

SiC 超格子における電子閉じ込め効果の解析
Analysis of Electron Confinement to SiC Superlattices

古家真之介, 松下雄一郎, 押山淳

S. Furuya, Y.I. Matsushita, and A. Oshiyama

東京大学大学院工学系研究科物理工学専攻

Department of Applied Physics, The University of Tokyo

我々の身の回りにある電子機器のほぼ全てに使われている半導体デバイスは、主にシリコンを用いて作られてきた。その性能を向上するために様々な研究が行われているが、シリコンカーバイド(SiC)への期待が高まっている[1]。この物質はSiとCが交互に並んだ sp^3 結合で構成されており、その性質はシリコンとダイヤモンドの中間的なものとなるため、シリコンよりもバンドギャップが広く高温で動作可能である。また積層の仕方により様々な多形があることが知られており、特に立方晶の3Cと六方晶の2H, 4H, 6H構造の間ではバンドギャップが数百meVも異なる。このことを利用し、3C構造と2H構造を交互に並べたヘテロ構造を作ると電子とホールが別々の領域に局在するとの理論計算による報告がある[2]。しかし2H構造は伝導帯下端がK点にあり、M点となる他の六方晶とは異なり特殊な物質である。また4H構造や6H構造の方が実験的にも理論的にも安定であることがわかっているため、本研究では4H構造や6H構造も含めてヘテロ構造の電子状態を解析し、一般的なSiC超格子の性質を詳しく調べることを目的とした。

本研究では、我々のグループで開発してきた実空間密度汎関数法プログラム RSDFT [3]を用い、3C/2H, 3C/4H, 3C/6Hそれぞれの超格子の電子状態を計算した。超格子のバンド構造と局所状態密度の空間分布の解析により、伝導帯は立方晶(3C)の領域が低くなり、電子がそこに局在することがわかった。また3C領域の幅を変えた計算により、一次元量子井戸の問題としてバンドギャップの変化が理解できることもわかった。当日のポスターではKohn-Sham 軌道なども含め詳しい解析結果を紹介する。

【参考文献】

[1] <http://www.itrs.net/> など

[2] F. Bechstedt and P. Käckell, Phys. Rev. Lett. **75**, 2180 (1995).

[3] J.-I. Iwata, D. Takahashi, A. Oshiyama, T. Boku, K. Shiraishi, S. Okada, and K. Yabana, J. Comput. Phys. **229**, 2339 (2010).