

VII-5 半導体ナノ物性グループ

1. メンバー

教授 白石 賢二

助教 神谷 克政

研究員 Cristoph M. Puetter、洗平昌晃

大学院生 博士前期課程 6名、 博士後期課程 8名

2. 概要

半導体ナノ物性グループは本年度は、ナノ物質・ナノ材料の機能・物性解明、及び、新奇ナノ物質のデザインを目指したナノサイエンス・ナノテクノロジーの研究と宇宙生命連携の研究を行った。

3. 研究成果

【1】 次世代パワーデバイス材料 SiC の研究

SiC は次世代パワーデバイスとして期待されている。本研究では SiC 熱酸化によって C-C ボンドが界面フロントに必ず形成されることを第一原理計算によって示した。本研究成果は、熱酸化によって形成された SiC/SiO₂ 界面の特性がなぜ悪いのかという長年にわたる問題を原子レベルから世界で初めて明らかにしたもので、パワーデバイス業界から大きな注目を集めている。

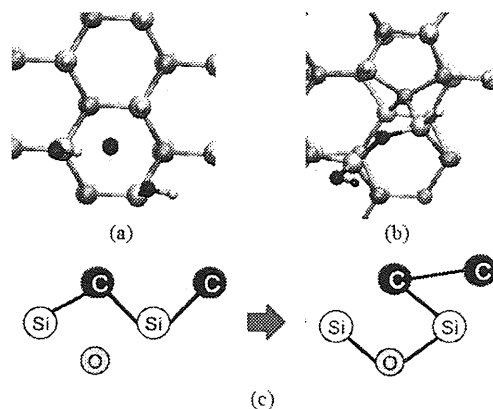


図 1: SiC の熱酸化の原子レベルの機構の模式図

【2】 次世代メモリ抵抗変化型メモリの機能発現機構の電子レベルでの解明

次世代メモリとして期待される抵抗変化型メモリは酸素空孔の凝集・離散による伝導フィラメントの形成と破壊が機能発現機構と考えられている。昨年度我々は、伝導フィラメントの形成・破壊はキャリア注入をきっかけとする構造相転移であることを世界に先駆けて明らかにした。本年度我々は、高性能の抵抗変化型メモリの設計指針を明らかにした。それは HfO₂ と電極の間に酸素空孔が形成されにくい Al₂O₃ 層を挿入することによって、抵抗変化型目盛の ON-OFF 比が飛躍的に向上することを示し、さらに Al₂O₃ 層の最適な厚さ等に関する設計も第一原理量子論によって行った。

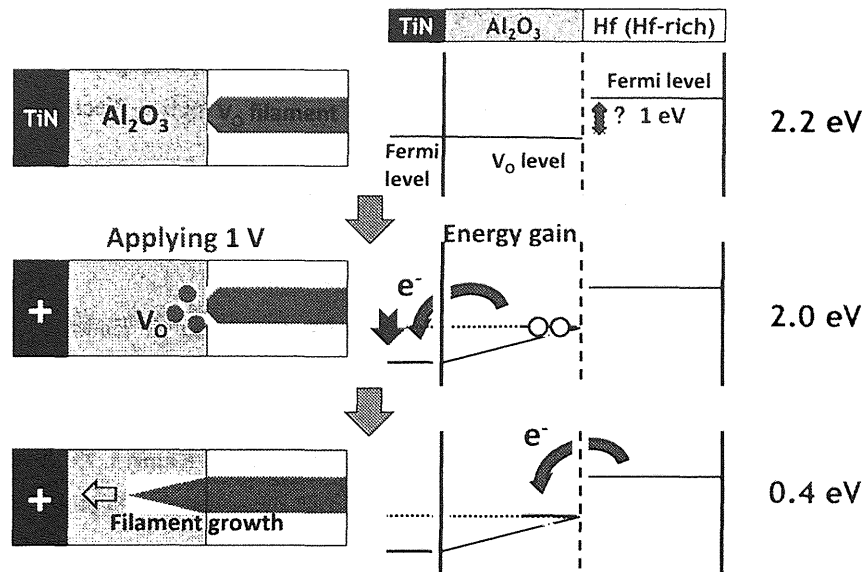


図 2 : 高性能の抵抗変化メモリ設計の指針

【3】 星間空間によるアミノ酸の形成・破壊過程の研究

星間空間におけるアミノ酸の形成・破壊は太陽系における生命誕生につながる非常に重要な物性である。本研究では当該センターの宇宙グループ・原子核グループ・生命グループと共同して初期太陽系におけるL型アミノ酸過剰発生の原因を第一原理量子論によって昨年度に引き続いて考察した。具体的には昨年度行った3つのアミノ酸以外のアミノ酸の円偏光二色性の計算を行った。その結果、昨年度検討した3種のアミノ酸と同様に、真空紫外領域の円偏光照射がL型アミノ酸過剰を引き起こす可能性が高いことを明らかにした。

