

## 第一原理計算コード RSPACE の高速化改良とデバイス界面の輸送特性解析

### Improvement of first-principles calculation code RSPACE and investigation of transport property at device interfaces

小野倫也

神戸大学大学院工学研究科

#### 1. 研究目的

本課題の目的は、(1)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、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を高機能化すること、(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を評価すること、(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・構造を設計すること、(4)富岳以降のスパコンの開発動向を見据え、RSPACE の計算のボトルネック部を GPU 用のアルゴリズムに置き換えることである。2023 年度は、RSPACE を用いたデバイス界面のキャリア輸送特性シミュレーションと Cygnus/Pegasus を用いた高速伝導特性計算コードの開発・計算効率を実証するシミュレーションを実施した。

#### 2. 研究成果の内容

SiC は、次世代の省エネパワーエレクトロニクスデバイスのチャネル材料として期待されているが、電界効果トランジスタにおける電界効果移動度の低さが本格普及を阻んでいる。熱酸化により SiC/SiO<sub>2</sub> 界面を作成した後に、NO ガス中でアニールすると、移動度が向上することが分かっている。SiC の伝導帯電子状態は自由電子的に振る舞い、SiO<sub>2</sub> 中の酸素原子の Coulomb 相互作用の影響を受けやすい。2022 年度までの研究では、NO ガスアニールで SiC/SiO<sub>2</sub> 界面に導入された窒化膜が、酸素原子からの

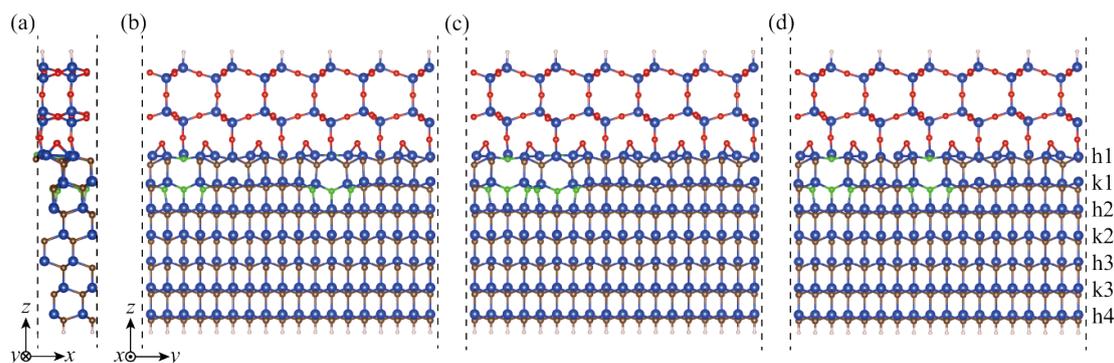


図 1. SiC/SiO<sub>2</sub> 界面の計算モデル。部分的に窒化された界面モデルの(a)側面図、(b)-(d)正面図。

表 1. 射影により計算した伝導帯電子数。

	Model	h1 層	h2 層	h3 層	Model	h1 層	h2 層
窒化前	H1	0.99	2.67	2.94	K1	2.27	2.74
部分窒化 1		0.75	2.49	2.86		1.77	2.77
部分窒化 2		0.74	2.48	2.89		1.62	2.76
部分窒化 3		0.78	2.45	2.88		1.74	2.75
全窒化		0.38	2.29	2.96		0.31	2.81
窒化前	H3	2.04	2.75	2.94	K3	2.55	2.72
部分窒化 1		0.93	2.48	2.85		1.84	2.74
部分窒化 2		1.11	2.87	2.87		1.76	2.76
部分窒化 3		1.08	2.50	2.85		1.96	2.76
全窒化		0.25	2.26	2.97		0.15	2.83

Coulomb 相互作用を遮蔽することを明らかにした。しかしながら、計算コストの制約から大きな計算モデルを使用できず、界面における窒素原子密度は実デバイスより 3 程度高かった。2023 年度は、本課題で高速化された RSPACE を活用し、実デバイスの窒素原子密度を反映した大規模モデルを用いて、窒化膜の遮蔽効果を検証した。

