

半導体誘電率における格子定数の影響

Effect of lattice constant on permittivity of semi-conductors

森本 沙也香¹ 濱田 智之² 関野 秀男¹¹豊橋技術科学大学 ²日立製作所中央研究所Sanyaka Morimoto¹, Tomoyuki Hamada² and Hideo Sekino¹¹Toyohashi University of Technology, ²Central Research Lab. Hitachi, Ltd.

1. はじめに

近年、携帯電話やコンピュータなどのデジタル機器の小型化が進んでおり、集積回路の更なる小型化が求められている。集積回路を小型化するには、集積回路を構成する素子を設計し直す必要がある。エレクトロニクス素子の特性は、素子を構成する誘電体の誘電率により決まる。従って、素子の設計には、誘電率の理論的予測が重要である。誘電率は電子誘電率と格子誘電率の和で与えられ (式 1)、それらは電子状態により決まる。

$$\epsilon(\omega) = \epsilon^{elec}(\omega) + \epsilon^{lat}(\omega) \quad (1)$$

電子状態は格子定数により決まるため、誘電率は格子定数依存性を示すことが予想される。そこで、本研究では半導体における、格子定数を変化させた場合の誘電率の変化を調べた。

2. 方法

今回計算対象とした結晶は炭化ケイ素 (SiC) とヒ化ガリウム (GaAs) である。どちらも閃亜鉛鉱構造を持つ結晶である。結晶の格子定数を実測値±0.12 の範囲で変化させ、両方向に 4 点ずつ値を取り、静電場での電子誘電率、格子誘電率を求めた。電子状態、格子振動状態の計算は、第一原理擬ポテンシャル法により行なった。計算には PHASE[1]、ペリー位相、ボルン有効電荷の計算には UVSOR[2] を用いた。計算は以下の手順で行った。

2.1. 電子誘電率

物質中の電子状態及び格子振動状態を、局所密度近似 (LDA) による密度汎関数理論に基づき計算する。その結果に基づき、電子バンド構造を計算し、電子誘電率を求める[3]。

2.2. 格子誘電率

ペリー位相分極論[4]に基づき結晶の分極の変化を計算し、ボルン有効電荷を求める。結晶中の電子状態及び格子振動状態を、局所密度近似 (LDA) による密度汎関数理論に基づき計算する。振動解析の結果とボルン有効電荷から格子誘電率を求める。

3. 結果と考察

図 1 に SiC の電子誘電率(ϵ^{elec})の変化をプロットしたものを、図 2 に SiC の格子誘電率(ϵ^{lat})の変化をプロットしたものを示す。図中の赤丸の部分は、格子定数を実測値に設定した場合の値である。電子誘電率の結果 (図 1) から、格子定数を大きくすると電子誘電率は高くなるということが分かる。これは、原子間距離が長くなり、バンドギャップが小さくなったことが一因として考えられる。また、格子誘電率の結果 (図 2) から、格子定数を大きくすると格子誘電率は高くなるということが分かる。これは、原子間のボルン有効電荷の差が大きくなったことが一因として考えられる。GaAs の計算結果からも、SiC と同様の傾向が得られた。総誘電率は式 1 で求められるので、総誘電率も格子定数を大きくすると高くなるということがいえる。

各格子定数での total energy の計算を行った。SiC の場合、格子定数実測値の時の total energy は、ほぼ最小の値を取り、下向きの放物線を描いた。GaAs の場合、格子定数実測値の時の total energy は、最小値より少し上の値を取ったが、値は最小値付近で遷移していることが分かった。結晶が安定な構造を取るとき、total energy は最小の値を取ることから、今回の格子定数変

化範囲では、結晶の構造は安定していると考えられる。

4. まとめ

total energy の計算結果から、SiC、GaAs とともに、total energy が最小値の付近での誘電率を解析していることが分かった。このことから、今回の格子定数の変化範囲では、結晶の構造は安定していると考えられる。また、図 1、図 2 より、SiC は、格子定数を大きくすると、電子誘電率、格子誘電率ともに高くなることが分かる。この傾向は、GaAs の計算結果からも得られた。

以上より、結晶の構造が安定している範囲では、格子定数を大きくすると、誘電率は高くなることが判明した。

参考文献

- [1] PHASE Ver. 11.00, 東京大学生産技術研究所(2012).
- [2] UVSOR Ver. 3.42, 東京大学生産技術研究所(2012).
- [3] Gunther Harbeke, "Optical Properties of Semiconductors" in Optical Properties of Solids; F. Abeles(Ed.), North-Holland, Amsterdam (1972);Chapter 2.
- [4] R.D. King-Smith and David Vanderbilt, Phys. Rev. B 47, 1651 (1993).

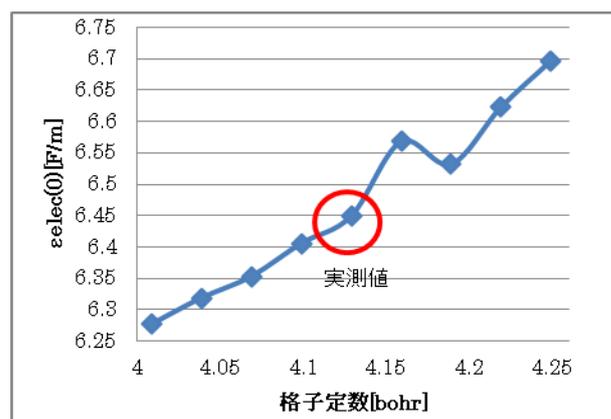


図 1. SiC の電子誘電率

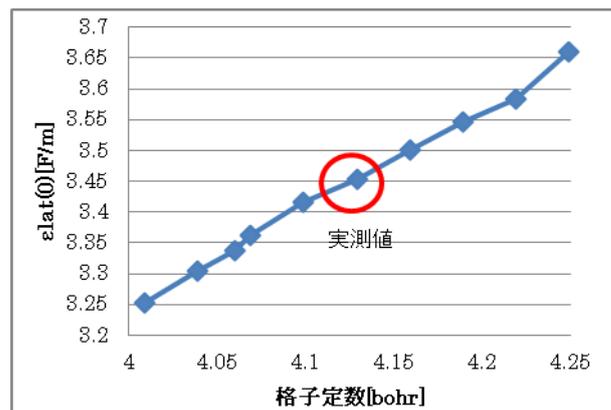


図 2. SiC の格子誘電率