

RSPACE の GPU チューニングと デバイス界面の電子状態・伝導特性予測

Acceleration of RSPACE by GPU and investigation of electronic structures and conduction property 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。2025 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 Pegasus を用いて伝導特性を計算するために必要な Green 関数連結プログラムの 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

表 1. 散乱領域の原子構造配置

Model		Model	
1	B A A B	12	C A C B
2	C A A B	13	C B C B
3	B B A B	14	B C C B
4	C B A B	15	C C C B
5	B C A B	16	C A A C
6	C C A B	17	C B A C
7	C A B B	18	C C A C
8	B B B B	19	C B B C
9	C B B B	20	C C B C
10	B C B B	21	C C C C
11	C C B B		

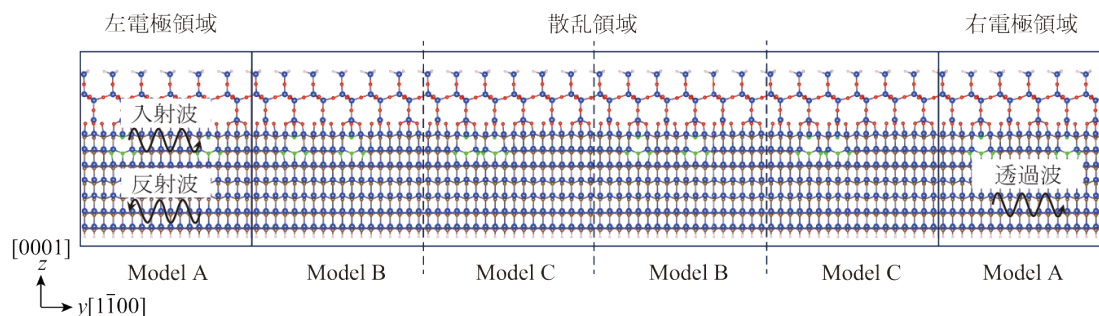


図 1. SiC(0001)/SiO₂ 界面の計算モデル。青球、茶球、赤球、緑球、灰球は、それぞれ Si、C、O、Si、O 原子を示す。

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。2024 年度までに NO ガスアニール後の界面において、界面に導入された窒化領域がキャリアを散乱することを明らかにした。一方で、計算コストの問題から調べることのできる窒化領域分布が限定されていた。2025 年度は Green 関数連結計算アルゴリズムを GPU 実行対応に改良し、様々な窒化領域分布についてキャリア散乱特性を計算した。そして、窒化領域直下部にチャンネルを作る 4H-SiC の h サイトを最表面とする界面はキャリアが散乱されやすいという小さいモデルで得た予測を確かなものにした。

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。窒化領域が等間隔に並んだモデル A をソース・ドレイン電極領域とし、窒化領域の分布を変えたモデル A~C の中から 4 つ組み合わせた構造を散乱領域とした。表 1 に散乱領域の組み合わせを示す。図 2 にキャリア散乱特性を示す。h 面を最表面とする界面、k 面を最表面とする界面ともに酸化膜に近い側のチャンネル h2 チャンネルと基板深部寄りのチャンネル h3 チャンネルが存在するが、h 面を最表面とする界面では h2 チャンネルのキャリアがオン状態において散乱されていることが分かる。

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、Green 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。本報告のように様々なバリエーションの界面のキャリア散乱特性を評価できた背景には、GPU を駆使したキャリア散乱特性解析が鍵を握っており、豊富な GPU 計算資源を提供していただいた本プログラムの貢献は大きい。

4. 今後の展望

SiC を用いた MOSFET は、今回用いた Si 面以外に、SiC の面方位が異なる a 面や m 面を

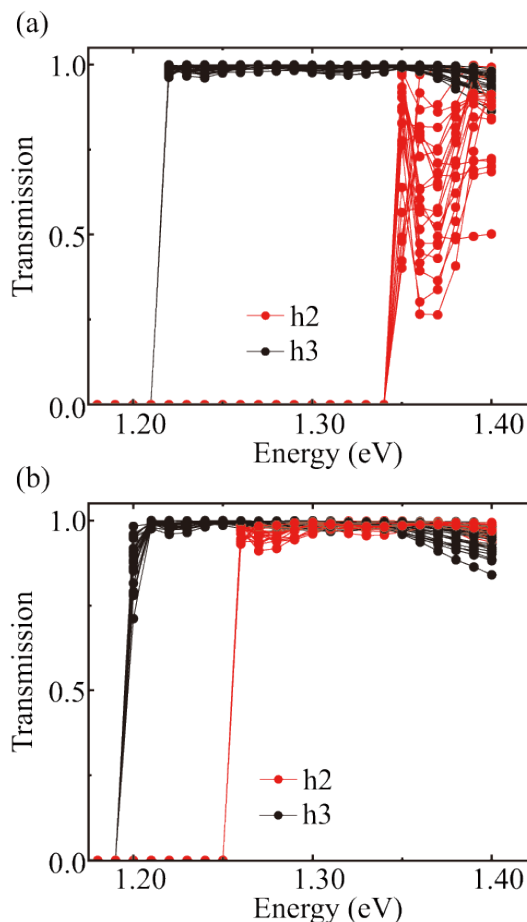


図 2. 界面のチャンネルの透過率。(a)h サイトを最表面とする界面、(b)k サイトを最表面とする界面。h サイトを最表面とする界面の酸化膜に近い側の h2 チャンネルのキャリアがオン状態においても低いことが分かる。

用いた MOSFET も有望視されている。また、実際の MOS は酸化膜がアモルファス構造である。今後、GPU チューニングで高速化された恩恵を活用し、様々な 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

- ・ N. Matsumoto, R. Endo, M. Uemoto, T. Ono, Theoretical investigation of interface atomic structure of graphene on NiFe alloy substrate, *Journal of Applied physics* **138**, 104305 (2025).