図 1(a)~(d)にアニール後の SiC/SiO<sub>2</sub> 界面の計算モデルを示す。窒化可能なサイトを全て窒化すると、2022 年までの研究のように窒素原子密度が過剰になるため、窒化可能なサイトのうち 1/3 を窒化した。SiC(0001)表面には、h サイトが最表面の h 面と k サイトが最表面の k 面がある。h 面、k 面が SiO<sub>2</sub> に接した両方のモデルに対して電子状態を計算した。また、SiO<sub>2</sub> 側の原子構造にも 3 つの酸素原子を介して SiC に接合する界面と 1 つの酸素原子を介して SiC に接合する界面が考えられるため、これら両方を計算した。これらのモデルを SiC 表面のサイトと介在する酸素原子数を使って H1、H3、K1、K3 モデルと称する。SiC の伝導帯電子に対する遮蔽効果は、SiC/SiO<sub>2</sub> 界面の伝導帯準位波動関数を、SiO<sub>2</sub> 層の影響を受けない SiC 薄膜の伝導帯波動関数に射影することによって求められる電子数の増減を調べることで評価した。表 1 の結果より、アニール前は電子数が 2 以上になる原子層が H1、H3、K1、K3 モデルで異なっていたものが、アニール後は窒化膜による遮蔽効果により全てのモデルで h2 層に揃っていることが分かる。この傾向は、窒素原子密度が実デバイスよりも 3 倍多い全窒化の場合も今回の部分的に窒化された場合も、変わらないことから、実デバイス程度の窒素原子密度でも窒化膜の遮蔽効果は機能すると結論付けられる。

### 3. 学際共同利用プログラムが果たした役割と意義

本利用プログラムで高速化した RSPACE を活用し、Cygnus、Wisteria 等のスパコンで実行することにより、実デバイスの窒素原子密度に近い計算モデルを用いた大規模計算が実施できた。

#### 4. 今後の展望

窒素原子密度が低くても窒化膜の遮蔽効果が機能することが示されたものの、界面窒化位置の不均一性は、界面でのキャリア散乱の原因となることが懸念される。不均一性がキャリア移動に与える影響を、RSPACE の伝導特性計算機能を活用して明らかにする。

#### 5. 成果発表

##### (1) 学術論文

- H. Naganuma, M. Uemoto, H. Adachi, H. Shinya, I. Mochizuki, M. Kobayashi, A. Hirata, B. Dlubak, T. Ono, P. Seneor, J. Robertson, and K. Amemiya, Twist pz Orbital and Spin Moment of the Wavy-Graphene/ $L1_0$ -FePd Moiré Interface, *J. Phys. Chem. C* **127**, 11481 (2023).
- T. Akamatsu, M. Uemoto, Y. Egami, and T. Ono, GPU acceleration of conjugate gradient method obtaining Green's function for transport-property calculation, *Comput. Phys. Comm.* **295**, 108989 (2024).
- M. Uemoto, M. Nishiura, and Tomoya Ono, Valley filters using graphene blister defects from first principles, *J. Phys. Condens. Matt.* **36**, 095301 (2024).
- M. Uemoto, N. Funaki, K. Yokota, T. Hosoi, and T. Ono, Density functional theory study on effect of NO annealing for SiC(0001) surface with atomic-scale steps, *Appl. Phys. Express* **17**, 011009 (2024).
- M. Uemoto, H. Adachi, R. Endo, H. Shinya, H. Naganuma, and T. Ono, First-principle study of spin transport property in  $L1_0$ -FePd(001)/graphene heterojunction, *J. Appl. Phys.* **135**, 043902 (2024).

