



分類	ナノシミュレーション
キーワード	第一原理計算、誘電応答
開発者	濱田智之、山本武範、靱田浩義、溝内秀男、宇田 毅、大野隆央
作成年月	2004年12月
コード名	UVSOR
使用言語	Fortran90

#### ◇第一原理法に基づく誘電応答解析プログラム UVSOR：電子系及び格子系の誘電応答予測

UVSOR (Universal Virtual Spectroscopy for Optoelectronics Research) は、電子及び光デバイス用材料の誘電応答を第一原理擬ポテンシャル法に基づき原子レベルで計算するプログラムである。UVSOR は平成14年度に「フリーソフトウェア」として公開したプログラム PHASE の計算結果に基づいて材料の誘電応答を解析する。UVSOR は、プログラムソース、使用説明書、および基本的な計算結果などの資料とともに、「フリーソフトウェア」として公開される。

物質の誘電応答は、一般に、電子系の応答と格子系の応答からなる。物質に入射される電磁波の振動数が格子振動数よりも低く波長が RF (Radio Frequency) 域にある場合には、電子及び格子系が応答に寄与する。一方、電磁波の振動数が格子振動数よりも高く波長が光学波長域にある場合には、電子系のみが応答に寄与する。UVSOR は電子系及び格子系の応答をあわせて解析でき、静電場 (0 ヘルツ) ~ 紫外域での誘電関数をその波長依存性を考慮して計算できる。UVSOR はこの波長帯での仮想分光器として作用し、次世代電子・光デバイス用誘電体のシミュレーション設計に用いることができる。

#### ◇プログラムの概要

- (1) 入力ファイルを PHASE と共用している。このため、対象とする物質の解析を容易に行うことができる。
- (2) ノルム保存型及びウルトラソフト型擬ポテンシャルを用いることができる。
- (3) 全電子計算と同じ結果を与えるように遷移モーメントを補正して電子系の応答を解析できる。
- (4) 格子系の応答を、原子のボルン有効電荷及び PHASE の格子振動解析結果より求めることができる。ボルン有効電荷は電子のベリー位相より算出している。

本ソフトウェアは文部科学省 IT プログラム「戦略的ソフトウェアの開発」プロジェクトのもとで開発

された。本プロジェクト WEB ページ (<http://www.fsis.iis.u-tokyo.ac.jp/>) より2004年12月に公開を予定している。

#### ◇計算例

次世代の CMOS トランジスタでは、微細化に伴い増大するゲート電極と Si 基板間のトンネル電流を抑制するため、高い比誘電率を有する high-k 材料をゲート絶縁膜に用いる必要がある。UVSOR の能力を検証するため、代表的な high-k 材料である  $\text{Al}_2\text{O}_3$ 、アモルファス  $\text{Al}_2\text{O}_3$ 、 $\text{CeO}_2$ 、及び  $\text{HfO}_2$  の静的な比誘電率を計算した。アモルファス  $\text{Al}_2\text{O}_3$  及び  $\text{CeO}_2$  の構造を図 1 に、計算結果を表 1 に示す。

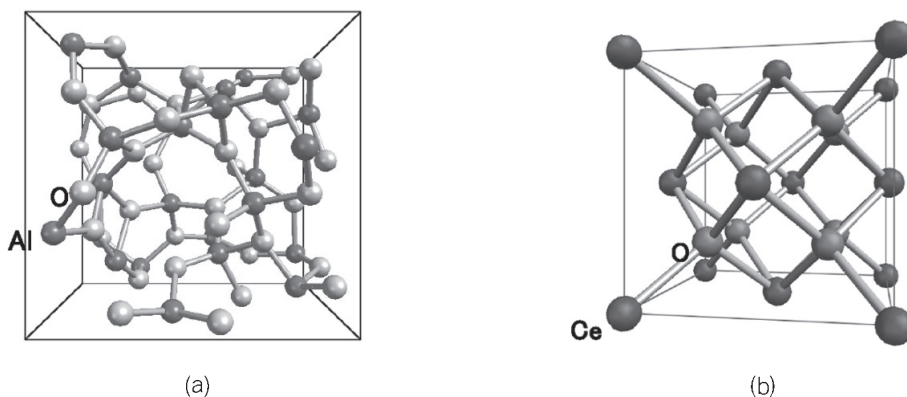


図 1 代表的な high-k 材料の構造：(a) アモルファス  $\text{Al}_2\text{O}_3$  (モデル構造)；(b) cubic- $\text{CeO}_2$

表 1 UVSOR を用いて計算した各種 high-k 材料の比誘電率。実測値を括弧内に示す。アモルファス  $\text{Al}_2\text{O}_3$  には異なる構造が存在するので誘電率値に幅がある。

high-k 材料	静的誘電率 $\epsilon$			
	電子系	格子系	電子+格子系	
alpha				
$\text{Al}_2\text{O}_3$	$\epsilon_{xx} = \epsilon_{yy}$	2.9(3.1)	6.1(5.8)	9.0(8.9)
	$\epsilon_{zz}$	2.8(3.0)	8.4(8.1)	11.2(11.1)
amorphous	~3 (2.5-2.8)	5.9-8.8 (5.7-8.2)	8.9-11.8 (8.2-11.0)	
$\text{HfO}_2$ (monoclinic)	4.7(~5)	11.4	15.9(16-25)	
$\text{CeO}_2$ (cubic)	7.5(6)	16.8(17)		

計算は電子系及び格子系誘電率の実測値をほぼ定量的に再現している。誘電率に異方性がある場合 (alpha- $\text{Al}_2\text{O}_3$ ) も、異方性を正しく再現できる。対象がアモルファスの場合も、計算と実測の一致は良好である。UVSOR は、誘電率に対する格子系の寄与が大きい high-k 材料の設計に有効であると言える。