

第一原理計算コード RSPACE の GPU チューニングとデバイス界面 の電子状態解析

Acceleration of RSPACE by GPU and investigation of electronic structures of 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、電子デバイスを通る電流の解析と電子デバイス用高機能界面を設計し、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)トンネル磁気接合界面や分子架橋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。2024 年度は、RSPACE を用いた半導体デバイス界面および分子架橋界面のキャリア輸送特性シミュレーションと Cygnus/Pegasus を用いた伝導特性計算コードの GPU チューニングを実施した。

2. 研究成果の内容

SiC は次世代パワーデバイスの材料として注目を集めている。4H-SiC の Si 面[(0001)]を用いて作成されるプレーナー型 MOSFET では、SiC/SiO₂ 界面のオン電流がバルク中に比べて非常に低く、期待されている性能を十分に発揮できていない。オン電流の低下は SiC 基板の熱酸化過程で形成される欠陥によるキャリア散乱が原因だと考えられており、オン電流を増加させるために熱酸化後に NO アニールが施されている。我々はこれまで第一原理計算を用いて NO アニール後の界面原子構造を調べ、SiC 基板中の C 原子を N 原子で置換したモデルを提案し、NO アニール後の N 原子は SiC 基板側の最も SiO₂ に近い原子層に蓄積することを報告した。この研究における N 原子密度は実デバイスのものより 3 倍高かった。本研究では、界面の N 原子密度を実デバイスに合わせた界面モデルを用いて、NO アニール後の電子状態と伝導特性を計算し、部分的に挿入された N 原子の移動度への影響を調査した。

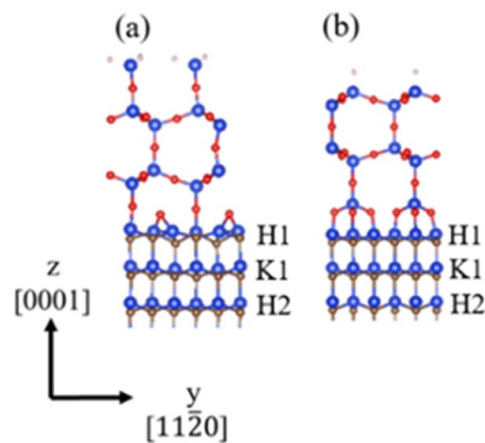


図 1. SiC(0001)/SiO₂ 界面の計算モデル。
青球、赤球、赤球、緑球、灰球は、それ
ぞれ Si、C、O、N、H 原子を表す。(a)は h1
界面モデル、(b)は h3 界面モデルを表す。

本研究で用いた SiC(0001)/SiO₂ 界面原子構造モデルを図 1 に示す。ここで最上位層が h サイトのものに対して、SiO₂ 層の O 原子と 1 配位で結合している図 1(a) のモデルを h1 モデル、SiO₂ 層の O 原子と 3 配位で結合している図 1(b) のモデルを h3 モデルと名付けた。最上層が k サイトのものに対しても同様に k1、k3 モデルと名付けた。SiC 層において h サイトの 1 層目を H1、k サイトの 1 層目を K1 と名付けた。NO アニール後の界面における N 原子面密度は実デバイスに合わせて $3.5 \times 10^{14} \text{cm}^{-2}$ とした。本研究では、部分的に挿入された N 原子がキャリアを散乱し、ホール移動度に影響を与える可能性を、伝導特性計算を用いて調査した。伝導特性計算で用いた計算モデルを図 2 に示す。計算モデルは左電極領域、散乱領域、右電極領域の 3 つに分けられ、ランダムに窒化される実デバイスを模すべく、両電極領域と散乱領域の窒化層の間隔を変えた。

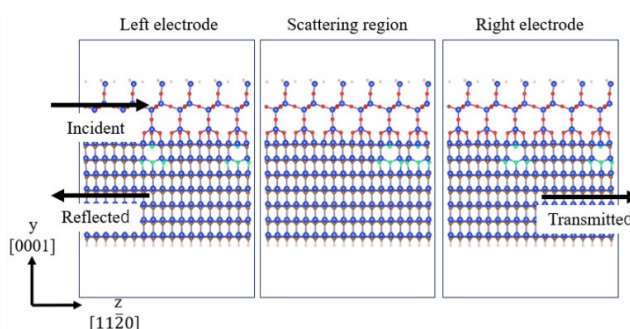


図 2. 伝導計算モデル。電子は左側から入射され、右側に通抜ける。

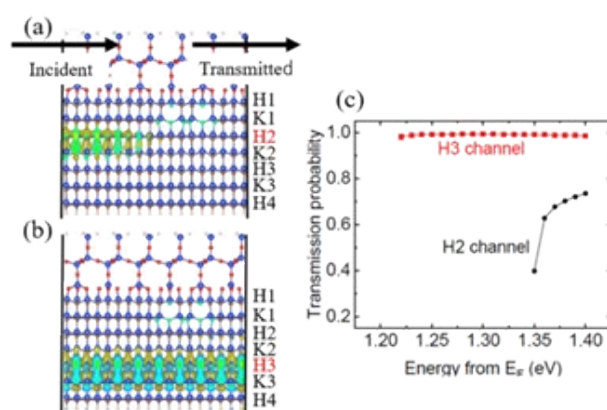


図 3. 透過電子の電子密度分布と透過確率。(a)窒化層の直下(H2)を流れるチャンネルの電子密度分布。(b)基板(H3)内部を流れるチャンネルの電子密度分布。(c)透過スペクトル。