(2) 学会発表

- ・ 山内 一馬, 植本 光治, 小野 倫也, 固体電子系計算に向けた量子回路シミュレータ開発, 応用物理学会関西支部 2025 年度第 1 回講演会, 2025 年 6 月 3 日.
- ・ 松本 尚弥, 植本 光治, 小野 倫也, 第一原理計算による FeNi/graphene 界面の原子構造解析, 学術変革領域研究(A)「2.5 次元物質科学: 社会変革に向けた物質科学のパラダイムシフト」第 9 回 領域会議, 2025 年 6 月 12 日.
- ・ 山内 一馬, 植本 光治, 小野 倫也, 伝導予測シミュレーションにおける量子計算の応用, 第 86 回応用物理学会秋季学術講演会, 2025 年 9 月 9 日.
- ・ 古島 弥来, 植本 光治, 小野 倫也, 単一分子架橋系の有限温度効果の第一原理計算による研究, 第 86 回応用物理学会秋季学術講演会, 2025 年 9 月 9 日.
- ・ 松本 尚弥, 植本 光治, 小野 倫也, 第一原理計算を用いた NiFe/グラフェン界面の原子構造及び伝導特性の解明, 第 86 回応用物理学会秋季学術講演会, 2025 年 9 月 8 日.
- ・ 松本 尚弥, 植本 光治, 小野 倫也, NiFe/graphene 界面原子構造の理論解析, 強制的秩序とその操作に関する第 21 回研究会-夏の学校-, 2025 年 9 月 10 日.
- ・ 山内 一馬, 植本 光治, 小野 倫也, 量子計算を活用した伝導予測シミュレーション, 強制的秩序とその操作に関する第 21 回研究会-夏の学校-, 2025 年 9 月 10 日.
- ・ N. Matsumoto, M. Uemoto, T. Ono, DFT analysis on electronic structure of graphene based magnetic tunnel junctions, *European Materials Research Society 2025 Fall Meeting*, 2025 年 9 月 16 日.
- ・ M. Uemoto, First-principles analysis of nonlinear optical response in silicon semiconducting nanostructures, *The 26th Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations*, 2025 年 10 月 27 日.
- ・ N. Matsumoto, M. Uemoto, T. Ono, First-Principles Calculation on Electronic Structures of NiFe/graphene heterointerface, *The 26th Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations*, 2025 年 10 月 28 日.
- ・ N. Matsumoto, M. Uemoto, T. Ono, DFT analysis on electronic structure and magnetoresistance of NiFe/graphene interface, *The 16th International*

Conference on Recent Progress in Graphene and 2D Materials Research, 2025 年 11 月 5 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 アニール前後の SiC/SiO₂ 界面の電子状態及び伝導特性解析, 応用物理学会 先進パワー半導体分科会 第 12 回講演会, 2025 年 11 月 19 日.
- ・ 松本 尚弥, 植本 光治, 小野 倫也, 第一原理計算による NiFe/hBN 界面の原子構造解析, 学術変革領域研究(A)「2.5 次元物質科学: 社会変革に向けた物質科学のパラダイムシフト」 第 10 回 領域会議, 2026 年 1 月 23 日.
- ・ 古島 弥来, 植本 光治, 小野 倫也, 単一对称分子架橋系の整流特性発現機構の第一原理計算による研究, 第 73 回応用物理学会春季学術講演会, 2026 年 3 月 17 日.
- ・ N. Matsumoto, M. Uemoto, T. Ono, DFT analysis on atomic structure of NiFe/2D materials heterointerface, APS Global Physics Summit 2026, 2026 年 3 月 18 日.
- ・ M. Furushima, M. Uemoto, T. Ono, DFT study on electron-transport property of a single-molecule transistor formed by long π -conjugated molecules, APS Global Physics Summit 2026, 2026 年 3 月 19 日.
- ・ M. Uemoto, N. Matsumoto, S. Vergara, H. Shinya, H. Naganuma, T. Ono, Interface structure and fabrication process of FePd/2D material heterojunctions, APS Global Physics Summit 2026, 2026 年 3 月 19 日.
- ・ 山内 一馬, 植本 光治, 小野 倫也, 量子アルゴリズムの伝導特性計算への応用, 日本物理学会 2026 年春季大会, 2026 年 3 月 26 日.

使用計算機	使用計算機に○	配分リソース*		
		当初配分	移行*	一般利用による追加
Pegasus	○	9,680		
Miyabi-G	○	10,890		
Miyabi-C	○	7,040		
※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				