

# 計算機シミュレーションによる 材料の光学特性の予測

住友化学(株) 筑波研究所  
善 甫 康 成  
石 田 雅 也  
秋 野 喜 彦

## Numerical Study of Materials for Optical Properties – Predictions for Materials Design –

Sumitomo Chemical Co., Ltd.  
Tsukuba Research Laboratory  
Yasunari ZEMPO  
Masaya ISHIDA  
Nobuhiko AKINO

Time dependent density functional theory has been applied to the study of optical responses in the conjugated polymers such as poly(9,9-dialkyl-fluorene) and dielectric responses in semiconductors such as C, Ge, Si, and AlGaAs. In this study, real-space and real-time calculation techniques are used for the electronic states instead of the conventional basis-expansion techniques. Our method seems more efficient since a relatively small number of meshes is required for obtaining results with reasonable accuracy, which depends on an adjustable parameter, the total number of time steps. The methods and the calculations of optical and dielectric properties will be described in detail.

### はじめに

最近のIT関連材料の技術革新は非常に早い。インターネットの普及に伴い、PCはもとより携帯電話やテレビなど、通信技術と表示装置の発達には目覚しいものがある。それに伴い、多くの発光材料が開発されていることは、特に注目すべきものである。一方では、計算機技術の発展とその利用技術の進歩により、物性を解析し予測する技術が急速に進歩してきている。数年前までには考えられないような大規模な計算が日常的に行われており、その解析結果が材料開発にフィードバックされてきている。

発光材料の光学特性に関する、従来の量子化学計算においては、材料のHOMO-LUMOを計算し、発光波長や吸収波長の予測に充てていた。しかし、エネルギーギャップ等の限られた情報に基づく解析であり、十分とは言えるものではなかった。一方、ここ数年の間における計算機利用技術の急速な進歩としては、密度汎関数法 (Density Functional Theory : DFT) の利用が挙げられる<sup>1)–4)</sup>。この密度汎関数法は、比較的良好な精度を維持しつつ、高速に計算を進めることができるため比較的大きな分子等の解析

においても実績を挙げてきている。最近の代表的な量子化学計算プログラムにも、この方法に関連した幾つかの手法が導入されている。

密度汎関数法の利用技術においては、計算を効率的に進める手法として、Car-Parrinello法<sup>7)</sup>、あるいは共役勾配法<sup>8), 9)</sup>など多くの改良がなされてきた。それらに加え特に最近、注目されてきているものが、時間依存密度汎関数法 (Time Dependent Density Functional Theory : TDDFT) と呼ばれる手法である<sup>10), 11)</sup>。密度汎関数法は基底状態の理論であるため、発光に重要な励起状態を完璧に記述するものではないが、それをある程度解決するものとして期待されている手法である。我々も高分子LED等の発光材料に関連し、数年前よりこの手法を利用し、研究を進めてきた。ここでは、この時間依存密度汎関数法とその活用について、その適用例や今後の発展について報告する。

構成は、以下のとおりである。まず時間依存密度汎関数法について簡単に説明を行ったあと、発光・吸収スペクトルの解析、誘電率および光学定数の算出について密度汎関数法を応用した例を紹介する。最後にまとめと今後の発展について述べることとする。

## 時間依存密度汎関数法

材料の解析を進めるには電子状態を解く必要がある。その際、重要かつ困難なことは多体問題を解かなければならないことである。実際、相互作用をしている多数の電子の方程式をそのまま解くわけにはいかないため、通常一電子近似を用いる。多体に関連する交換相関相互作用を表すために、密度汎関数法では、交換相関項を導入する。密度汎関数法の歴史は古く1964年HohenbergとKohnが、外部相互作用のある系の全エネルギーは電子密度の汎関数として表されることを示したこと、1965年にKohnとShamが、独立系の一粒子波動関数から全エネルギーを計算できることを示したことに基づいている<sup>1), 2)</sup>。この密度汎関数法の基本となる方程式はKohn-Sham方程式と呼ばれ、(Eq. 1)のように表される。

$$\left\{ -\frac{1}{2} \nabla^2 + \sum_a V_{ion}(\vec{r} - \vec{R}_a) + V_{e-e} + \mu_{xc}(n(\vec{r})) \right\} \psi_i(\vec{r}) = \epsilon_i \psi_i(\vec{r}) \quad (\text{Eq. 1})$$