h3 モデルにおけるキャリアの電子密度分布と透過スペクトルを図 3 に示す。上部の H2 チャンネルは N 原子が挿入された領域で透過率が減少していることが確認できる。一方、k3 モデルにおいて、上部と下部のチャンネルの両方で透過率が減少しない。これはチャンネルが窒化層から離れて存在していることにより、キャリア散乱が抑制されていることが理由だと考えられる。h1 モデル、k1 モデルの場合も同様の結論が得られる。また、部分的に挿入された N 原子による上部チャンネルのキャリア散乱は O 原子挿入による欠陥と同様のものである。これは NO アニールによって界面のホール移動度は向上しないという実験事実と矛盾しない。さらにこの結果は、界面の N 原子面密度がポテンシャルの揺らぎがなくなる程度に十分に高い場合にはホール移動度の向上が期待できることを示唆している。

3. 学際共同利用プログラムが果たした役割と意義

第一原理伝導特性計算は、グリーン関数の求解部分の計算が重く、膨大な計算コストを要する。とりわけ異種物質が接合する界面は計算規模が大きくなる。学際共同利用で供されるスパコン

を活用することで、MOS 界面におけるキャリア散乱特性のシミュレーションが可能になった。

4. 今後の展望

SiC を用いた MOSFET は、今回研究対象としたプレーナー型の他に、界面の面方位が異なるトレンチ型の MOSFET も有望視されている。今後、GPU チューニングで高速化された恩恵を活用し、トレンチ型の MOS 界面のキャリア伝導特性解析を進める。

5. 成果発表

(1) 学術論文

- ・ M. Furushima, M. Uemoto, D. Yin, S. Izawa, R. Shintani, Y. Majima, T. Ono, Insertion of methylene groups into functional molecules for high thermal stability and superior functionality of single-molecule transistors: a first-principles study, New Journal of Chemistry **48**, 16008 (2024).
- ・ T. Akamatsu, M. Uemoto, Y. Egami, T. Ono, GPU acceleration of overbridging boundary matching method without Green's functions based on real-space finite-difference method, Computer Physics Communications **312**, 109585 (2025).

(2) 学会発表

- ・ 植本光治, 船木七星斗, 細井卓治, 小野倫也, 第一原理計算による SiC(0001)ステップ界面への NO アニーリング効果の予測, 電子情報通信学会 シリコン材料・デバイス研究会(SDM), 2024 年 6 月 21 日.
- ・ N. Matsumoto, R. Endo, M. Uemoto, T. Ono, Density functional theory calculation for interface electronic structure and transport property of FeNi/2D layer materials, International Conference on Magnetism (ICM2024), 2024 年 7 月 5 日.
- ・ M. Uemoto, R. Endo, H. Shinya, H. Naganuma, T. Ono, First-principles study of electronic and spin-transport properties of FePd and graphene heterostructures, International Conference on Magnetism (ICM2024), 2024 年 7 月 5 日.
- ・ T. Akamatsu, M. Uemoto, Y. Egami, T. Ono, GPU acceleration of calculation for generalized Bloch waves based on the real-space finite-difference method, Conference on Computational Physics 2024 (CCP2024), 2024 年 7 月 8 日
- ・ M. Furushima, M. Uemoto, T. Ono, Effects of inserted methylenes on yields and properties of a molecule transistor, 20th International Conference on Density Functional Theory and its Applications (DFT2024), 2024 年 8 月 29 日.
- ・ N. Matsumoto, M. Uemoto, T. Ono, DFT study on atomic structures of FeNi/2D materials, 20th International Conference on Density Functional Theory and its Applications (DFT2024), 2024 年 8 月 29 日.

