

## 第一原理計算コード RSPACE を用いた デバイス界面の輸送特性解析と予測

### First-principles investigation for transport property of device interfaces using RSPACE code

小野倫也

神戸大学大学院工学研究科

#### 1. 研究目的

本課題では本研究グループで開発されている実空間差分法に基づく第一原理計算コード RSPACE を用いて、(1)電子デバイスを流れる電流の解析と電子デバイス用高機能界面を予測し、実験グループと協力して電子デバイスの高機能化を目指す。また、(2)トンネル磁気接合やバレーフィルタ界面における界面の電子状態とキャリア輸送特性の評価、(3)ナノ構造の持つ新機能の探索や革新的な機能を発現するナノ物質・構造の設計を将来的に目指す。さらに、(4)富岳以降のスパコンの開発動向を見据え、計算のボトルネック部を GPU を用いたアルゴリズムに置き換えることを進める。

#### 2. 研究成果の内容

2022 年度は、RSPACE を用いた SiC-MOS デバイス界面の電子状態予測と GPU での実行を目論んだチューニングを実施した。ここでは、後者の事例について報告する。

SiC は優れた絶縁破壊強度や熱伝導率により、Si に代わる次世代パワーデバイスとして期待されている。しかし、SiC/SiO<sub>2</sub>MOS 界面には多数の欠陥が存在し、MOSFET のオン電流はバルクの移動度から期待される値に比べ著しく低い。NO アニールによって可動キャリアが増えても MOS 界面のオン電流は期待されたほど上がらない。デバイスに用いられる 4H-SiC(0001)面は、原子レベルで平坦でなく、表面原子構造は SiC 基板作製プロセスに起因するステップを持つ。ステップを持つ表面を熱酸化して MOS 界面を作るとステップが界面に残り、ステップ端が界面欠陥のひとつとなりうる。本研究では、本課題で開発している密度汎関数理論に基づく第一原理計算コード RSPACE を用いて、ステップをもった SiC/SiO<sub>2</sub> 界面における NO アニール前後の電子状態の変化を調べた。電子間相互作用には局所密度近似、原子核電子間相互作用には PAW 法を用いた。SiO<sub>2</sub> は、 $\alpha$ -cristbalite 構造を用いた。窒化後の基板側の原子構造は 2021 年度の研究で得られた構造を用いた。窒化前後の界面原子構造モデルを図 1(a)、(b)に示す。4H-SiC(0001)面は、六方晶的な積層の h 層と立方晶的な積層の k 層が交互に積層するため、上段テラスが h 面の場合、下段テラスは必然的に k 面になる。図 1(a)は、上段テラスが SiO<sub>2</sub> の Si 原子と 3 つの O 原子を介して、下段テラスが SiO<sub>2</sub> の Si 原子と 1 つの O 原子を介して接合している。図の方向から h 層と k 層の判別ができないが、本稿では、例えば上段が k 層の場合を k3/h1 モデルと定義する。k3/h1、k1/h3、h3/k1、h1/k3 の 4 種類の界面モデルに対し、局所状態密度を計算すること

により、窒化前後の界面の電子状態を比較した。

表 1 に伝導帯下端が出現する SiC 原子層の位置を示す。これまでの研究により、ステップを持たない平坦な界面では、伝導帯下端準位は、h 面が最上面の界面に対して界面直下の第 1 層に、k 面界面に対して第 2 層に出現することが分かっている。NO アニール前の界面では、SiO<sub>2</sub> との接合状態によっては、下段テラス

の直下(第 1 層)に伝導帯下端準位が現れない。このため、ステップを持つ界面での伝導帯下端準位が揃わず、キャリアが自由に動けない。一方、窒化後の界面では、上側テラスの結合状態によらず、下段テラスの直下(第 1 層)に伝導帯下端準位が現れる。この結果は、酸化後の NO アニールにより SiC-MOSFET の可動キャリアが増えるという実験事実と符合する。

### 3. 学際共同利用プログラム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、デバイス機能予測におけるステップを持った界面の電子状態計算を行うには、大規模なモデルが必要である。本プロジェクトで Wisteria 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

本プロジェクトの遂行により、RSPACE の伝導特性計算のボトルネック部を GPU で高速化することに成功した。2023 年度より導入される Pegasus を活用することで、さらなる高速化をはかる。本稿で紹介した SiC-MOS デバイスの NO アニール効果については、共同研究を行う実験グループと協力して実証を進める予定である。

