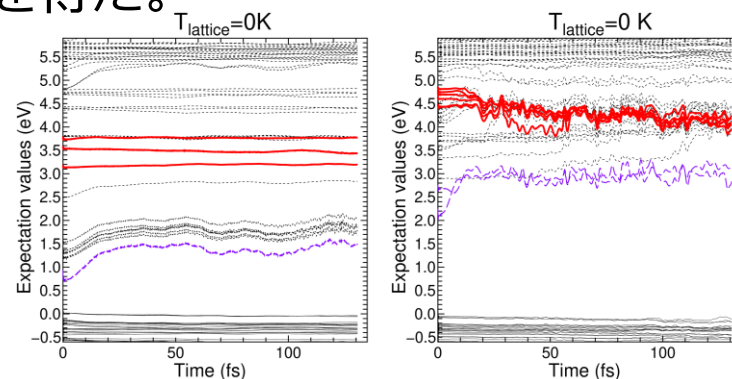


図 酸素欠陥の無い場合(左)とある場合(右)とで比較したFranck-Condon緩和による電子準位の時間発展。横軸は時間(fs)、縦軸は電子準位。紫はCe 4f準位、赤はCe 5d準位で右のほうが準位間が狭まる。