

次世代半導体・ナノデバイスの開発を支援するシステムCHASE-3PTの開発を行っている。本システムの中核となるのは、密度汎関数法に基づく第一原理・電子状態計算機能であり、擬ポテンシャル・平面波法プログラム PHASE と全電子計算プログラム ABCAP がこの機能を担う。PHASE は、JRCAT(アトムテクノロジー研究体)で開発されたコードをベースにしており、複数の並列計算機環境での動作を実現させた。ABCAP プログラムでは、準粒子計算機能を確認するため、各種半導体のバンドギャップを計算し、従来の密度汎関数法計算と比べて、実験と良い一致を得た。この事より、本システムを使って材料の光学的性質の評価や誘電応答解析ができる事を確認した。

上記プログラムは計算の信頼性が高い反面、原子数が増えるに従って計算規模が急速に増大する傾向がある。現状より扱える原子数を大幅に増やすため、一部の原子を古典的ポテンシャルを使って記述するハイブリッド法を開発した。熱浴と見なしうる多数の原子群を古典的に記述し、表面近傍の原子を量子的に取り扱う事により、Si(111)表面の有限温度・分子動力学計算を行った。その結果、Pandey (IBM)によって提唱された特異な表面再配列が再現できる事を確認した。この成功を基に、今後は、半導体表面の膜の形成、半導体・金属界面の原子配置の決定などを行っていく予定である。

次世代半導体デバイスにおいて、高機能で良質な high- k (高誘電率)膜の開発が急がれている。そこで、世界初の格子系誘電率計算プログラムを開発した。格子系・電子系を併せた誘電率の計算は、実験値をよく再現した。本システムが、high- k ゲート絶縁膜をはじめとする次世代半導体デバイス用誘電体研究の強力なツールとなりうる事を実証した。

次世代半導体デバイスでは、さらなる微細化のためゲート絶縁膜のリーク電流が問題となっている。現在、絶縁膜は数原子層までの薄膜化が可能であり、トンネル伝導等の量子効果を考慮した伝導計算が必要と予想される。また、現在計画されている原子・分子スケールの量子細線を用いた究極の微細デバイスにおいても、量子伝導計算が重要である。第一原理計算のスキームをこれらの問題に適用するため、Lippmann-Schwinger方程式ソルバーを開発している。この方法では、非局所擬ポテンシャルが使用可能であり、現実的な原子構造に対して伝導計算が可能である。分子デバイス研究で取り扱われるベンゼン-(1,4)-ジチオレート有機分子の伝導計算を行い、分子固有の性質のみならず、接点部分の構造が伝導を左右することを示した。この事は量子伝導計算における第一原理的アプローチの必要性を意味するものであり、本手法の重要性が示された。また、本プロジェクト独自の手法であるseries expansion法のプログラムを試作した。この方法では、すべてのエネルギー状態を同時に求められるため、計算時間の短縮が可能であるなどの利点を持つ。Al金属/Si半導体薄膜/Al金属の計算を行ない、本手法の優位性を確かめた。

上記の高機能なプログラム群を次世代半導体ナノデバイスの開発に有効に活用できるように、データベース機能、グラフィカルユーザーインターフェース機能を有するユーザー・フレンドリーなCHASE-3PT統合環境システムの基本設計を行った。

We are developing the computational system, CHASE-3PT, which contributes to development of next-generation semiconductors and nano devices. The core function of this system is first-principles electronic-structure calculation based on the density functional theory (DFT). This calculation is performed by using the pseudopotential plane-wave code, PHASE, and all-electron calculation code, ABCAP. PHASE is based on the code developed by JRCAT (Joint Research Center for Atom Technology). We confirmed that PHASE works for a variety of parallel computers. To check the function of the quasi-particle method in ABCAP, we compute band gaps of a various semiconductors. The calculation is in good agreement with experiment, compared with conventional DFT calculations, indicating that our system allows to evaluate optical properties and dielectric constants.

The above-mentioned two programs are highly reliable but is time consuming in some cases since the computational time rapidly increases as the atom number becomes large. In order to take into account a very large number of atoms, we developed a hybrid-method code, in which a part of atoms is described by using classical potentials. We performed finite-temperature molecular-dynamics (MD) calculation on Si(111) surface. In this calculation, the Si atoms which are considered to be a part of heat bath, are classically described and the atoms near surface are taken into account quantum mechanically. The MD calculation is found to lead to the stable geometry with the large reconstruction proposed by Pandey (IBM). This success suggests that our system allows to study systems having a large number of atoms such as films grown on semiconductor surfaces.

In the field of the next generation semiconductors, development of highly-functional and good-quality high-k (highly dielectric) films is essential. Then we in the first time developed the program that calculates the dielectric constant originating from lattice vibrations. We estimated the total dielectric constant due to lattice vibrations and electrons. The calculated value is close to the experimental one, indicating that our system is an effective tool to study high-k materials.

Because of very thin insulating films used in the next generation semiconductor devices, leak current is one of the serious problems. Since it is now possible to achieve a few atomic layer films, calculation on conductivity taking into account the quantum effect (ex. tunneling effect) is expected to be very useful to analyze the films. Furthermore, quantum-conductivity calculation is important in development of the ultimately small device using quantum wire whose scale is that of atoms or molecules. Then we are developing a solver of Lippmann-Schwinger equation, which is combined with the first-principles method. Since our solver uses the nonlocal pseudopotential, it enables calculating conductivity of realistic atomic structures. We calculated conductivity of the organic molecule [benzene-(1,4)-dithiolate] sandwiched with two gold electrodes and found that the conductivity is very sensitive to the contact atomic structure, indicating that our first-principles approach is effective in evaluating quantum conductivity. We are also developing

the series-expansion method, which is our original. This method has an advantage that all the energy states are calculated simultaneously; thus, the computational time can be decreased. We calculated the thin film system, Al(metal)/Si(semiconductor)/Al(metal), and confirmed the advantage of our method.

We presented the ground design of the CHASE-3PT total-environment system, which unites the above-mentioned highly-functional programs. The system also includes databases and graphical user interfaces, so it is friendly for the researchers who develop the next-generation semiconductor and nano devices.