

分子軌道計算ソフトgaussian09による ポリスチレン系慣性核融合ターゲット材料の吸収スペクトル計算 大阪大学レーザーエネルギー学研究センター TFTグループ 渡辺梢

<目的>

慣性核融合実験において、プラズマの発生におけるレーザーとターゲットの相互作用の初期過程は多光子吸収による寄与が大きいと考えられる。本研究ではターゲット材料の基礎データの1つとして、二光子吸収係数をZ-スキャン法によって計測し、計測結果をスーパーコンピュータによる分子軌道計算結果と比較する。

<計算内容>

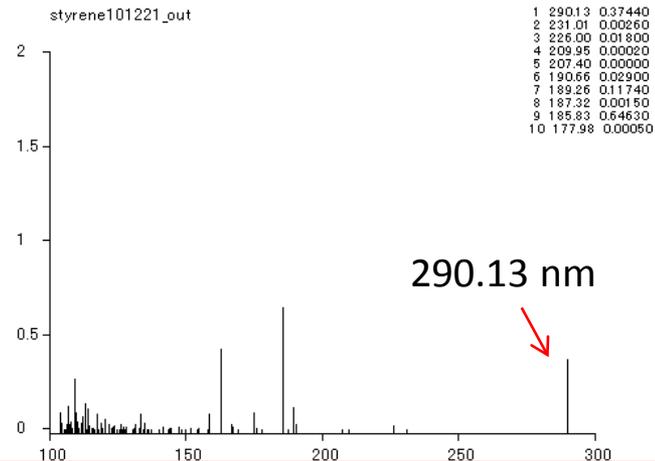
サイバーメディアセンターPCクラスターに搭載された分子軌道計算ソフトgaussian09を利用して紫外-可視吸収スペクトルの計算を行った。

<計算結果例>

計算条件としてhf/6-31++G**を用い、長波長側から100本分のスペクトルを計算した。p-ブロモスチレンでは、スチレンに対し吸収端の長波長シフトがみられ、実験結果と一致した。

<今後>

分子軌道計算ソフトDALTONにgaussian09の計算結果を挿入し、二光子吸収係数を計算、計測結果と比較する予定である。



吸収端の長波長シフト(~4 nm)が見られる。

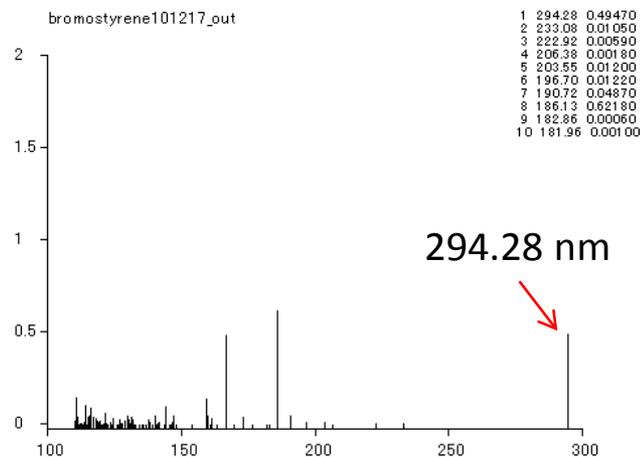


Fig. ターゲット材料の紫外-可視吸収スペクトル計算結果 (左図:スチレン、右図:p-ブロモスチレン)