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３０年　４月１８日

利用課題名		InAs/GaSb 超格子のエネルギーバンド計算				
課題責任者	企業名	住友電気工業株式会社				
	フリガナ 氏名	オオツカ　ジュン 大塚　　順	部署名	解析技術研究センター	職位	主査
	連絡先	住　所：〒244-8588 横浜市栄区田谷町 1 E-mail：ootsuka-jun@sei.co.jp		TEL 045-853-7260 FAX 045-851-4600		
利用期間		平成 30 年　1 月 16 日　～　平成 30 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 30 年 10 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	6	受付日 平成 30 年　5 月　2 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

InAs/GaSb 超格子のエネルギーバンド計算を行い、band-lineup パラメータの同定を試みること。

2) 利用意義

中赤外センサの吸収波長を設計する際、エネルギーバンドの情報が必要となるが、実験データは不十分である。第一原理計算で物性値を予測することで、試作回数を減らし、開発の加速につながると期待できる。

3) 必要性

QSGW 法を用いることで、InAs/GaSb 超格子のバンドギャップを高精度に予測することができることは確認済みだが、計算コスト（計算時間、使用メモリ）が大きいことが課題である。弊社が保有する計算機サーバでは扱える計算モデルのサイズが限定されるため、スーパーコンピュータの利用が必要である。

■成果の概要

1) 本課題で得られた具体的な成果

研究計画が申請後に変更され、tight-binding (TB) モデルのパラメータ決定を優先する必要が出てきたため、当初予定していた band-lineup パラメータの同定までは実施できなかった。以下に、TB モデルのパラメータ決定に関して、得られた成果を記載する。

ハイブリッド QSGW 計算に基づいて、Al、Ga または In および P、As、または Sb からなる 9 つのバイナリ化合物半導体の $sp^3d^5s^*$ TB モデルにおけるパラメータを決定した。タイプ II (InAs) / (GaSb) 超格子に実際にまたは潜在的に関連するバルク相の化合物について、sp^3s^* TB モデル内に現れる誤った平坦な価電子帯が排除されることを確認した。$sp^3d^5s^*$ TB モデルを用いた様々な超格子周期のタイプ II (InAs) / (GaSb) 超格子のバンドギャップエネルギーは、PL データのバンドギャップエネルギーとの誤差は 25 meV であった。さらに、本 TB モデルによって計算された超格子周期のタイプ II (InAs) / (GaSb) 超格子のバンドギャップエネルギーを、他の既知の TB モデル、EP 法、およびハイブリッド QSGW 法と PL データとを比較した。TB モデルは、他の TB と EP 法で得られた大きな超格子周期のバンドギャップエネルギーと、他の TB とハイブリッド QSGW 法で予測される小さな超格子周期の漸近的な減少を再現する。現在の TB モデルによって計算されたバンドギャップエネルギーは、PL データと最もよく一致する。さらに、sp^3s^* TB モデル内のバリア層を設計するときに潜在的に有害である、誤った平坦な価電子帯は、現在の $sp^3d^5s^*$ TB モデルを再びバルク相とともに使用することで排除される。本課題により、TB モデルが超格子を設計するための信頼できる方法であることを示した。
本課題の研究成果を纏めて、Optical Materials Express 誌に投稿し、アクセプトされた。

2) 社会・経済への波及効果の見通し

本研究により、第一原理計算と簡略化（tight-binding）法を組み合わせたエネルギーバンド計算方法を用いることで、赤外センサ素子のバンド特性を高精度に予測できることを確認した。試作回数の削減につなげられる可能性があり、開発期間の短縮やコスト削減が期待される。

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

新システムに移行する際に生じたプログラムの実行エラーについて迅速にご対応いただけたことが助かりました。

2) 利用に関して生じた問題点など

特にありません。

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

すでにご対応いただいていますが、プログラムの移植やジョブスクリプトの作成に関しては、利用システムに応じて情報収集するのは負担ですので、手助けいただけますと助かります。また、実行中の計算に対して、適切にパフォーマンスが出ているか助言いただくことも有用と考えています。

4) 施設利用に係る感想・改善を希望することについて

利用プランを申請するとき、現状は利用期間でノード数が一定値のみとなっていますが、月毎にノード数を変えた申請ができると助かります。

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

J. Otsuka, T. Kato, H. Sakakibara, and T. Kotani, "Band structures for short-period $(InAs)_n(GaSb)_n$ superlattices calculated by the quasiparticle self-consistent GW method," Jpn. J. Appl. Phys. **56** (2), 021201 (2017).

大塚順、加藤隆志、榊原寛史、小谷岳生、「高精度な第一原理計算手法による InAs/GaSb 超格子のバンド構造の解析」、SEI テクニカルレビュー第 191 号、pp. 69-74 (July 2017).

A. Sawamura, J. Otsuka, T. Kato, and T. Kotani, "Nearest-neighbor sp^3s^* tight-binding parameters based on the hybrid quasi-particle self-consistent GW method verified by modeling of type-II superlattices," J. Appl. Phys. **121** (23), 235704 (2017).

A. Sawamura, J. Otsuka, T. Kato, T. Kotani, and S. Souma, "Nearest-neighbor $sp^3d^5s^*$ tight-binding parameters based on the hybrid quasi-particle self-consistent GW method verified by modeling of type-II superlattices," OMEx, to be published.