ここで、 $V_{ion}(\vec{r} - \vec{R}_a)$ は原子と電子の相互作用、 $V_{e-e}$ は電子間のクーロン相互作用、 $\mu_{xc}$ は交換相関ポテンシャルを表す。なお、陽に表記する場合を除き、表式は $\hbar = m = e^2 = 1$ の原子単位系を用いることとする。電子密度は $n(\vec{r}) = \sum_i |\psi_i(\vec{r})|^2$ で表され、 $\psi_i(\vec{r})$ は電子の波動関数を表す。ここで $i$ はバンドを示す。交換相関項は局所的に一律な電子の電荷密度による交換相関エネルギーの汎関数形で記述することにより、一般に利用しやすい形となり、広く用いられるようになった<sup>3), 4)</sup>。もちろん現在も多くの改良が加えられている。

密度汎関数法は基底状態を基にしているため励起状態を記述するには不十分である。そこで、電子状態を時間依存させることにより励起状態を表す時間依存密度汎関数法 (TDDFT) が、RungeとGrossにより1984年に提唱された<sup>10)</sup>。

$$\left\{ -\frac{1}{2} \nabla^2 + \sum_a V_{ion}(\vec{r} - \vec{R}_a) + V_{e-e} + \mu_{xc}(n(\vec{r}, t)) + V_{ext}(\vec{r}, t) \right\} \psi_i(\vec{r}, t) = i \frac{\partial}{\partial t} \psi_i(\vec{r}, t) \quad (\text{Eq. 2})$$

この手法は、ポテンシャル部分が時間に依存する場合、例えば時間によって変動する電場や磁場中での電子の振舞いや、断熱近似が成り立たないような化学反応を扱う場合などに利用される。これらの現象解析においては、励起状態を扱う必要があるが、これまでの計算例などから経験的に、このような励起状態をTDDFTは良く記述できることが分かってきた。ただし、この手法は密度汎関数理論が前提であり、正しい結果が理

論的に保証されるのは基底状態に対してのみであることから、現在発展中の方法といえる。

通常この種の解析には平面波や原子軌道、Gaussian等の基底関数で波動関数を展開する手法が用いられるが、我々がこのTDDFTを利用するために用いたのは、基底を用いず実空間・実時間を用いる解析手法である<sup>11)</sup>。これはプログラムが簡便になることと直感的に理解できるという利点があるからである。また、実時間を用いているため、計算する全時間ステップがそのまま精度につながる。もちろん計算には多くの計算資源を必要とするが、これは最近の計算機の進歩に合致した方法といえる<sup>12)</sup>。

一般的な量子化学計算プログラムとして知られているGaussian等でも、多体問題の基本的な近似法の一つであるランダム位相近似を用いたTDDFTが取り入れられており、簡便な方法として利用されている<sup>13)</sup>。我々も材料の解析を行うために、これらの手法を組み合わせて利用している。

## 発光・吸収スペクトルの解析

高分子LEDは、次世代の表示あるいは照明用途として期待が寄せられている。高分子LEDはFig. 1に示すように、陰極と陽極の間に高分子を用いた発光層を挟んだ単純な構造をしているところが特徴であり、発光層に注入された電子とホールが再結合をすることにより発光する。その際、LED素子の発光色はポリマーの特性により決定されるため、発光材料の光学特性を予測する事は、開発において非常に重要になる<sup>14)</sup>。

