平成 29 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 10 月 30 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 -緩衝層の影響調査				
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	ｼｵｻﾞｷ ﾏﾅﾌﾞ 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	主幹
	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 9 月 30 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	1	受付日 平成 29 年 11 月 1 日	受付印

■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。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 年度から本システム利用にて超格子構造に適用し、平成 27 年度は InAs/GaSb 超格子のバンド構造を、平成 28 年度はヘテロ界面の電子状態を明らかにした。一方、実際の超格子では、InAs と GaSb の格子定数が異なり、エピ成長で転位が発生しやすいことから、一般に歪緩和のため InSb 緩衝層が挿入される。しかし、その InSb 緩衝層がバンド構造に与える影響は明らかでない。平成 29 年度の本システム利用では、InSb 緩衝層が挿入された超格子に対し計算手法を検討した後、バンド計算を行い InSb 緩衝層の影響を調査するが、これまで同様、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 超格子構造は、InAs の格子定数が 6.050Å、GaSb が 6.082Åであり、GaSb 基板上に超格子を積層すると InAs 層の格子定数が基板より小さいことから歪が発生し、転位など結晶品質が悪化しやすい。歪緩和を目的に、GaSb 基板より格子定数の大きな InSb 層(6.469Å)を挿入した InAs/InSb/GaSb 超格子について、QSGW 法を用いた第一原理計算を行い、バンド構造を InAs/GaSb と比較した。
第一原理計算に際し、まず原子配置について複数の手法を用いて比較検討を行った。その後、比較的小さな超格子について InSb 層がバンド構造に与える影響を計算した結果、InSb 層を挿入によりバンドギャップが小さくなるなど、これまでの知見と一致する結果が得られ、InAs/InSb/GaSb 超格子のバンド構造が明らかになった。

2） 社会・経済への波及効果の見通し

本取組みで、InSb 層を挿入したより複雑な超格子の計算が可能となった。InAs/InSb/GaSb 超格子のカットオフ波長の予測が可能となり、さらに歪緩和による結晶品質の向上も相まって、赤外受光素子の特性向上が期待できる。また計算本技術は、他の材料系の超格子にも適用可能と思われ、発光素子も含め、超格子デバイスの発展に寄与するものと考えている。

3） その他

■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、InSb 層を挿入したより複雑な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、計画が立てられなかったことがありました。これに関しては、新システムに期待したいと思います。

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。1 つお願いとして、システムに関する重要事項はメールにてご連絡いただいていますが、ホームページに掲載されているお知らせのような情報も配信していただけると助かります。

4) 施設利用に係る感想・改善を希望することについて

特にありません。

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

大塚 順・加藤 隆志・榊原 寛史・小谷 岳生、 SEI テクニカルレビュー, 191, 14 (2017).