

高速化量子分子動力学法による 半導体材料に関する大規模電子状態計算

○磯田直征¹・篠田克己¹・横須賀俊之¹・遠藤 明¹・久保百司¹・今村 詮²・宮本 明^{1,3}

¹ 東北大学大学院工学研究科 (〒980-8579 仙台市青葉区荒巻字青葉 07)

² 広島国際学院大学工学部 (〒739-0321 広島市安芸区中野 6-20-1)

³ 東北大学未来科学技術共同研究センター(〒980-8579 仙台市青葉区荒巻字青葉 04)

【緒言】 近年、半導体の微細化、高集積化が急速に進んでおり、デバイスのナノ構造に対する物性の理解が求められている。これには原子レベルに基づく情報が求められており、計算化学的手法によるアプローチが大いに活用できると考える。当研究室では従来の第一原理量子化学計算に比較して、約 5000 倍の高速化を実現した高速化量子分子動力学プログラムの開発に成功しており、大規模なモデルでの量子化学計算の実行を可能としている。そこで本研究では、半導体材料として用いられている Si, SiO₂ など様々な材料について電子状態を大規模なモデルから求め、検討を行った。

【計算方法】 量子化学計算には、当研究室で開発した高速化量子分子動力学プログラム *Colors* を用いた。*Colors* プログラムに使用されるパラメータは、イオン化ポテンシャル、Slater-Exponent パラメータ、原子間ポテンシャルパラメータであり、それぞれを第一原理計算である密度汎関数法(ADF)で得たイオン化ポテンシャル、電子密度分布、ポテンシャル曲線の結果を再現するようにフィッティングすることで決定した。

【結果と考察】 図 1 および図 2 (a)に計算に用いた 216 原子から成るバルク Si モデル、ならびに結果として得られた DOS(状態密度)を示す。図 2 (a)よりバンドギャップが 1.17eV(実験値 1.13eV)であり、実験値によく一致した。そしてこのモデルに 1 原子 B をドーピングした p 型 Si モデル、1 原子 P をドーピングした n 型 Si モデルについても同様の検討を行ったところ、不純物準位がそれぞれ p 型 Si の場合で 0.063eV(実験値 0.045eV)、n 型 Si の場合で 0.044eV(実験値 0.045eV) となり(表)、実験値によく一致した。図 2(b)は 96 原子から成るバルク SiO₂ についての DOS の結果である。バンドギャップは 9.73eV(実験値 9.65eV)と計算された。以上より本手法による結果と実験値は非常によく一致し、本手法による電子状態計算の有効性が示唆された。

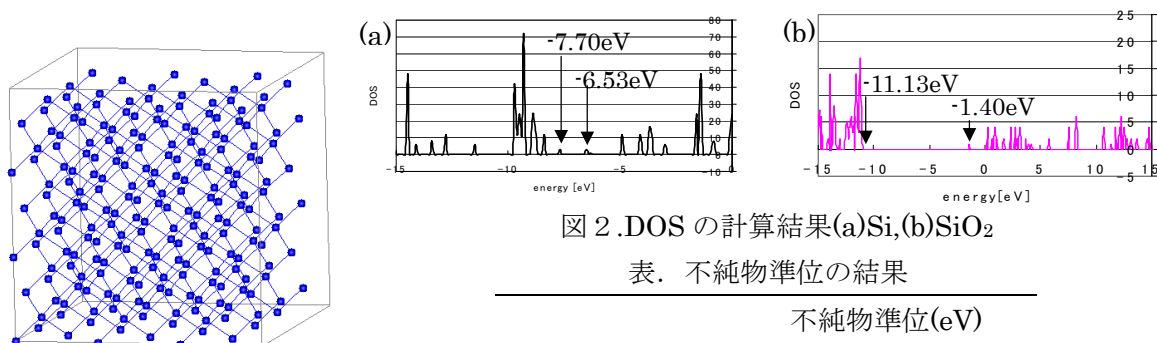


図 2 .DOS の計算結果(a)Si,(b)SiO₂

表. 不純物準位の結果

	不純物準位(eV)	
	Colors	実験値
B ドープ p 型 Si	0.063	0.045
P ドープ n 型 Si	0.044	0.045

図 1. 216 原子から成る
Si モデル