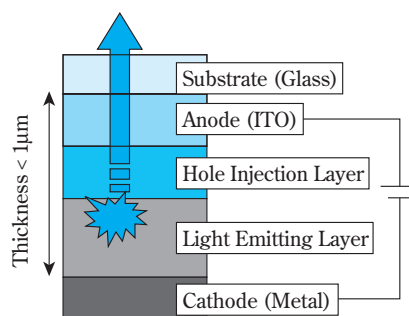


Fig. 1 Structure of Polymer LED

本節においては、上述したように、材料の光学特性を解析するために最適な手法と考えられるTDDFTを用いて行った高分子LED材料の発光・吸収スペクトルに焦点をあてた解析について紹介する<sup>15)</sup>。

計算手順は以下の通りである。まず基底状態における電子状態を、局所密度近似 (Local Density Approximation : LDA)<sup>3), 4)</sup>を用いた密度汎関数法 (Eq. 1) に

より求める。その際、上述したように波動関数を基底より展開するのではなく、計算に用いる実空間を等間隔のメッシュに細分し、各メッシュにおける波動関数を直接扱う。従って、メッシュサイズが計算精度に直結する。本節における計算では、等間隔メッシュ  $d \sim 0.3\text{\AA}$  程度を用いた。このメッシュサイズにより、炭化水素系の全エネルギーにおいては  $\sim 0.1\text{eV}$  の精度が得られる。次に、この最適化された電子状態に外部から摂動

$$i(t=0) = e^{ikx} i(0) \quad (\text{Eq. 3})$$

を加え、それに伴う波動関数の時間発展を追跡する(ここで、 $e^{ikx}$  項は  $x$  方向の  $t=0$  による摂動を表し、 $x$  方向に瞬間的に電場を印加したことに相当する)。波動関数の時間発展は、時間発展演算子を用いて、

$$i(t) = e^{-iHt} i(0) \quad (\text{Eq. 4})$$

で与えられる。実際の計算においては、時間発展演算子  $e^{-iHt}$  を、4次まで Taylor 展開することにより行った。

光学的な応答は、次式で与えられる強度関数  $S(\omega)$  から求めることが出来る。

$$S(\omega) = \frac{2m}{\hbar e^2} \text{Im} \left( \chi(\omega) \right) \quad (\text{Eq. 5})$$

ここで、 $\chi(\omega)$  は動的分極率を表し、

$$\chi(\omega) = \frac{1}{k} \int dt e^{-i\omega t} \mu(t) \quad (\text{Eq. 6})$$

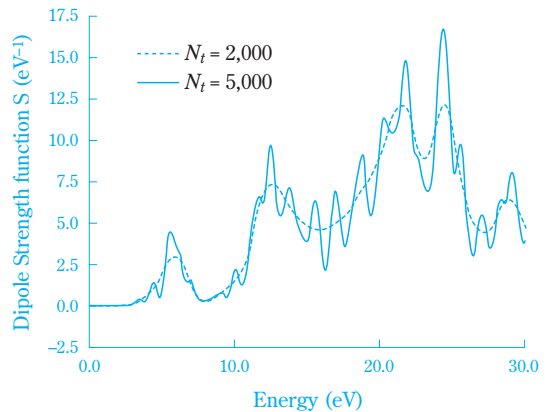
で与えられる。ここで、 $\mu(t)$  は、時間依存の双極子モーメント

$$\mu(t) = \frac{e^2}{\hbar} \int dt e^{i\omega t} \chi(\vec{r}, t) \quad (\text{Eq. 7})$$

を表す。

実時間法で TDDFT を解く場合、時間ステップの幅  $\Delta t$  と総時間ステップ数  $N_t$  が重要となる。Fig. 2 は、 $\text{C}_{60}$  について、時間ステップ  $\Delta t = 0.001\hbar/\text{eV}$  を用い、総時間ステップ数  $N_t = 2,000$  の場合と  $N_t = 5,000$  の場合を比較したものである。得られるエネルギーの解像度は時間を長く取った方が明らかに改善されているのが分かる。特に低エネルギー側の吸収ピークが  $\sim 3.5$ 、 $\sim 4.4$  及び  $\sim 5.6\text{eV}$  に見られるようになる。これらは、実験的に観測される  $\sim 3.8$ 、 $4.8$  及び  $5.8\text{eV}$  と良く一致している。一方、 $N_t = 2,000$  の場合にはこれらのピークは見られないことから、時間発展が不十分である

