

第一原理計算コード RSPACE の開発と 界面の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 interfaces

小野倫也

神戸大学大学院工学研究科

1. 研究目的

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 や Cygnus の高性能スパコンを駆使した電子状態・伝導特性解析を目的としている。

2. 研究成果の内容

2021 年度は、GPU 向け RSPACE コード開発と RSPACE を用いた SiC デバイス界面電子状態予測を行った。

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。2020 年度は、計算量削減のため酸化膜を含まないバルクモデルで窒素系ガス

アニール後の窒化物の原子構造・電子状態を調べ、*a* 面が窒素系ガスアニールに最も適した MOS 界面であるという知見を得た。2021 年度は、SiC/SiO₂ の酸化膜の影響を考慮するため、バルクモデルよりも原子数が多い界面モデルを用いて窒化物の原子構造・電子状態を解析した。*a* 面、*m* 面、Si 面、C 面の 4 種類の SiC/SiO₂ 界面に対し、窒素系ガスアニール前後の全エネルギーを

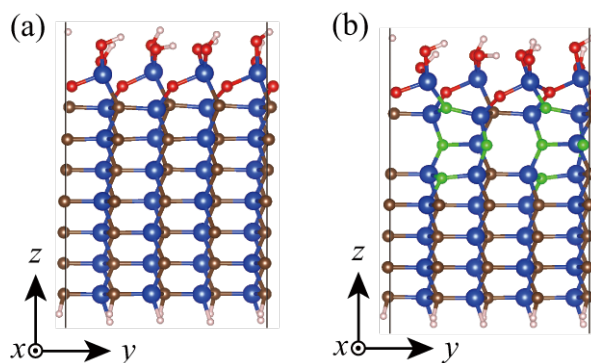


図 1: 窒化膜形成計算モデル。(a)アニール前。(b)アニール後。青球は Si 原子、茶球は C 原子、赤球は O 原子、緑球は N 原子、灰球は H 原子である。図は *a* 面界面の例である。

比較した。 a 面の場合における界面原子構造を図 1 に示す。また、窒化膜の形成エネルギーを図 2 に示す。 a 面を用いた SiC/SiO₂ 界面に形成される窒化膜は、他の界面に形成される窒化膜よりも形成エネルギーが低い。このように、界面モデルを用いた研究でもバルクモデルを用いた計算結果と同様、 a 面を用いた MOS 界面が窒素系ガスアニールに適しているという結論を得た。さらに、窒化膜が SiC/SiO₂ 界面の SiO₂ 直下の SiC 層(top)に形成される場合と、界面遷移層 1 層挟んだ SiC 層(2nd)に形成される場合では、top 層の形成エネルギーの方が低く、窒化膜は SiC/SiO₂ 界面に局在することが分かった。これは、窒素系ガスアニールにより導入される窒素原子が界面に局在するという実験結果と符合する。以上のように、窒素系ガスアニールにより、キャリアトラップ密度低減を期待できる原子レベルで平坦な窒化膜が SiC/SiO₂ 界面に形成されることが明らかになった。

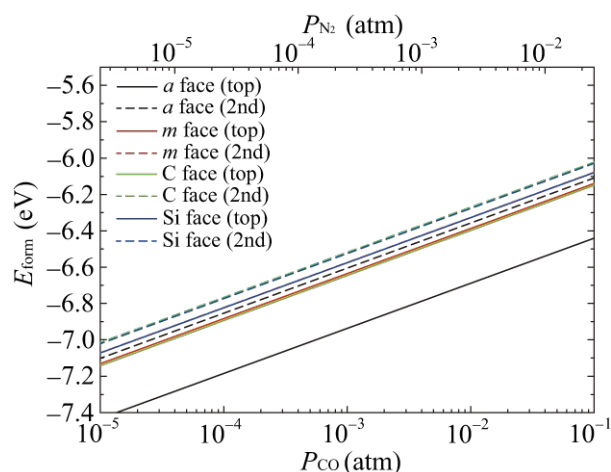


図 2: CO 分子と N₂ 分子の分圧に対する窒化膜形成エネルギーの変化。CO 分子と N₂ 分子は、複生成物であるため、想定する範囲で分圧を変化させた。形成エネルギーの低い方が、窒化膜が形成されやすい。