- ・ K. Sugiyama, N. Funaki, M. Uemoto, T. Ono, DFT calculation for electronic structure of SiC-MOS after NO annealing, 20th International Conference on Density Functional Theory and its Applications (DFT2024), 2024 年 8 月 29 日.
- ・ N. Funaki, K. Sugiyama, M. Uemoto, T. Ono, DFT study on relation between electronic structure and areal N atom density at 4H-SiC/SiO₂ after NO annealing, 2024 International Conference on Solid State Devices and Materials (SSDM), 2024 年 9 月 4 日.
- ・ 古島 弥来, 植本 光治, 小野 倫也, 単一分子架橋系の整流特性の第一原理計算による研究, 第 85 回応用物理学会秋季学術講演会, 2024 年 9 月 20 日.
- ・ 杉山 耕生, 舩木 七星斗, 植本 光治, 小野 倫也, 第一原理計算による NO アニール後の SiC/SiO₂ 界面の電子状態解析, 第 85 回応用物理学会秋季学術講演会, 2024 年 9 月 20 日.
- ・ 松本 尚弥, 植本 光治, 遠藤 竜佑, 小野 倫也, 第一原理計算による FeNi/2D materials 界面の原子構造予測, 第 85 回応用物理学会秋季学術講演会, 2024 年 9 月 20 日.
- ・ 遠藤 竜佑, 植本 光治, 松本 尚弥, ヴェルガラ サミュエル, 新屋 ひかり, 永沼 博, 小野 倫也, L10 秩序合金/2 次元物質界面の原子スケール構造の第一原理計算, 第 85 回応用物理学会秋季学術講演会, 2024 年 9 月 20 日.
- ・ 松本 尚弥, 植本 光治, 小野 倫也, 第一原理計算を用いた FeNi/2D materials の原子構造解析, 強的秩序とその操作に関する第 19 回研究会-夏の学校-, 2024 年 9 月 20 日.
- ・ 遠藤 竜佑, 植本 光治, 松本 尚弥, ヴェルガラ サミュエル, 新屋 ひかり, 永沼 博, 小野 倫也, 密度汎関数理論による L10 秩序合金/2 次元物質のヘテロ界面の原子構造計算, 強的秩序とその操作に関する第 19 回研究会-夏の学校-, 2024 年 9 月 20 日.
- ・ T. Ono, M. Uemoto, N. Funaki, K. Sugiyama, DFT analysis on the electronic structure of 4H-SiC/SiO₂ after NO annealing, International Conference on Silicon Carbide and Related Materials (ICSCRM) 2024, 2024 年 10 月 2 日.
- ・ 松本 尚弥, 遠藤 竜佑, 植本 光治, ヴェルガラ サミュエル, 新屋 ひかり, 永沼 博, 小野 倫也, スピントロニクス応用向け鉄系合金界面の原子構造予測, 阪大スピントロニクスセンター研究会, 2024 年 12 月 6 日.
- ・ 植本 光治, 遠藤 竜佑, 松本 尚弥, ヴェルガラ サミュエル, 新屋 ひかり, 永沼 博, 小野 倫也, 第一原理計算をもちいた強磁性合金・二次元物質ヘテロ界面の構造と伝導特性の解析, 阪大スピントロニクスセンター研究会, 2024 年 12 月 6 日.
- ・ T. Ono, M. Uemoto, N. Funaki, K. Sugiyama, DFT study on electronic structure and carrier scattering property at 4H-SiC/SiO₂ after NO annealing, 55th IEEE

- Semiconductor Interface Specialists Conference, 2024 年 12 月 14 日.
- ・ 小野 倫也, 計算科学手法を用いた界面電子構造の解析・予測 Controlled growth and characterization 研究会 2024-II, 2024 年 12 月 20 日.
 - ・ 杉山 耕生, 船木 七星斗, 植本 光治, 小野 倫也, 第一原理計算を用いた NO アニール後の SiC(1-100)/SiO₂ 界面の電子状態解析, 第 30 回電子デバイス界面テクノロジー研究会, 2025 年 1 月 23 日.
 - ・ T. Akamatsu, M. Uemoto, Y. Egami, T. Ono, GPU implementation of generalized Bloch wave calculation for the first-principles electron transport calculation, APS Global Physics Summit 2025, 2025 年 3 月 17 日.
 - ・ 松本 尚弥, 植本 光治, 小野 倫也, 第一原理計算による NiFe/graphene 界面の電子構造予測, 第 20 回 強制的秩序とその操作に関する研究会, 2025 年 3 月 18 日.
 - ・ M. Uemoto, R. Endo, N. Matsumoto, H. Shinya, S. Vergara, H. Naganuma, T. Ono, First-principles study of atomic-scale structure and spin-transport properties of FePd and graphene heterostructures, 第 20 回 強制的秩序とその操作に関する研究会, 2025 年 3 月 18 日.
 - ・ M. Furushima, M. Uemoto, K. Kajikawa, R. Shintani, Y. Majima, T. Ono, Electronic transport property of a single-molecule transistor in its radical cation state, APS Global Physics Summit 2025, 2025 年 3 月 19 日.
 - ・ M. Uemoto, N. Matsumoto, S. Vergara, H. Shinya, H. Naganuma, T. Ono, First-principles study of van der Waals heterostructure of 2D material and iron-based ferromagnetic alloy, APS Global Physics Summit 2025, 2025 年 3 月 20 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	○	21384.00	-1,000	
Pegasus	○	405.00	+500	
Wisteria/BDEC-01	○	144,000		
※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				