

演 題	第一原理計算による希土類イオンの濃度消光に関する研究	
発 表 者 (所 属)	岡 健太郎 FDK 株式会社	
連 絡 先	FDK 株式会社 湖西工場 〒431-0495 静岡県湖西市鷲津 2281 TEL : 053-575-2544 FAX : 053-575-1651 E-mail : okaken@fdk.co.jp 所属: 技術開発統括部 新技術開発部 CAE 開発課	
キ ー ワ ー ド	第一原理計算、FLAPW 法、Er、濃度消光	
開 発 意 図 適 用 分 野 期 待 効 果 特 徴 な ど	局所密度近似に基づく第一原理計算手法である FLAPW 法(full-potential linear-augmented plane-wave)を用いてガラス中の Er イオンの高利得化を実現するには、どのような元素をドーピングすればよいかについて凝集エネルギーと f 電子数の変化から議論した。	
環 境	適 応 機 種 名	
	O S 名	
	ソ ー ス 言 語	
	周 辺 機 器	
流 通 形 態 (右 の い ず れ か に を つ け て く だ さ い)	<ul style="list-style-type: none"> ・日本コンピュータ化学会の無償利用ソフトとする ・独自に頒布する ・ソフトハウス、出版社等から市販 ・ソフトの頒布は行なわない ・その他 ・未定 	具 体 的 方 法

第一原理計算による希土類イオンの濃度消光に関する研究

(FDK 株式会社) 岡 健太郎

[緒言] Er ドープ導波路アンプにおいて Er の濃度を増加させていくと、濃度消光 (concentration quenching) によって Er ドープ導波路アンプの増幅効率が減少していく。ホストに Er イオンを添加した場合、Er イオン同士がクラスタリングを形成することでチャージバランスを保ち、ホストガラスのネットワークに入る。クラスタリングを形成することによってイオン間距離が減少し増幅効率の低下が引き起こされる [1]。濃度消光を抑制する最も一般的な方法は、 Al_2O_3 を添加物とする方法であり、特許 [2][3] においては Yb を添加することで濃度消光を抑える方法が報告されている。第一原理計算手法を用いてガラス中の Er イオンの高利得化を実現するには、どのような元素をドープすればよいかについて検討した。

[方法] Figure. 1 は計算モデル $Er_2O_3 - sM$ 構造である。この構造はバルクの Er_2O_3 の結晶構造における 8 個の Er 原子 (8d サイト) を異なる添加物 M で置換した構造である。仮想的にバルクの Er_2O_3 構造を用いたのは、ガラスを局所的にみれば、 Er_2O_3 構造の結晶構造のように各 Er の周りに酸素が配位した状態でクラスタリングしホストに溶け込むと考えたことによる。計算手法としては FLAPW 法 (full potential linear augmented plane wave) を用いて、電子状態計算をおこなった。主として 3 価の典型金属元素 (Mg, Al, Ga, In, Tl, Sb, Bi, Yb) を添加物元素 M とし、各添加物 M に対する $Er_2O_3 - sM$ 構造に対して計算を実行した。

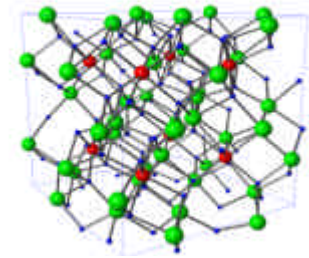


Figure 1:
計算モデル $Er_2O_3 - sM$ 構造。
赤丸は置換元素 M、緑丸は Er 原子、青丸は O 原子。

[結果] Figure 2 は $Er_2O_3 - sM$ 構造の凝集エネルギーの結果である。凝集エネルギーが大きいほど $Er_2O_3 - sM$ 構造は凝集しやすく、この添加物 M が入ることによって必然的に Er イオン間距離は長くなり、Er イオンの分散性が向上する。結果、 $M=Yb, Al, Sb, In, Bi, Mg, Ga, Tl$ の順で凝集エネルギーを得た。添加物 M を Al および Yb にしたときの凝集エネルギーの利得は、従来、濃度消光抑制として Al または Yb を添加したことと一致する結果を得た。当日は、凝集エネルギー、Er イオンの f 電子数の変化および f 軌道に対する振動子強度を計算し添加元素 M による変化を調べており、その結果も合わせて詳細に報告する。

[謝辞] 本研究を行うにあたり、広島大学先端物質科学研究科 小口多美夫教授ならびにその研究グループの方々に深く感謝いたします。

[参考文献]

- [1] K. Arai, H. Namikawa, K. Kumata and T. Honda, J. Appl. Phys., 59 (1986) 3430.
- [2] 古河電気工業:2002-9376特許公開
- [3] 旭硝子:2002-145636特許公開

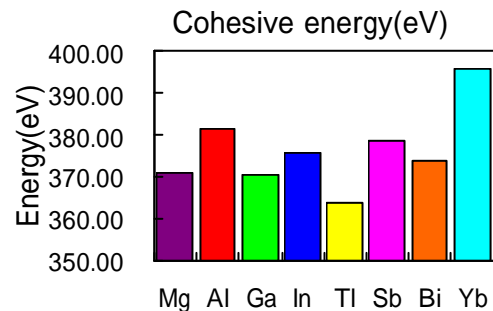


Figure2: $Er_2O_3 - sM$ 構造の凝集エネルギーの結果。単位は eV で単位格子当たりのエネルギーである。