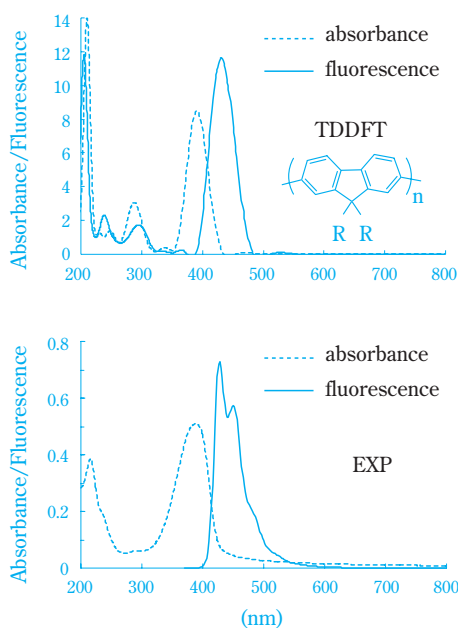
と言える。この例から分かるように、総時間ステップ数  $N_t$  はエネルギーの有効解像度を定める重要なパラメータである。また一方で、 $\Delta t$  は系のエネルギーが保存するような大きさに設定する必要がある。これらの点が、TDDFT を実時間にて解く場合の注意点として挙げられる。試験的に行った炭化水素の計算により、 $N_t \Delta t = 10\hbar/\text{eV}$  であれば  $\hbar/N_t \Delta t = 0.1\text{eV}$  程度の分解能が得られる事を確認した。なお、擬ポテンシャルは Troullier-Martins 型の分離形<sup>5), 6)</sup> と交換相関エネルギーは局所密度近似 (LDA)<sup>3), 4)</sup> を用いた。実空間の計算におけるもう1つの利点は、原子数を  $N_a$ 、次元数を  $D$  とした場合、CPU 時間が  $N_a D \sim N^2$  のオーダーとなるため、大きな系を扱うことができる点、さらに実時間解析により Fig. 2 に示したように任意のエネルギー領域全体にわたるスペクトルプロファイルが一度の計算により得られる点が挙げられる。



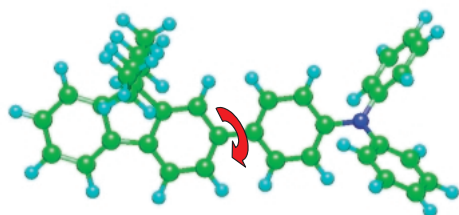
**Fig. 2** Strength function of the molecule  $\text{C}_{60}$ . The solid and dashed lines correspond to  $N_t = 5,000$  and  $2,000$ , respectively

典型的な青色の高分子LED材料として良く知られている9,9-dialkyl-fluoreneについて、TDDFTを用い吸収・発光スペクトルを求めた結果をFig. 3に示す。得られたスペクトル形状およびピーク位置を実験結果と比較してみると、非常によく一致していることが分かる。特に吸収ピークについては390nm付近のピーク波長が実験と計算でほぼ一致しており、TDDFTによる計算の効果が得られているものと思われる。一方、実験では発光スペクトルの450nm付近にサブピークを持っており、この計算では現れていないが、420nm付近の主ピークでは計算および実測ともほぼ一致していることがわかる<sup>16)</sup>。

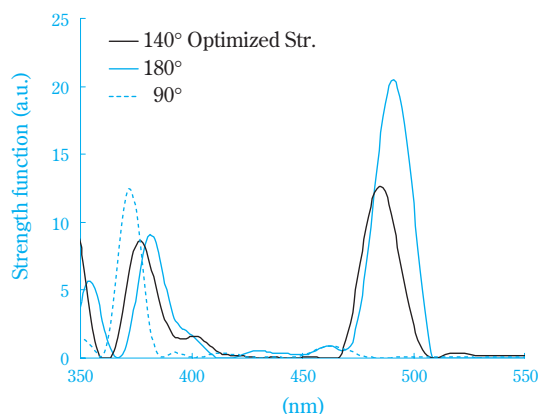
次に、fluorene-amine間の二面角と吸収スペクトルとの解析を行った。Fig. 4にあるような9,9-dipropyl-fluoreneとtriphenylamineについて、結合の二面角を変え吸収スペクトルへの影響をTDDFTにより解析し