##### (2) 学会発表

- 遠藤竜佑, 植本光治, 新屋ひかり, 永沼博, 小野倫也, 鉄・パラジウム合金の第一原理計算による表面構造予測, 強的秩序とその操作に関わる第 17 回夏の学校, 2023 年 9 月 23 日.
- 植本光治, 遠藤竜介, 新屋ひかり, 永沼博, 小野倫也,  $L1_0$ -FePd(001)/グラフェン磁気トンネル接合の第一原理伝導計算, 強的秩序とその操作に関わる第 17 回夏の学校, 2023 年 9 月 23 日.
- 遠藤竜佑, 植本光治, 新屋ひかり, 永沼博, 小野倫也, 強磁性金属/2 次元物質のヘテロ界面の電子・磁気状態の第一原理計算, 第 84 回応用物理学会秋季学術講演会, 2023 年 9 月 21 日.
- 植本光治, 遠藤竜介, 新屋ひかり, 永沼博, 小野倫也, FePd/グラフェン/FePd の接合のスピントラnsport特性の第一原理計算, 第 84 回応用物理学会秋季学術講演会, 2023 年 9 月 21 日.
- 古島弥来, 植本光治, 小野倫也, 単一  $\pi$  共役系分子架橋系のダイオード特性の第一原理計算による研究, 第 84 回応用物理学会秋季学術講演会, 2023 年 9 月 19 日.
- M. Ohmoto, N. Komatsu, M. Uemoto, and T. Ono, First-principles calculation

- for SiC/SiO<sub>2</sub> interface atomic structure after NO annealing, 2023 International Conference on Solid State Devices and Materials, 2023 年 9 月 7 日.
- N. Funaki, K. Yokota, M. Uemoto, T. Hosoi, T. Ono, Improvement of Channel Resistance at SiC/SiO<sub>2</sub> with Atomic-scale Steps by NO Annealing, 2023 International Workshop on Dielectric Thin Films for Future Electron Devices: Science and Technology, 2023 年 10 月 25 日.
  - 小野倫也, 計算科学手法による SiC-MOS 界面の電子状態・キャリア伝導特性解析, 電子情報通信学会令和 5 年 11 月度 SDM 研究会, 2023 年 11 月 10 日.
  - T. Ono, Density functional theory calculation for carrier scattering at 4H-SiC(0001)/SiO<sub>2</sub> interface, International Conference on Simulation of Semiconductor Processes and Devices 2023, , 2023 年 9 月 29 日.
  - T. Ono, Density functional theory calculation for carrier scattering at electronic device interface, International Workshop on Massively Parallel Programming for Quantum Chemistry and Physics (MPQCP 2024), 2024 年 1 月 9 日.
  - W. Hasan, M. Uemoto, and T. Ono, Density functional study of VO<sub>2</sub> growth on hexagonal boron nitride & graphene, JAIST International symposium on Nano-Materials for Novel Devices, 2024 年 1 月 11 日.
  - M. Uemoto, R. Endo, H. Shinya, H. Naganuma, and T. Ono, First-principles study on structural and electronic properties of FePd/graphene hetero-interfaces, JAIST International symposium on Nano-Materials for Novel Devices, 2024 年 1 月 11 日.
  - 古島弥来, 植本光治, 小野倫也, 単一 π 共役系分子トランジスタの架橋収率向上のための化学修飾効果の第一原理計算による研究, 第 71 回応用物理学会春季学術講演会, 2024 年 3 月 23 日.
  - 植本光治, ハサンワキル, 余博源, 服部梓, 田中秀和, 小野倫也, VO<sub>2</sub>/hBN ヘテロ界面の原子構造の第一原理予測, 第 71 回応用物理学会春季学術講演会, 2024 年 3 月 25 日.

使用計算機	使用計算機に ○	配分リソース※		
		当初配分	移行*	追加配分
Cygnus	○	22,000	-5,000	
Pegasus	○	550	+2,500	
Wisteria/BDEC-01	○	200,000		
※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。 * バジェット移行を行った場合、「+2000」「-1000」のように記入				