

プロジェクトメンバー：電気・電子情報工学系 佐々木 祐太, 山根啓輔

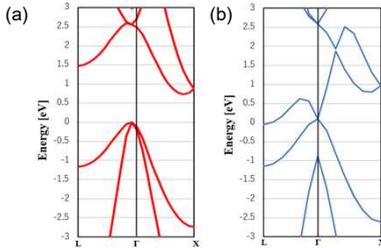


## 背景・課題

### シリコンフォトニクス<sup>[1]</sup>

- ▶ シリコン基板上に受光器、光導波路、光スイッチ、光変調器等を集積する技術
- ▶ 高集積密度、低環境負荷、経済性の高い光回路

### 次世代光通信技術に期待



Energy Band Diagram of (a) Si, (b) Ge

- ▶ Si, Geのエネルギーバンド図はΓ点に比べてL点のエネルギーの低い状態となっている

### 課題

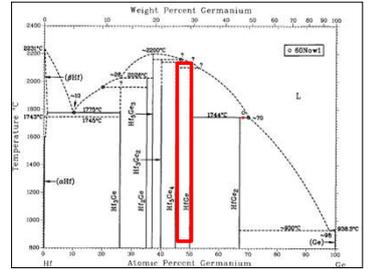
IV族系半導体が間接遷移型であるため  
モノリシック集積可能な発光素子の実現に至っていない

## 着眼点

### HfGe及びZrGeの発光可能性

	1族	2族	3族	4族	13族	14族	15族	16族	17族	18族
1周期	H									He
2周期	Li	Be			B	C	N	O	F	Ne
3周期	Na	Mg			Al	Si	P	S	Cl	Ar
4周期	K	Ca	Sc	Ti	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
5周期	Rb	Sr	Y	Zr	In	Sn	Sb	Te	I	Xe
6周期	Cs	Ba		Hf	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn

Periodic Table of Elements



- ▶ Hf及びZrが4価の電子を持っておりSnに代わる新規発光素子材料となりえる
- ▶ 窒化シリコン光導波路としてHfZrO<sub>2</sub>が用いられており集積電子プロセスとの親和性が高い
- ▶ HfGeの状態図ともに1:1にて状態図が存在するため、GeHfは結晶化する
- ▶ Hfを導入することでGeの格子を大きくし、直接遷移化を目指す

### 目的

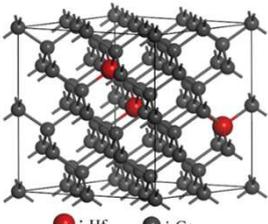
遷移金属原子(Hf・Zr)とGeの混晶に着目し、発光素子材料としての  
第一原理計算による解析を通じて発光デバイス応用に向けた検討を行う

[1]A.B. Gokhale and R. Abbasian, University of Florida, The Ge-Hf (Germanium-Hafnium) System  
[2]J. P. Abriata and d. C. Boloch, Centro Atómico Bariloche, The Ge-Zr (Germanium-Zirconium) System

## 第一原理計算の条件

### 計算条件

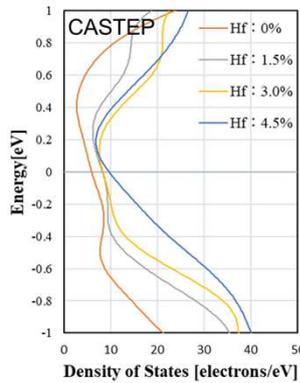
Software : Quantum ESPRESSO  
Functional : Open MX  
 : GGA-PBE  
MP *k*-points : 2 × 2 × 2  
Cutoff energy : 318.0eV  
  
Model : 64-atom HfGe  
Hf composition : 1.5%, 3.0%, 4.5%, 6.0%



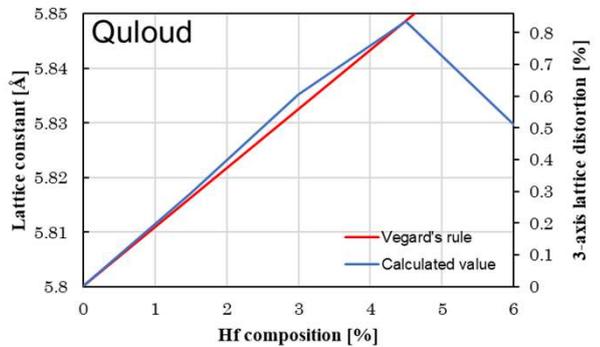
Structural Diagram of GeHf (Hf composition of 1.5%)

## 第一原理計算の結果

### Hf添加GeのHf組成比変化における状態密度、格子定数変化



Density of states and lattice changes due to changes in Hf composition ratio of Hf-doped Ge

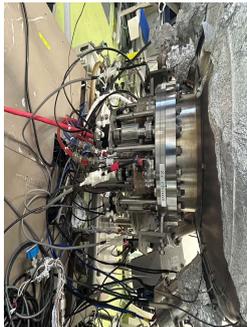


エネルギーバンド図はバンドギャップが過小評価されるため、状態密度・格子定数変化から評価  
状態密度はHf組成を増加させると、低エネルギー側の状態密度が増加し、狭ギャップ化が期待される  
格子定数はHf組成4.5%までは増加するがそれ以降は安定構造が維持できず下降している  
HfGeはシリコン基板に集積可能な発光素子材料の新たな候補として期待できる

## 結晶成長装置開発

### HfGeの結晶成長準備

- ▶ 高融点材料であるHfの蒸着を行うためにEB蒸着機をMBE装置下部に取り付ける改造を行った
- ▶ 高温Kセルを用いてGeを、EB蒸着機を用いてHfを蒸着することでHfGeの結晶成長を実施予定



【謝辞】本研究はIRES施設、科研費基盤B(B) #24K00923)、  
国立大学改革・研究基盤強化推進補助金(国立大学経営改革促進  
事業)および天野工業技術研究所研究助成金の支援の下行われた。

## 総括

第一原理計算の結果をから、HfGeの発光デバイス応用に向けた検討を行い  
Hf組成を増加させることで格子の増大・狭ギャップ化が期待できる

MBE装置の改造により、HfGeの結晶成長準備が十分に行えた

### 結論：

HfGeはシリコン基板に集積可能な発光素子材料の新たな候補として  
期待できる

## 発表記録

佐々木 祐太, 久野 悠, 石川 靖彦, 山根 啓輔 (豊橋技術科大), 発光デバイス応用に向けたHf添加 Geのエネルギーバンドの理論的検討,  
第10回 応用物理学会名古屋大学スチューデントチャーター東海地区学術講演会, P-22, 11.3.2023, 名古屋大学, 愛知県, ポスター発表.  
佐々木 祐太, 久野 悠, 石川 靖彦, 山根 啓輔 (豊橋技術科大), 発光デバイス応用に向けたHfGe混晶の理論的検討,  
第71 回応用物理学会春季学術講演会, 24a-P12-1, 3.22-3.25, 2024, 東京都大学, 世田谷キャンパス, 東京都, ポスター発表.  
佐々木祐太, 石川靖彦, 山根啓輔, 発光デバイス応用に向けたHfGe及びZrGe混晶における材料パラメータの第一原理計算,  
第43回電子材料シンポジウム, We2-11, 10.2-10.4, 2024, グランドメルキュール奈良植原, 奈良県, ポスター発表.