**Fig. 3** Calculated (upper) and experimental (lower) optical properties of fluorene



**Fig. 4** Dihedral angle between 9,9-dipropyl-fluorene and triphenylamine, whose angle is  $\pm$  about  $140^\circ$  in the optimized structure



**Fig. 5** Dihedral angle dependence of absorption spectra

た結果をFig. 5に示す。安定構造である $\pm 140^\circ$ 付近では、吸収スペクトルのピークが $\sim 485\text{nm}$ にある。一方、結合位置におけるベンゼン環どうしが平行になる $\pm 180^\circ$ 付近では、ピークは $\sim 490\text{nm}$ と長波長化する

が、吸収強度は強くなる。さらに、結合位置におけるベンゼン環どうしが垂直になる $\pm 90^\circ$ 付近ではピークは $370\text{nm}$ と短波長化するが、吸収強度はそれほど変わらないことが分かる。長波長化する場合は、波動関数の共役が非局在化し、逆に短波長化する場合は共役がより局在化するためである。

このように、TDDFTを用いた解析を行うことにより、分子の構造から光学特性を予測することができる。従って、必要な光学特性に合わせ、分子構造を変えて設計していくことも可能になるものと思われる。

### 誘電率と光学定数の算出

電子デバイスの特性を左右する誘電関数は物質や構造により大きく変わる。また動的な特性が必要とされることも多い。誘電関数は、一般に静的な電子状態の固有値を求め、外場に対する応答として求められる。従って、TDDFTは材料の光学特性や誘電関数のような時間依存の現象を解析する有用な方法としても期待されている。例えば、電子デバイスの増幅特性を表す相互コンダクタンスは材料の誘電関数と直接関連しているため、これを算出することによりデバイスの増幅特性を予測することが可能となるはずである<sup>17), 18)</sup>。

計算の方法は、前述のTDDFTの基本方程式を次のように変形して解析を行う。対象となる物質は半導体や酸化物などの結晶である。系のハミルトニアンにおいて、電磁場との相互作用はクーロン場 $V(\vec{r})$ の中に入れ、これが周期境界条件およびベクトルゲージ場 $\hat{z}A(t)$ を満たすようにする。この場合ゲージ場は $\vec{r}$ に依存せず一定となり、電場は次のように表すことができる。

$$\vec{E} = -\vec{\nabla}V - \hat{z} \frac{d\vec{A}}{dt} \quad (\text{Eq. 8})$$

これを元にラグランジアンを作り、一般化された運動方程式から、誘電関数は次のように表すことができる。詳細は文献 8)を参考されたい。我々の誘電関数の計算では、系に $t=0$ で、刺激 $A(0^+) = A_0$ を与える。これは電場が短時間誘起されたことに対応する。分極場は $-dA(t)/dt$ で与えられるので、表面電荷 $(t) = dA(t)/4 dt$ について時間発展をさせる。誘電関数 $(\epsilon)$ は、(Eq. 9)で表されるため、

$$\frac{1}{(\epsilon)} - 1 = \frac{1}{A_0} \int_{0^+}^{\infty} e^{i t - t} \frac{dA(t)}{dt} dt \quad (\text{Eq. 9})$$

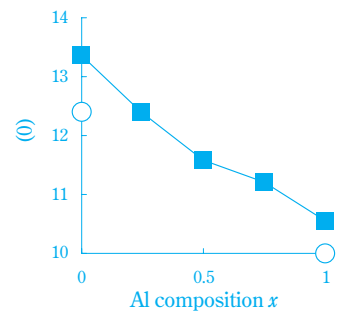
分極場のフーリエ係数として求めることができる。ここで $(\epsilon)$ は非常に小さな数で $(\epsilon)$ の虚数部を導入するための定数である。

