

平成 年 月 日

氏名 田村 友幸



21世紀 COE プログラム

拠点：大学院工学系研究科

応用化学専攻、化学システム工学専攻、

化学生命工学専攻、マテリアル工学専攻

“化学を基盤とするヒューマンマテリアル創成”

平成15年度リサーチ・アシスタント報告書

ふりがな 氏名	たむら ともゆき 田村 友幸	生年 月 日
所属機関名	東京大学大学院工学系研究科材料学専攻	
所在地	〒113-8656 東京都目黒区駒場 4-6-1 生産技術研究所 電話 03 (5452) 6098	
申請時点での 学年	博士課程 3 年	
研究題目	第一原理に基づく酸化物ガラス中の欠陥に関する研究	
指導教官の所属・氏名	大学院工学系研究科マテリアル工学専攻 山本良一 教授	

## I 研究の成果 (1000字程度)

(図表も含めて分かりやすく記入のこと)

光ファイバのコアに紫外光を照射すると、屈折率変化を生じる。これを利用して光ファイバ上にブラッグ回折格子を形成したものがファイバブラッググレーティングである。光誘起屈折率変化において重要な役割を担うのが、コア中に添加されている Ge およびそれに関連した欠陥中心であると考えられているが、これらの近傍の微視的構造は明らかではない。本研究では、第一原理分子動力学法を用いて、Ge 添加  $\text{SiO}_2$  中の欠陥近傍の原子構造および電子状態を理論的に解明することを目的としている。

擬ポテンシャルは、Si 原子および Ge 原子は HSC 型、O 原子は TM 型を用い、平面波打ち切りエネルギーは 70Ry とした。立方体中に 96 個の原子を含むセルを用いた。k 点は  $\Gamma$  点のみである。この場合、波動関数は実数化することができ、大幅なメモリの低減と計算効率の向上が可能である。

これまでに、第一原理計算により作成した a- $\text{SiO}_2$  および a- $\text{GeO}_2$  構造から酸素原子抜き取って作成した酸素欠乏欠陥の計算結果を報告した。今年度は、a- $\text{GeO}_2$  中の酸素欠乏欠陥 Ge-Ge の励起状態下での構造変化のシミュレーションを行った。具体的には、セル中から電子 1 個を抜き取って電荷 +1 とし、Ge-Ge 間距離と全エネルギーの関係を調べた。その結果を図 1 に示す。少なくとも 2 つの安定構造が存在し、エネルギー差は約 0.2eV であった。約 3.4Å で Ge-Ge 結合は切断され、片方の Ge 原子(Ge1)が近隣の O 原子(O1)と新たに結合を形成し、もう一方の Ge(Ge2)原子は Ge- $\text{E}^{\ominus}$  中心となって最安定構造となった(図 2)。

以上のことから、酸素欠乏欠陥にレーザーが照射されると、Ge-Ge 結合が切断され、Ge- $\text{E}^{\ominus}$  中心へと構造変化を起こし(図 3)、安定に存在することがわかった。これは、小さいクラスターモデルを用いた最近の理論研究とは異なる結果である。本研究から、近隣の酸素原子が重要な役割を果たしていることがわかるが、従来の理論研究ではこの効果を考慮しておらず、これまでのクラスターモデルの問題点を指摘している。

欠陥の光誘起構造変化を利用することにより、レーザー光を用いて光デバイスを自在に加工することも可能となり、ヒューマンマテリアル創成への寄与は大きいと考えられる。

第一原理分子動力学法は高精度に原子構造と電子状態を求めることができる反面、多くの計算時間を要するのが現状である。そこで、大規模構造の高効率計算汎用プログラムを独自に開発した。これは、波動関数のメモリサイズの大幅な低減と階層演算のループサイズを減らすことによる大幅な計算効率の向上を可能としたものである。さらに、今後の計算機技術はメモリ分散型の並列機が主流と考えられ、そうした場合の並列化に対応できるアルゴリズムが有利である。しかし、従来から用いられている共役勾配法では波動関数の互いの直交化のための CPU 間のデータ転送のために効率が落ちる。そこで新たなアルゴリズムを採用し、計算コードの並列化を行うことにより、メモリ分散型並列計算機を用いた場合にほぼ 100%に近い並列化効率が得られ、計算時間を飛躍的に短縮することに成功した。

## I 研究の成果 (1000字程度)

(図表も含めて分かりやすく記入のこと)

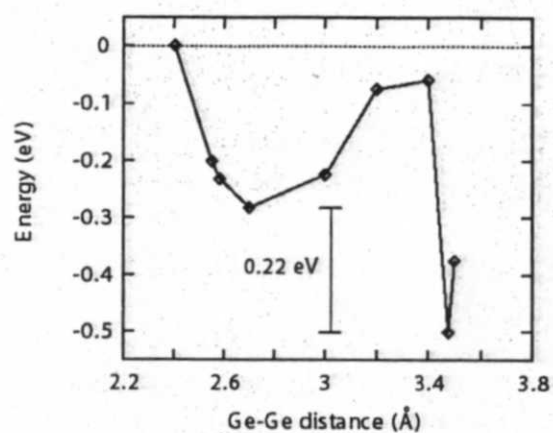


図 1. Ge-Ge 間距離と全エネルギーの関係。

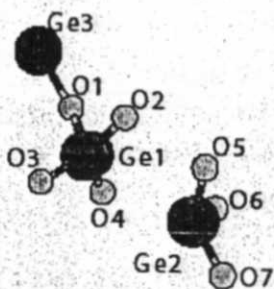


図 2. 最安定構造。

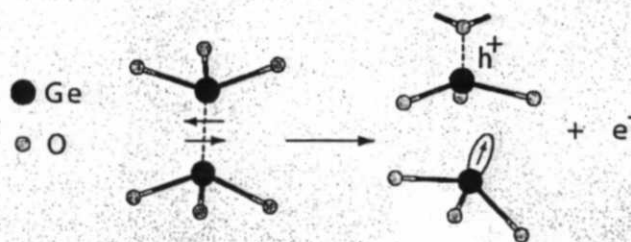


図 3. レーザー照射による酸素欠乏欠陥の構造変化。

氏名

田村 友幸

II (1) 学術雑誌等に発表した論文（掲載を決定されたものを含む。）

共著の場合、申請者の役割を記載すること。

（著者、題名、掲載誌名、年月、巻号、頁を記入）

Tomoyuki Tamura, Guang-Hong Lu, Ryouichi Yamamoto and Masanori Kohyama,

"First-principles study of neutral oxygen vacancies in amorphous silica and germania", Physical Review B, submitted.

Tomoyuki Tamura, Guang-Hong Lu, Ryouichi Yamamoto, Masanori Kohyama, Shingo Tanaka, Yuji Tateizumi,

"MPI parallelization of the first-principles pseudopotential method program with respect to each band", Modelling Simulation Mater. Sci. Eng., submitted.

Tomoyuki Tamura, Guang-Hong Lu, Ryouichi Yamamoto and Masanori Kohyama,

"E" center in Ge-doped SiO<sub>2</sub>", Physical Review B, submitted.

香山正憲、田中真悟、岡崎一行、田村友幸

「第8回分子動力学シンポジウム講演予稿集」、日本材料学会、pp.16-pp.20

氏名

田村 友幸

II (2) 学会において申請者が口頭発表もしくはポスター発表した論文  
(共同研究者(全員の氏名), 題名, 発表した学会名, 場所, 年月を記載)

日本物理学会 2003 年秋季大会 22aX-10

日本金属学会 2003 年秋季大会 S<sub>5</sub>・16