3. 学際共同利用が果たした役割と意義

研究室で多くの GPU を搭載した計算機を購入することは極めて困難である。GPU 向け RSPACE コード開発では、Cygnus を利用できたことで効率的なコード開発・改良作業が実施できただけでなく、並列計算も視野に入れたチューニングを実施できた。また、デバイス機能予測シミュレーションでは、OFP を用いることで大規模シミュレーションを実施することができた。

4. 今後の展望

近年の GPU を搭載したスパコンの進展は目覚ましく、世界ランキングトップ 10 の半数以上を占めている。GPU 搭載スパコンでも RSPACE を用いて大規模シミュレーションを実現できるよう、GPU 向け RSPACE コード開発・改良を加速する。また、RSPACE は Wisteria 用のチューニングを終えている。RSPACE を Wisteria で実行することで、SiC-MOS 界面における窒素系ガスアニールによる欠陥減処理効果の評価と界面のキャリア伝導解析を実施する。

5. 成果発表

(1) 学術論文

- M. Tsunasaki, T. Ono, and M. Uemoto: Theoretical investigation of vacancy related defects at 4H-SiC(000-1)/SiO₂ interface after wet oxidation, Jpn. J. Appl. Phys. **61** SH1001 (2022).
- H. Naganuma, M. Nishijima, H. Adachi, M. Uemoto, H. Shinya, S. Yasui, H. Morioka, A. Hirata, F. Godel, M. Martin, B. Dlubak, P. Seneor, and K. Amemiya: Unveiling a Chemisorbed Crystallographically Heterogeneous Graphene/L10-FePd Interface with a Robust and Perpendicular Orbital Moment, ACS Nano **16** 4139-4151 (2022).
- M. Uemoto, N. Komatsu, Y. Egami, and T. Ono: First-principles study on structure and anisotropy of high N-atom density layer in 4H-SiC, J. Phys. Soc. Jpn. **90** 124713 1-6 (2021).

(2) 学会発表

- 安達隼人, 植本光治, 永沼博, 小野倫也, FePd(001)/Graphene の第一原理計算による磁気特性の計算, 応用物理学会 強的秩序とその操作に関わる研究会 第 14 回研究会, 2022 年 1 月 4 日.
- 安達隼人, 植本光治, 永沼博, 小野倫也, FePd(001)/Graphene の第一原理計算による電子状態計算, 日本物理学会 2021 年秋季大会, 2021 年 9 月 22 日.
- 西浦 匡紀, 植本 光治, 小野 倫也: 第一原理計算に基づくグラフェンブリスターの伝導特性評価, 日本物理学会 2021 年秋季大会, 2021 年 9 月 22 日.
- 横田 知真, 植本 光治, 小野 倫也, 第一原理計算による SiC/SiO₂ ステップ界面の電子状態解析, 第 82 回応用物理学会秋季学術講演会, 2021 年 9 月 11 日.
- M. Tsunasaki, M. Uemoto, and T. Ono: DFT Study on Defect Structures at SiC(000-1)/SiO₂ Interface after Wet Oxidation, 2021 International Workshop on DIELECTRIC THIN FILMS FOR FUTURE ELECTRON DEVICES, (November 14-16, 2021. Online).
- N. Komatsu, Y. Egami, T. Ono, and M. Uemoto: DFT study on structure and anisotropy of high N-atom density layer in 4H-SiC, 2021 International Conference on Solid State Devices and Materials (SSDM2021), (September 6-9, 2021. Sapporo, Japan).
- T. Ono, DFT study on defects at SiC MOS interface: electronic structure and formation mechanism, The 3rd International Workshop on Materials Science and Advanced Electronics Created by Singularity (IWSingularity 2022)/The 2nd International Symposium on Wide Gap Semiconductor Growth, Process and Device Simulation (ISWGPDs 2022), (January 11-13, 2022, Nagoya, Japan).

(3) その他

- S. Tsukamoto and T. Ono: Quantum Transport of Nanoscale System, in Topics in Nanoscience - Part II: Quantized Structures, Nanoelectronics, Thin Films - Series on the Foundations of Natural Science and Technology 15, World Scientific Publishing, Singapore, pp.81-128, (2022).

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	○	900	
Oakforest-PACS	○	227,052	
※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。			