我々の実際の計算では、まず実空間で等間隔メッシュを用いて、 $A=0$ の条件下で静的に基底状態の電子密度を求め、続いて時間発展を行う。メッシュ間隔は精度に関連しており、例えばダイヤモンドなどでは $0.1\text{eV}$ の精度を出すために、 $d\approx 0.3\text{\AA}$ のメッシュが必要である。この計算では $d\approx 0.45\text{\AA}$ 、時間発展ではステップを $\Delta t\approx 0.001\hbar/eV$ とした。総ステップ数は、 $N_t=20,000$ とした。この総ステップ数は誘電関数を精度よく再現する程度に長く取る必要がある。総ステップ数が短いと、前述したように特に低エネルギー領域の応答の解像度が低下することになる。ここで扱う周期系では、単位セル当たり8個の原子を配置し、各セルを $16^3$ 点(ダイヤモンド)あるいは $12^3$ 点(その他の系)で分割した。擬ポテンシャルは前節の場合と同様、Troullier-Martins型の分離形<sup>5), 6)</sup>と交換相関エネルギーは局所密度近似(LDA)<sup>3), 4)</sup>を用いた。

基本的な半導体材料(C, Si, Ge, AlGaAs)について、得られた結果をFig. 6、7、8に示す。誘電関数の算出に当たっては、バンド内にプラズマ振動に関連したピークが現れるため、算出されたバンドギャップ以下の $\text{Im}(\epsilon(\omega))$ はゼロであるとして補正を行い、Kramers-Kronigの関係式により、 $\text{Re}(\epsilon(\omega))$ を算出した。密度汎関数法の枠組みの中での計算であるため、ピークの立ち上がりは実測と比べて低エネルギー側に位置するが、いずれの場合においても誘電関数の実部・虚部ともに、その分散形状をよく再現することが分かる。また、高エネルギー領域で実測とのズレが生じているが、低エネルギー領域では計算結果と実験結果は良い一致を示している<sup>19)</sup>。ダイヤモンドにおいては全領域にわたり、良い一致を示している

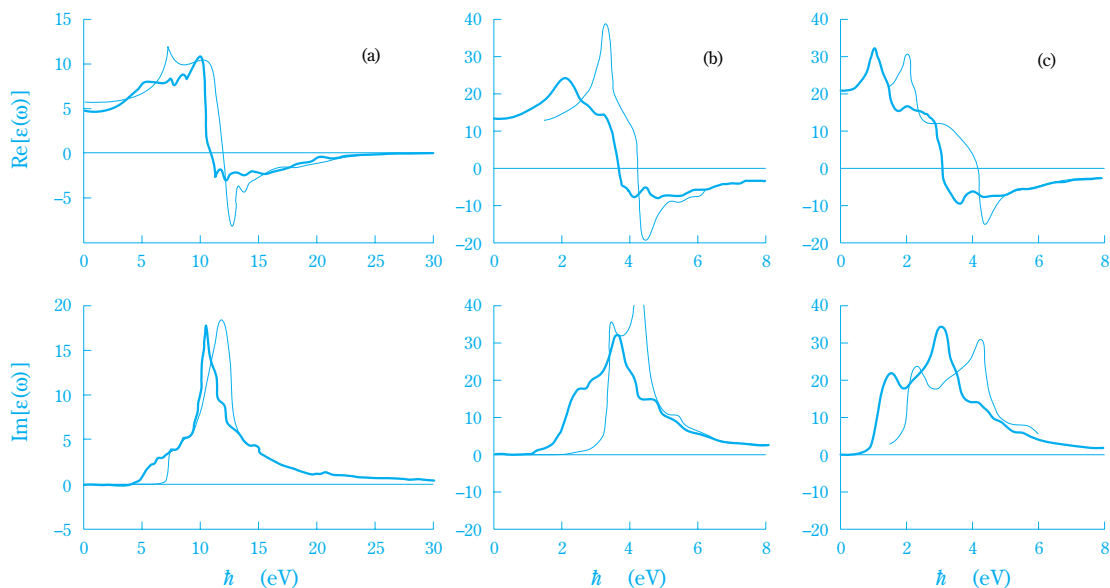
が、特に、静的な誘電関数  $\epsilon(0)$ に関しては、実験と非常によく一致している。

