



分類	ナノシミュレーション
キーワード	第一原理計算、電磁波物性
開発者	濱田智之、初田浩義、大野隆央
作成年月	2006年6月
コード名	UVSOR 2.00
使用言語	Fortran90

#### ◇第一原理法に基づく誘電応答解析プログラム UVSOR：電子系及び格子系の誘電応答予測

UVSOR (Universal Virtual Spectroscope for Optoelectronics Research) は、電子及び光デバイス用材料の電磁波物性を第一原理擬ポテンシャル法に基づき原子レベルで計算するプログラムである。UVSOR 2.00 は平成 17 年度に「フリーソフトウェア」として公開したプログラム UVSOR 1.00 の機能を拡張したものである。UVSOR2.00 は、プログラムソース、使用説明書、および基本的な計算結果などの資料とともに、「フリーソフトウェア」として公開される。

UVSOR 2.00 は、静電場静電場 (0 ヘルツ)～紫外域での誘電関数に加え、可視及び紫外波長域での非線形光学感受率 (2 次) をその波長依存性を考慮して計算できる。解析可能な非線形光学過程は、第 2 高調波発生 (SHG) である。また、UVSOR 2.00 は電子および正孔の有効質量を計算することができる。UVSOR 2.00 は、high-k/low-k 材料に代表されるエレクトロニクス材料のほか、太陽電池等の光電子デバイス、ならびにレーザ光学・オプトエレクトロニクスで用いられる波長変換素子をはじめとする非線形光学素子材料のシミュレーション設計に用いることができる。

#### ◇プログラムの概要

- (1) 入力ファイルを PHASE と共用している。このため、対象とする物質の解析を容易に行うことができる。
- (2) ノルム保存型及びウルトラソフト型擬ポテンシャルを用いることができる。
- (3) 全電子計算と同じ SHG 非線形光学感受率テンソル (実部および虚部) を、テンソルの波長依存性を考慮して計算できる。
- (4) 電子及び正孔の有効質量を、異方性を考慮して計算できる。計算には  $k_p$  摂動法を用いている。

本ソフトウェアは文部科学省次世代 IT 基盤構築のための研究開発プログラム「革新的シミュレーション

「ソフトウェアの研究開発」プロジェクトのもとで開発された。本プロジェクト WEB ページ (<http://www.rss21.iis.u-tokyo.ac.jp/>) より 2006 年 6 月に公開を予定している。

◇計算例

1. SHG 非線形光学感受率の計算

Zinc-blende (ZB) 型化合物半導体の SHG 非線形光学感受率テンソルを UVSOR 2.00 を用いて計算した。計算には、ノルム保存型擬ポテンシャル (Ga) 及びウルトラソフト擬ポテンシャル (N, P, As, 及び Sb) 及び GGA 密度汎関数法を用いた。ZB 型結晶の独立な  $\chi^{(2)}$  テンソル成分は xyz 成分のみである。Table 1 に化合物半導体の静的な  $\chi^{(2)}_{xyz}$  を、Figure 1 に GaN の  $\chi^{(2)}_{xyz}$  スペクトルを示す。静的な  $\chi^{(2)}_{xyz}$  計算の結果は、文献値及び実測値を良く再現している。スペクトル形状も、全電子計算の結果と良く一致している。

Table 1 : Zinc-blende 型化合物半導体の SHG 非線形光学感受率  $\chi^{(2)}_{xyz}(0)$  ( $10^{-8}$  esu).

結晶	UVSOR (GGA)	文献	実測
GaN	4.38	2.8 <sup>a</sup>	—
GaP	20.7	17.9 <sup>b</sup>	17.7
GaAs	36.2	41.1 <sup>b</sup>	38.6
GaSb	110.3	—	115

<sup>a</sup> GGA-FLAPW (*Phys. Rev. B* 61, 2632).

<sup>b</sup> LDA- 擬ポテンシャル (*Phys. Rev. B* 53, 10751).

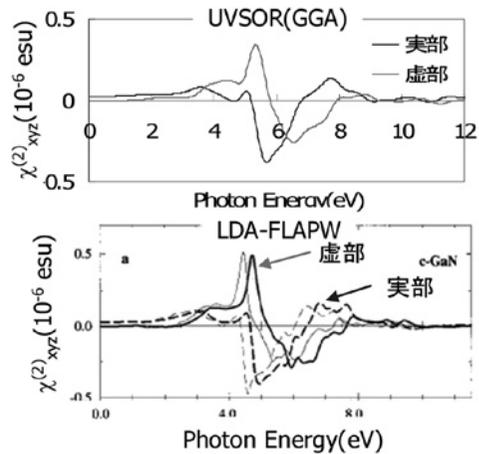


Figure.1 : GaN (zinc-blende) の  $\chi^{(2)}(-2\omega; \omega, \omega)$  スペクトル

Table 2 : Si 結晶の電子・正孔有効質量 (LDA)

	UVSOR	フィッティング法 <sup>a</sup>	実測
electron		価電子帯端	
long	1.03	0.96	0.92
trans	0.18	0.16	0.19
hole		(100)Γ-X direction	
light	0.16	0.18	0.17
heavy	0.27	0.26	0.46

<sup>a</sup> LDA-FLAPW (L.E. Ramos *et al.*, *Phys. Rev. B*, 63, 165210 (2001).)

2. 有効質量計算

Si 結晶の電子及び正孔の有効質量を UVSOR 2.00 を用いて計算した結果を Table 2 に示す。電子質量は、計算結果は、エネルギーフィッティング法の結果及び実測値を良く再現している。UVSOR 2.00 は、有効質量の計算に有効であることがわかる。