

第一原理計算コード RSPACE の開発と輸送特性解析シミュレーション

Development of first-principles calculation code RSPACE and simulation for transport property of nanostructures

小野倫也

神戸大学大学院工学研究科

1. 研究目的

SiC は次世代パワーデバイス用チャネル材料として期待されているものの、SiC-MOSFET の移動度は、SiC バルクの移動度に比べて極めて低く、材料の性能を生かしきれていない。MOSFET の低い移動度は、MOS 構造作成時の熱酸化プロセスで界面に生成される欠陥が原因であると考えられている。酸化プロセス後に窒素系ガスアニール処理を施すことにより移動度が向上するという報告があるが、アニールガス原子の移動度向上に対する役割やアニール後の界面原子構造は明らかになっていない。本研究では、富岳等の超並列スパコンと第一原理計算を駆使したデバイス機能予測・設計シミュレーションを実現すべく、第一原理電子状態・伝導特性計算のための実空間差分法に基づいた計算コード RSPACE の開発と、開発した RSPACE と OFP を駆使した電子状態・伝導特性シミュレーションの実施を目的としている。今年度は、窒素系ガスアニール処理が施された界面原子構造の探索を実施した。

2. 研究成果の内容

チャネル材料として使われる 4H-SiC は、Si 面[(0001)面]、C 面[(000-1)面]、*a* 面[(1-100)面]、*m* 面[(11-20)面]が MOSFET 用によく使われる。これらの面に対して窒素系ガスアニールを施した場合、界面に 10^{15} 個/cm² オーダーの高密度で窒素原子が導入されることが分かっているが、導入後の原子構造については明らかになっていない。そこで、本研究では図 1 に示すようなバルク構造に対し、Si 面方向、*a* 面方向、*m* 面方向に窒素が導入された窒化膜を形成し、その界面窒素原子密度を評価した。窒化膜は、Si 原子空孔 1 個に対し隣接する C 原子 4 個を N 原子に置換したものを要素として、各要素を 4 つ並べることで界面を模した。4H-SiC の Si は *k*、*h* 二種類のサイトがあるため、それぞれについて窒化膜形成エネルギーを評価した。窒化膜の窒素原子密度を表 1 に示す。窒素原子密度は、実験で観測されているものと同程度であり、妥当な原子構造であると考えられる。次に、全エネルギー計算より、窒化膜の形成エネルギーを調べた。結果を表 2 に示す。*k* サイト、*h* サイトの両方において、*a* 面方向に窒化膜が展開した方が安定であることがわかる。窒化膜安定性の面方位依存性は、Si 原子空孔が隣接する窒素原子の数に相関があり、*a* 面界面は 2 個の N 原子と隣接した Si 原子が他の面に比べて多い。N 原子の高い電気陰性度により Si-N 結合の *sp*³ 軌道は強く局在する。し

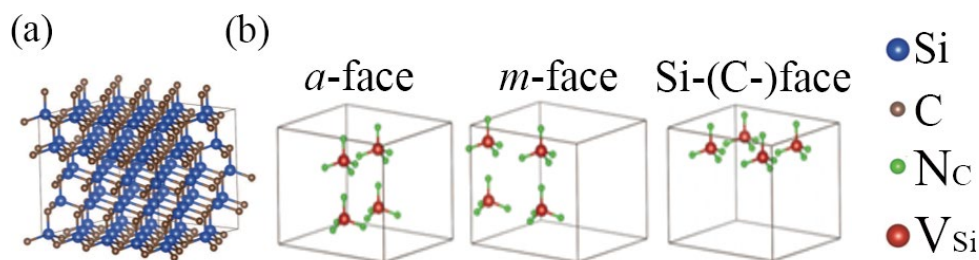


図 1. (a)窒化膜を導入するバルクモデル。(b)窒化膜形成方向と窒化サイト。

かし、1つの N 原子としか隣接しない Si 原子の Si-N 結合は、2つ以上の N 原子と隣接する Si-N 結合よりも局在が強くなりすぎ、電子の運動エネルギーが大きくなるため安定化しない。このため、2つの N 原子と隣接する Si 原子数が最大化する a 面が最も安定化する。この結果より、 a 面を

使って作成した MOS に窒素系ガスアニールを施せば、原子レベルで平坦な MOS 界面を生成でき、高い移動度が期待できることが示唆される。

3. 学際共同利用が果たした役割と意義

第一原理計算は膨大な計算量を必要とするため、スパコンが欠かせない。特に RSPACE は超並列計算機における並列性能に優れており、本研究遂行において、OFP のような超並列計算機の計算資源は不可欠であった。

4. 今後の展望

本研究用では SiC バルク中に窒化膜を挿入したモデルであり、酸化膜を含めた MOS 構造でない。今後、酸化膜まで含めたモデルを用いて窒化膜形成に対する酸化膜の影響を調べ、より現実的な系で評価する。また、第一原理伝導特性計算により、界面に導入された窒化膜構造がキャリア伝導に与える影響について評価し、高移動度 MOS 界面作成のための指針を得る。

表 1. 窒素原子面密度。

面方位	窒素原子面密度(atom/cm ²)
a	1.48×10^{15}
m	1.29×10^{15}
Si(C)	1.22×10^{15}

表 2. 窒化膜形成エネルギーと隣接 N 原子数を分類に用いた Si 原子数。Si(0)は隣接 N 原子なし。Si(1)は隣接 N 原子 1 個。Si(2)は隣接 N 原子 2 個。

サイト	面方位	E_{total} [eV]	ΔE [eV]	Si(0)	Si(1)	Si(2)
k	a	-54100.663	0.000	32	8	20
k	m	-54098.206	0.614	28	16	16
k	Si	-54098.368	0.574	24	24	12
h	a	-54098.737	0.481	28	16	16
h	m	-54097.280	0.846	14	24	12
h	Si	-54097.918	0.686	24	24	12

5. 成果発表

(1) 学術論文

- ・ Y. Egami, S. Tsukamoto, T. Ono: Calculation of the Green's function in scattering region for first-principles electron-transport simulations, *Physical Review Research* 3(01) 013038 1-9 (2021).
- ・ M. U. Farooq, A. Hashmi, T. Ono, L. Huang: Spin-valley Hall phenomena driven by Van Hove singularities in blistered graphene, *npj Computational Materials*, 6 197 (2020).

(2) 学会発表

- ・ 小松直貴、植本光治、小野倫也: 4H-SiC バルクにおける窒素添加異方性の第一原理計算, 2020 年第 81 回応用物理学会秋季学術講演会, (Sep. 8-11, 2020, Online, Japan)
- ・ 網崎夢開、植本光治、小野倫也: 第一原理計算による wet 酸化 SiC(000-1)/SiO₂ 界面の欠陥構造解析, 応用物理学会第 68 回春季学術講演会, (Mar. 16-19, 2021, Online, Japan)

使用計算機	使用計算機 に○	配分リソース※	
		当初配分	追加配分
Cygnus	○	1,000	
Oakforest-PACS	○	296,800	
※配分リソースについてはノード時間積をご記入ください。			