化合物半導体 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ の組成 $x$ を変え誘電関数  $\epsilon(0)$ をプロットしたものがFig. 7である。実測値  $\epsilon(0)=12.4$  ( $x=0$ )および  $\epsilon(0)=10.06$  ( $x=1$ )は、よく一致をしており、計算値は  $\epsilon(0)$ は $13.36$  ( $x=0$ )から $10.60$  ( $x=1$ )まで単調に減少する。 $x=0.45$ 付近で伝導帯の極小値と価電子帯のエネルギーバンドの分離が $\Gamma$ 帯からX帯に変わるため誘電関数  $\epsilon(0)$ も同様に変化を示す様子も見られる。



**Fig. 7** The calculated static dielectric constant shown by squares is plotted as the composition of aluminum  $x$  in  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$

Fig. 8は、 $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ の組成比 $x$ に対する誘電関数の周波数依存性を示す。吸収スペクトルに関連する虚数部において、バンド中での対称性より、ギャップを挟んだバンドに対応したピーク $E_1$ と $E_2$ の2つのピークがある。 $E_1$ ピーク( $2.0\text{eV}$ 付近)が $E_2$ ピーク( $3.5\text{eV}$ 付近)より小さく算出される。これはLDAに起

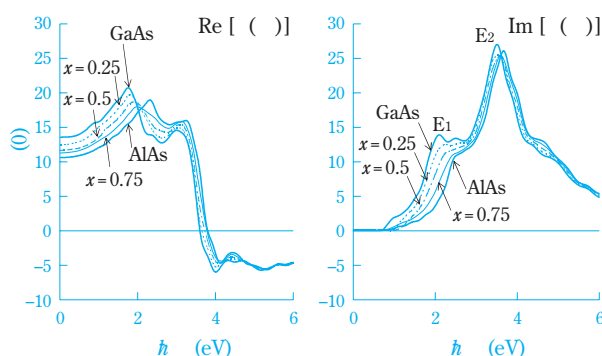


**Fig. 6** The real and imaginary part of the dielectric functions for (a) diamond, (b) silicon and (c) germanium. Thick and thin lines represent the calculated and experimental value, respectively

因するものであることが知られており、今後改良を行わなければならない大きな課題である。

なお、ここで求めた誘電関数は電子分極に起因するものであり、配向分極に起因するものについては取り扱えないことに注意する必要がある。また、光学材料の解析に必要な光学定数である屈折率 $n$ 、および消光係数 $k$ については、この誘電関数から求めることができるので、これを用いて材料の光学特性も導くことができる。

ここではTDDFTを用いて単純な物質と組成からなる結晶系における誘電関数や光学特性を算出する手法について紹介した。もちろん多様な層構造を含んだ、より大きな系での解析も基本的に可能である。今後の計算機の発達に伴い、この種の解析ができるようになるものと期待している。



**Fig. 8** Dielectric properties of  $\text{Al}_x \text{Ga}_{1-x} \text{As}$ . Solid lines represent those of GaAs and AlAs respectively. Dashed, dashed-dotted and dashed-two-dotted lines show those of  $\text{Al}_x \text{Ga}_{1-x} \text{As}$  ( $x=0.25, 0.5, 0.75$ ). Calculated static dielectric constants  $\epsilon(0)$  are 13.36 ( $x=0$ ) and 10.60 ( $x=1$ ), compared to those of experimental values 12.4 ( $x=0$ ) and 10.06 ( $x=1$ )

### まとめと今後の技術発展

最近注目されているTDDFTについて実空間・実時間の計算法を紹介した。励起状態をある程度記述することができるため、発光材料の解析に用いることができるものと思われる。この報告では、共役高分子の光学的性質、および半導体材料の誘電関数に関する計算結果の一部を紹介した。また、誘電関数から光学材料の解析へも展開可能であり、大いに期待が持てる手法といえる。

