

## 2023年度 独創的研究助成費 実績報告書

2024年2月13日

報告者	学科名	情報通信工学科	職名	教授	氏名	末岡 浩治
研究課題	赤外多帯域受発光集積デバイス用IV族混晶半導体に関する理論的研究					
研究組織	氏名	末岡 浩治	所属・職	情報工学部情報通信工学科・教授	専門分野	応用物理学
	役割分担	野田 祐輔	情報工学部情報通信工学科・准教授	材料科学	理論計算, 研究討論	
研究実績の概要	<p>1. 研究の概要</p> <p>フォトン（光子）を情報担体とし、フォトン／電子相互作用を活用する受発光デバイスにおいて、人視覚に応じた可視光波長帯に加えて、超視覚多帯域センサ・多帯域通信・熱イメージングなどに活用可能な、より長波長の中・長波赤外領域への拡張が注目されている。狭ギャップ半導体で構築した多帯域赤外光電デバイスをSi集積プラットフォームへ融合できれば、超省電力・高速光配線、医療用高感度・高解像度生体イメージャ等、様々な分野における新規情報担体デバイス・システムの革新的発展につながる。</p> <p>本研究では、既存のSi集積プラットフォーム上への融合を見据えた赤外多帯域受発光集積デバイスのためのIV族混晶半導体に関する理論的研究を行った。具体的には、半導体Ge薄膜をベースとし、そこへSn, Siなどを添加した際の安定原子配置を第一原理計算により探索した。さらに、Ge薄膜成長において内部に取り込まれる点欠陥の制御にも注目し、添加物が点欠陥の形成エネルギーに与える影響についても第一原理計算を行った。</p> <p>2. 研究成果のまとめ</p> <p>図1に示すような、上下面が表面であるとともにその上に10Åの真空層を有するスラブ状のGe薄膜モデルを用い、表面1層目から順番にSnを配置して構造最適化を行って、安定な原子配置を探索した。また、同様の計算を点欠陥についても行った。</p> <p>得られた結果を図2と図3に示す。図2より、表面から4層目程度まで表面の影響を受けてGe中のSnの形成エネルギーが下がっていることがわかる。また、図3より、表面の影響を受けて原子空孔(V)の形成エネルギーが下がっていることがわかる。</p> <p>これらの傾向はSiの場合と同様である。</p>					

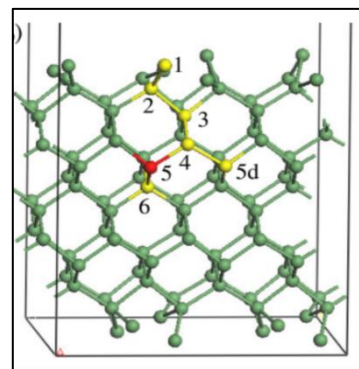
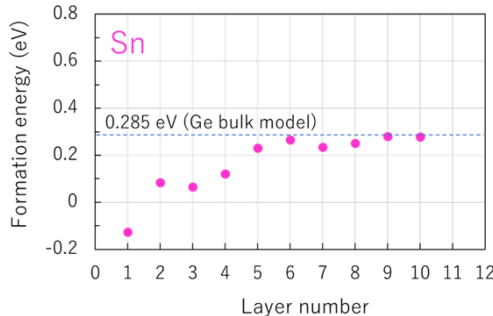
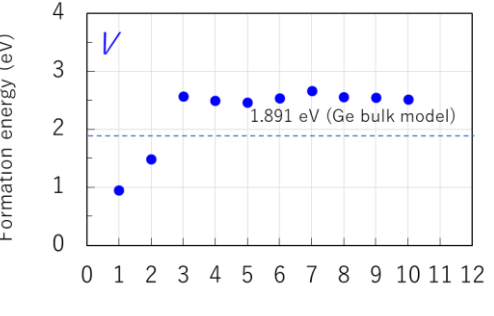


図1 計算モデル

<p>研究実績 の概要</p>	<div style="display: flex; justify-content: space-around;"> <div style="text-align: center;">  <p>図2 Ge中のSnの形成エネルギー</p> </div> <div style="text-align: center;">  <p>図3 Ge中のVの形成エネルギー</p> </div> </div> <p>3. 今後の予定など</p> <p>現在, Sn の存在が V の形成エネルギーに与える効果や, 格子間 Sn の形成エネルギーについての計算を行っている. これらの結果を本年秋の米国電気化学会で発表する予定である.</p> <p>さらに, 本研究の関連テーマに興味を持った半導体材料メーカーの技術者が, 次年度から社会人 Dr として本学に入学する予定である.</p>
<p>成果資料目録</p>	<p>本研究に関係したテーマの公表論文は以下の通りである.</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Eiji Kamiyama and Koji Sueoka, “Quartz-cristobalite alloy-like model of SiO<sub>2</sub> film growth on Si (100) substrate”, Journal of Applied Physics, 134, 115301 (2023).</li> <li>2. Koji Kobayashi, Ryosuke Okuyama, Takeshi Kadono, Ayumi Onaka-Masada, Ryo Hirose, Akihiko Suzuki, Yoshihiro Koga, Koji Sueoka, and Kazunari Kurita, “TEM Image Analysis and Simulation Physics for Two-Step Recrystallization of Discretely Amorphized C<sub>3</sub>H<sub>5</sub>-Molecular-Ion-Implanted Silicon Substrate Surface”, Crystals 2024, 14, 112.</li> </ol>