

審査の結果の要旨

氏名 田村友幸

光通信需要は現在著しく増加しており、波長多重方式による大容量・高速の光ファイバー網の設置が急がれている。波長多重方式における光通信技術の将来の課題の一つは情報ネットワークの全光化であり、電気信号処理でまかなっている部品を光回路に置き換えることであると言われている。そのためにはガラス材料の内部に種々の機能を搭載した光集積回路を実現する必要があり、ガラス内部や表面に光により新たな機能を作りこむ技術の確立が必要不可欠である。光加工の例としてファイバー回折格子がすでに実用化されている。これは、Ge 添加 SiO_2 ガラスにレーザー光を照射すると屈折率変化が誘起されることを利用して、光ファイバーのコアに周期的な屈折率変化を書き込んだものである。光加工の広範囲な応用を実現するためには光反応機構の解明が必要であり、光反応にはガラス材料中の点欠陥が重要な役割を果たすと考えられているため、その基礎的研究が求められている。本研究は、このような背景の下に、第一原理分子動力学法を用いて Ge 添加 SiO_2 ガラス中の点欠陥の原子構造・電子状態を理論的に計算し、材料の光学特性のシミュレーションを行ったものである。すなわち、電子論の観点から光誘起屈折率変化のメカニズムを考察することを主たる目的としたものであり、全 6 章からなる。

第 1 章は序論であり、ガラス中の点欠陥に関するこれまでの研究を、主に計算機シミュレーションの観点から概観し、本研究の目的と論文の構成について述べている。

第 2 章では、固体電子構造の計算方法について述べている。本論文で用いられた第一原理分子動力学法は、密度汎関数理論に基づく平面波展開擬ポテンシャル法によるバンド計算法である。

第 3 章では、バンド間並列化導入による第一原理計算の高速化について述べている。従来の共役勾配法に代わり RMM-DIIS(Residual minimization method· direct inversion in the iterative subspace)法を採用した第一原理擬ポテンシャル法の計算プログラムを新たに開発している。バンド間並列化を行った結果、プロセッサ数にほぼ反比例して演算時間が減少している。RMM-DIIS 法が原子数の多い系のための高速計算手法として有効であることが明らかにされている。

第 4 章では、光ファイバー材料である SiO_2 ガラスと GeO_2 ガラスの原子構造と電子状態のシミュレーションを行っている。まず、古典分子動力学法を用いてガラス構造を計算し、

得られた構造をさらに第一原理分子動力学法を用いて構造緩和を行うことにより、欠陥を含まないガラス構造モデルを作成している。得られた SiO_2 ガラスおよび GeO_2 ガラス構造モデルの原子構造と電子状態は実験結果(二体相関関数、XPS スペクトル)とよく合致していることを確認している。次に、ガラス中の酸素欠乏欠陥のシミュレーションを行っている。 GeO_2 中ではボンドネットワークの柔軟性により欠陥近傍の歪みが緩和しやすく、短い Ge-Ge 間距離で安定化しており、その結果、酸素欠乏欠陥の形成エネルギーが SiO_2 中に比べて小さくなると述べている。従って、実験で観測されているように、 SiO_2 中に比べて GeO_2 中には多くの酸素欠乏欠陥が存在すると結論している。さらに、励起状態における酸素欠乏欠陥の構造変化のシミュレーションを行っている。その結果、 GeO_2 中の Ge-Ge にレーザー光が照射されると結合が切断されて非対称緩和が生じ、Ge-E'中心が形成されることにより、ギャップ中に存在する欠陥準位が高エネルギー側にシフトするというモデルを提案している。

第 5 章では、光ファイバー材料である SiO_2 ガラスと GeO_2 ガラス、およびガラス中の点欠陥の光学特性のシミュレーションを行っている。まず、 SiO_2 ガラスと GeO_2 ガラスの電子系誘電関数のシミュレーションを行い、実験的に求められた光学スペクトルをよく再現していることを確認している。次に、ガラス中の酸素欠乏欠陥およびレーザー光照射により形成される Ge-E'中心の電子系誘電関数を計算し、光誘起屈折率変化のシミュレーションを行っている。その結果、酸素欠乏欠陥の構造変化により屈折率が 0.11 (スーパーセルあたり) 増加すると結論している。これは、実験の欠陥濃度で換算すると 0.4×10^{-5} となり、実験値の上昇分に近いとしている。

第 6 章は、本研究の総括である。

以上を要するに、本研究は第一原理計算を用いて、従来難問とされていた光ファイバー材料における「光誘起屈折率変化のシミュレーション」を行い、電子論の観点から光反応機構の解明を図ったものである。その結果、Ge 添加 SiO_2 ガラスにおいて、 GeO_2 領域に多くの酸素欠乏欠陥が存在し、これらが光照射によって Ge-E'中心へと構造変化することにより光吸収スペクトルが変化し、屈折率が増加すると結論している。これは、ガラス中の酸素欠乏欠陥濃度を高くすることにより、より大きな光誘起屈折率変化を得ることができること、レーザー光による加工の応用範囲をこれまで以上に広げることが可能であることを示したものであり、材料物性工学の発展に大きく寄与している。

よって、本論文は博士(工学)の学位請求論文として合格と認められる。