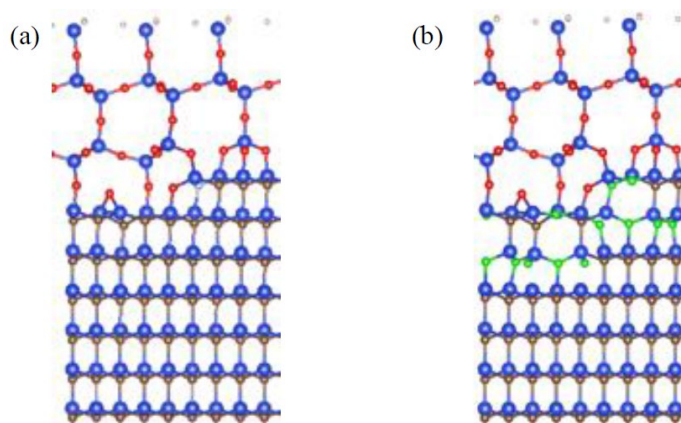


図 1: (a) 窒化前のステップ界面モデル。(b) 窒化後のステップ界面モデル。青球は Si 原子、茶球は C 原子、赤球は O 原子、緑球は N 原子、灰球は H 原子を表す。

表 1: 界面原子構造と伝導帯下端出現位置。下段テラスの直下を第 1 層目と定める。

ステップ構造	伝導帯下端出現位置(窒化前)	伝導帯下端出現位置(窒化後)
k3/h1	3 層目	1 層目
k1/h3	1 層目	1 層目
h3/k1	2 層目	2 層目
h1/k3	2 層目	2 層目

5. 成果発表

(1) 学術論文

- ・ N. Komatsu, M. Ohmoto, M. Uemoto, and T. Ono: Density functional theory calculations for investigation of atomic structures of 4H-SiC/SiO<sub>2</sub> interface after NO annealing, J. Appl. Phys. **132** 155701 (2022).
- ・ T. Harashima, Y. Egami, K. Homma, Y. Jono, S. Kaneko, S. Fujii, T. Ono, and T. Nishino: Unique Electrical Signature of Phosphate for Specific Single-Molecule Detection of Peptide Phosphorylation, J. Am. Chem. Soc. **144** 17449 (2022).
- ・ M. Uemoto, H. Adachi, H. Naganuma and T. Ono: Density functional study of twisted graphene L1<sub>0</sub>-FePd heterogeneous interface, J. Appl. Phys. **132** 095301 (2022).

(2) 学会発表

- ・ 船木七星斗, 横田知真, 植本光治, 細井卓治, 小野倫也, ステップを持つ SiC MOS 界面における NO 窒化処理の移動度改善効果の解析, 第 70 回応用物理学会春季学術講演会, 2023 年 3 月 16 日.
- ・ 大本瑞穂, 小松直貴, 植本光治, 小野倫也, 窒化した SiC/SiO<sub>2</sub> 界面の第一原理電子状態計算, 電子デバイス界面テクノロジー研究会 第 28 回研究会, 2023 年 2 月 4 日.
- ・ 植本光治, 安達隼人, 新屋ひかり, 永沼博, 小野倫也, FePd(001)/グラフェン磁気トンネル接合における磁気抵抗率の第一原理伝導計算, 応用物理学会 強的秩序とその操作に関わる研究会 第 16 回研究会, 2023 年 1 月 28 日.
- ・ K. Yokota, M. Uemoto, T. Ono: First-principles study on electronic structure at step edge of SiC/SiO<sub>2</sub> interface, 2022 International Conference on Solid State Devices and Materials, 2022 年 9 月 28 日
- ・ 植本光治, 安達隼人, 永沼博, 新屋ひかり, 小野倫也, FePd/グラフェンの異種結晶界面状態の第一原理計算, 応用物理学会 強的秩序とその操作に関わる夏の学校, 2022 年 9 月 23 日.
- ・ 植本光治, 安達隼人, 永沼博, 新屋ひかり, 小野倫也, FePd/グラフェンのヘテロ界面の電子・磁気状態の第一原理計算, 第 83 回応用物理学会秋季講演会, 2022 年 9 月 21 日.
- ・ 大本瑞穂, 小松直貴, 植本光治, 小野倫也, NO アニールした SiC/SiO<sub>2</sub> 界面原子構造の第一原理計算, 第 83 回応用物理学会秋季講演会, 2022 年 9 月 21 日.

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	○	1,386	
Wisteria/BDEC-01	○	230,010	
※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。			