

次世代 TCAD (3) 半導体材料のための第一原理計算

First-Principles calculations for Semiconductors

アドバンスソフト株式会社 ○岡崎一行, 西原慧径, 小池秀輝

AdvanceSoft Co., Tokyo, Japan, [○]Kazuyuki Okazaki, Satomichi Nishihara, Hideaki Koike

E-mail: okazaki@advancesoft.jp

半導体デバイスは微細化により、原子・電子レベルでその特性を理解することが必要とされている。第一原理計算は、原子・電子レベルでの材料特性を理解するための有効なツールである。そこで、第一原理計算が次世代 TCAD とどのような連携ができるかを考察するために、第一原理計算を用いていくつかの物理量を検証することを試みた。

半導体特性において、異種界面の情報は非常に有用な情報であるが、実験からその詳細な情報を見出すことは非常に困難である。そこで、AlAs-GaAs 接合界面の計算を行った。接合界面のモデルは、図 1 に示している。AlAs, GaAs はそれぞれ界面に垂直な方向に 7 ユニットずつ取っている。図 2 に層分割状態密度(Ldos)を示す。界面層の状態密度[図 2(a)]は、界面での軌道混成により一般的に言われるバンドオフセットは現れない。それぞれの中央層の状態密度を比較すると[図 2(b)], 明らかなバンドオフセットがみられる。価電子帯、伝導帯ともに状態密度が立ち上がるエネルギーは、AlAs の方が GaAs よりも低エネルギー側に位置している。しかし、Kohn-Sham 方程式を解く密度汎関数理論では、通常の交換・相関エネルギー汎関数を用いていると、半導体のバンドギャップは小さく見積もられる。そのため、バンドオフセットの絶対値を議論することは難しい。半導体のバンドギャップを正確に見積もるために、さまざまな試みがなされている。そのひとつに、ハイブリッド汎関数法がある。講演では、ハイブリッド汎関数が Si や SiC のバンドギャップの正確な見積もりへ

の有効性を紹介する
予定である。

謝辞：本研究は(独)科学技術振興機構 A-STEP プログラムの助成を受けて行われた。

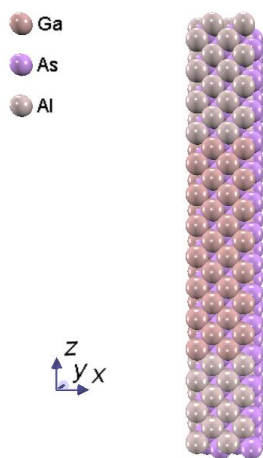


図 1 AlAs-GaAs 界面のモデル

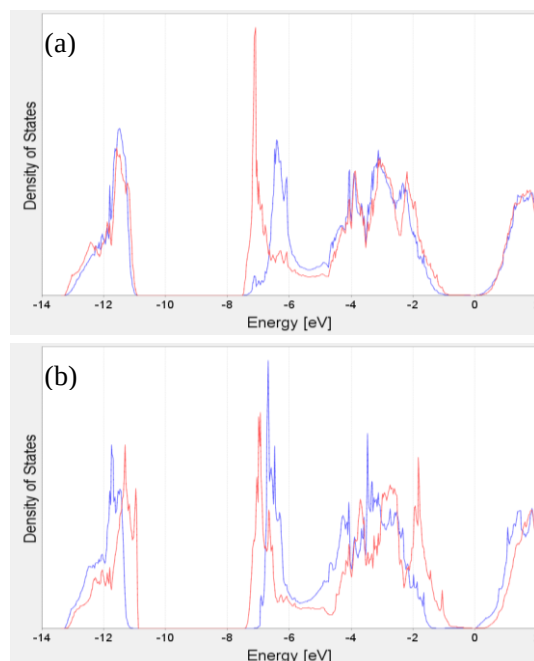


図 2 AlAs-GaAs の層分割状態密度。青線が AlAs、赤線が GaAs の領域の状態密度を表している。(a) 界面層、(b) 中央層の状態密度を示している。