この手法の特徴として、比較的少ないメッシュ数での計算にも関わらず、実測と比較的良好な一致を示す結果が得られることと、精度がステップ数によるため必要な精度に合わせた計算をすることができ

る点があげられる。また、一度の計算により、任意のエネルギー領域における吸収・発光スペクトルや誘電関数を算出することが出来るので、更に都合がよい。もちろん十分な計算資源があることが前提である。

材料開発において極めて重要な物性である材料の電気的特性や光学的特性等の時間依存の現象解析がTDDFTにより可能になり、将来の材料の開発への基礎が出来上がったと、我々は確信している。

最後に、この報告では手法の概要のみであり、詳細については触れることができなかった。これについては添付する文献リストを参照していただければ幸いである。

### 謝辞

時間依存密度汎関数法の解析については筑波大学物理学系の矢花一浩教授に様々な議論をしていただいた。ここでお礼を述べたい。また、ここで紹介した計算は、NAREGIナノ実証研究の結果と地球シミュレータセンターにおいて計算を行ったものの一部を用いていることを書き添えたい。

### 引用文献

- 1) P. Hohenberg and W. Kohn, *Phys. Rev.* **136**, B864 (1964).
- 2) W. Kohn and L. J. Sham, *Phys. Rev.* **140**, A1133 (1965).
- 3) D. M. Ceperley and B. J. Alder, *Phys. Rev. Lett.* **45**, 566 (1980).
- 4) J. Perdew and A. Zunger, *Phys. Rev.* **B23**, 5048 (1981).
- 5) N. Troullier and J. L. Martins, *Phys. Rev.* **B43**, 1993 (1991).
- 6) L. Kleinman and D. Bylander, *Phys. Rev. Lett.* **48**, 1425 (1982).
- 7) R. Car and M. Parrinello, *Phys. Rev. Lett.* **55**, 2471 (1985).
- 8) T. A. Arias, M. C. Payne and J. D. Joannopoulos, *Phys. Rev.* **B45**, 1538 (1992).
- 9) F. Shimojo, Y. Zempo, K. Hoshino and Mitsuo Watabe, *Phys. Rev.* **B52**, 9320 (1995).
- 10) E. Runge and E. K. U. Gross, *Phys. Rev. Lett.* **52**, 997 (1984).
- 11) K. Yabana and G. F. Bertsch, *Phys. Rev.* **B54**, 4484 (1996).
- 12) J. Chelikowsky, N. Troullier, K. Wu, and Y. Saad, *Phys. Rev.* **B50**, 11355 (1994).
- 13) <http://www.gaussian.com/>.
- 14) E. I. Haskal, M. Büchel, P. C. Duineveld, A. Sempel

- and P van de Weijer, *MRS Bulletin* **27**, 864 (2002).
- 15) N. Akino and Y. Zempo, *MRS Proceedings* **846**, DD2.3 (2005).
- 16) A. W. Grice, D. D. C. Bradley, M. T. Bernius, M. Inbasekaran, E. P. Woo and W. W. Wu, *Appl. Phys. Lett.* **75**, 3270 (1990).
- 17) G. F. Bertsch, J.-I. Iwata, Angel Rubio and K. Yabana, *Phys. Rev.* **B62**, 7798 (2000).
- 18) Y. Zempo and N. Akino, *MRS Proceedings* **829**, B9.33 (2005).
- 19) D. E. Aspnes and A. A. Studna, *Phys. Rev.* **B27**, 985 (1983).
- 20) Otfried Madelung (Ed.), "Semiconductors-Basic Data 2<sup>nd</sup> revised edition", Springer (1996).

PROFILE



**善甫 康成**  
*Yasunari ZEMPO*  
 住友化学株式会社  
 筑波研究所  
 主席研究員 理学博士



**秋野 喜彦**  
*Nobuhiko AKINO*  
 住友化学株式会社  
 筑波研究所  
 主任研究員 Ph.D.



**石田 雅也**  
*Masaya ISHIDA*  
 住友化学株式会社  
 筑波研究所  
 主席研究員