平成 28 年度
九州大学情報基盤研究開発センター
民間利用成果報告書

提出日：平成 29 年 4 月 26 日

利用課題名		Ⅲ-Ⅴ族化合物半導体の超格子構造における第一原理計算				
課題責任者	企業名	住友電気工業株式会社 (解析技術研究センター) 印				
	フリガナ 氏名	シオザキ マナブ 塩崎 学 印	部署名	解析技術研究センター CAE オプトアナリシスグループ	職位	グループ長
	連絡先	住 所：〒244-8588 神奈川県 横浜市 栄区 田谷町 1 E-mail：shiozaki-manabu@sei.co.jp		TEL 045-853-7260 FAX 045-851-4500		
利用期間		平成 28 年 4 月 1 日 ～ 平成 29 年 3 月 31 日				
利用成果公開延期希望の有無		■ 即時公開 ・ □ 公開延期（成果公開予定： 平成 年 月）				

※利用成果報告書は原則公開ですが、課題終了後最大 2 年間公開を延期することが可能です。

- 本様式の変更はできません。
- 補足資料を付加することは可能です。

受付番号	2	受付日 平成 29 年 5 月 1 日	受付印	上田

■利用計画全体の概略（申込書と同じ内容を記述してください）

1） 利用目的

Ⅲ-Ⅴ族化合物半導体の超格子構造に関し、QSGW 法を用いた第一原理計算を行う。超格子のバンド構造を明らかにできれば、中赤外受光素子をはじめ、超格子デバイスの特性向上が期待できる。

2） 利用意義

波長 3μm 以上の中・長赤外線を検知できる赤外線受光素子は、暗視カメラ、環境ガス検知、衛星からの気象観測等、様々な用途で用いられる。受光材料として、HgCdTe が広く用いられているが、近年、これに代わる材料として InAs/GaSb Type Ⅱ超格子が注目されている。この超格子は、InAs の伝導帯が GaSb の価電子帯よりもエネルギーレベルが低い特異なバンド構造をしており、InAs・GaSb 単体のバンドギャップより小さなバンドギャップ、すなわちより長波長の受光が可能となる。さらに、それぞれの膜厚を調整することで、カットオフ波長を 3～30μm と広い範囲で調整が可能である。一方で、まだ開発途上の受光材料であり、詳細なバンド構造が不明であることから、十分に最適化された材料設計とは言えず、高感度化・ノイズ低減・高温動作など、特性向上の余地が残されている。また、他の材料系の超格子や、超格子を用いた発光素子なども同様な課題があると思われ、本計算機システムの利用により、超格子のバンド構造を明らかにできれば、これら超格子デバイスの特性向上につながり、産業上の意義は大きいと考えている。

3） 必要性

一般に、化合物半導体の第一原理計算では、擬ポテンシャル法が広く用いられているが、バンドギャップに関しては誤差が大きいなどの問題も知られている。本システム利用の協力者である鳥取大学 小谷教授が研究している QSGW 法は、計算負荷が高いもののバンドギャップの計算精度に優れており、平成 27 年度の本システム利用にて、超格子構造に適用することで、InAs/GaSb 超格子のバンド構造を明らかにすることができた。一方で、ヘテロ界面でのバンドオフセットや、格子歪みの影響など、さらに詳細な解析が進めば、超格子デバイスの更なる特性向上が期待できる。平成 28 年度の本システム利用では、これら課題に対する計算手法を検討した後、InAs/GaSb 超格子構造にてバンド計算を行うが、平成 27 年度同様、QSGW 法として小谷教授が開発した ecalj を用い、PC クラスタ 16 ノードで申請する。

■成果の概要

1） 本課題で得られた具体的な成果

InAs/GaSb 超格子構造のヘテロ界面での電子状態について、QSGW 法を用いた第一原理計算を実施した。得られたバンドダイアグラムは、InAs 層のエネルギーギャップが GaSb 層の価電子帯に位置し、タイプⅡ超格子のバンド構造が得られていることを確認。さらに実効的なバンドオフセットは 0.509eV で、文献の実測値 0.51±0.1eV ともよく一致しており、計算結果は妥当であると言える。また超格子構造における、価電子帯/導電帯の波動関数も明らかにすることができた。
さらに、格子歪がバンドギャップや有効質量などバンド構造に与える影響について、QSGW 法の精度確認を目的に、Ⅲ-Ⅴ族化合物半導体単体（InAs/GaSb 超格子の構成要素である InAs, InSb, GaAs, GaSb 等）で計算を実施した。格子歪によるバンドギャップの変化は文献値とよく一致しており、歪印加時も QSGW 法の妥当性が確認できた。

2） 社会・経済への波及効果の見通し

本取組みにて超格子のバンドオフセットや電子状態が明らかになり、それをデバイス設計に用いることで、赤外受光素子の特性向上が期待できる。また格子歪の影響についても QSGW 法で計算可能であることが確認され、今後、継続して InAs/GaSb 超格子に歪緩和のため挿入する InSb 層の影響を調査するなど、より詳細な解析にて本計算機システムを利用予定である。これらが明らかになれば、高感度化・ノイズ低減・高温動作など、赤外受光素子の更なる特性向上が期待でき、赤外センサの低価格化・小型化・高性能化につながるものと考えている。

3） その他

本利用に関連した主な発表論文

J. Otsuka, T. Kato, H. Sakakibara and T. Kotani, Jpn. J. Appl. Phys. 56, 021201 (2017)

■利用アンケートにご協力ください

1) 利用に関して有益であった事項

QSGW 法を用いた超格子の第一原理計算は、精度が良い反面、計算負荷が大きく、社内の計算機では計算困難でした。本計算機システムを用いることで、InAs/GaSb 超格子構造の電子状態を明らかにすることができました。

2) 利用に関して生じた問題点など

ジョブが混み合うと計算がなかなか流れず、また他のジョブの計算時間や優先順位などが不明なため、計画が立てられませんでした。ジョブが混雑するのは仕方ないですが、ジョブの待ち時間がある程度見積もれると助かります。

3) ユーザーサポートとして必要と考えられることについて

本計算機システムのホームページが充実しており、利用方法で困ることはほとんどありませんでした。またメールでの質問に対しレスポンスは早く、非常に助かりました。

4) 施設利用に係る感想・改善を希望することについて

上述のジョブ混雑時、ジョブの予想待ち時間が表示されると助かります。

5) 本事業で得られた成果や公表する予定の成果があれば以降に記述をお願いします

本利用に関連し、超格子構造の第一原理計算で論文発表しました(前項参照)。
今後も、得られた成果を適宜、発表する予定です。