【4】 多電子波束ダイナミクスの計算科学による検討

多電子波束ダイナミクスを時間依存ハートリーフォック近似を用いて考察し、多電子波束の特異な性質を明らかにした。その結果、電子は多くの電子から構成される波束として運動し、さらに一つの波束に含まれる電子数には限界があることも示した。

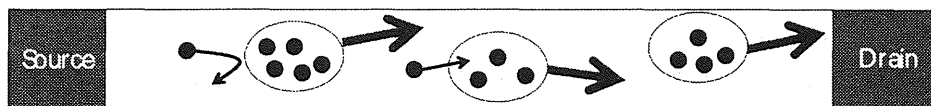


図 3 : 多電子波束による新しい伝導機構の模式図

<発表論文>

1. Y. Takada, Y. T. Yoon, T. Shiokawa, S. Konabe, M. Arikawa, M. Muraguchi, T. Endoh, Y. Hatsugai, and K. Shiraishi, "Multi-Electron Wave Packet Dynamics in Applied Electric Field", *Jpn. J. Appl. Phys.* 51, Art. No. 02BJ01 (2012)
2. K. Kamiya, Y. Ebihara, M. Kasu, and K. Shiraishi, "Efficient Structure for Deep-Ultraviolet Light-Emitting Diodes with High Emission Efficiency: A First-Principles Study of AlN/GaN Superlattice", *Jpn. J. Appl. Phys.* 51, Art. No. 02BJ11 (2012).
3. M. Arikawa, M. Muraguchi, Y. Hatsugai, K. Shiraishi, and T. Endoh, "Role of Synthetic Ferrimagnets in Magnetic Tunnel Junctions from Wave Packet Dynamics", *Jpn. J. Appl. Phys.* 51, Art. No. 02BM03 (2012).
4. Yasuhiro Ebihara, Kenta Chokawa, Shigenori Kato, Katsumasa Kamiya, Kenji Shiraishi, "Intrinsic origin of negative fixed charge in wet oxidation for silicon carbide", *Applied Physics Letters* **100**, 212110 (3 pages) (2012).
5. Takashi Yamauchi, Moon Young Yang, Katsumasa Kamiya, Kenji Shiraishi, Takashi Nakayama, "Theoretical study of Si-based ionic switch", *Applied Physics Letters* **100**, 203506 (4 pages) (2012).
6. Mitsuo Shoji, Kyohei Hanaoka, Akimasa Sato, Daiki Kondo, Moon Young Yang, Katsumasa Kamiya, and Kenji Shiraishi, "Calculation of the Electron Transfer Coupling Matrix Element in Diabatic Reactions", *International Journal of Quantum Chemistry*, DOI: 10.1002/qua.24074 (2012).
7. Katsumasa Kamiya, Yasuhiro Ebihara, Kenta Chokawa, Shigenori Kato, and Kenji Shiraishi, "Origins of Negative Fixed Charge in Wet Oxidation for SiC", *Materials Science Forum*, 740-742, 409-412 (2013).
8. Kenta Chokawa, Shigenori Kato, Katsumasa Kamiya, and Kenji Shiraishi, "A New-Type of Defect Generation at a 4H-SiC/SiO₂ interface by Oxidation Induced Compressive Strain", *Materials Science Forum*, 740-742, 469-472 (2013).
9. Shigenori Kato, Kenta Chokawa, Katsumasa Kamiya, and Kenji Shiraishi, "Theoretical Study of N incorporation Effect during SiC Oxidation", *Materials Science Forum*, 740-742, 455-458 (2013).
10. Taro Shiokawa, Genki Fujita, Yukihiro Takada, Satoru Konabe, Masakazu Muraguchi, Takahiro Yamamoto, Tetsuo Endoh, Yasuhiro Hatsugai, Kenji Shiraishi, "Dynamical Study of Multi-Electron Wave Packet in Nanoscale Structure", 52, 04CJ06 (2013).
11. Katsumasa Kamiya, Moon Young Yang, Takahiro Nagata, Seong-Geon Park, Blanka Magyari-Köpe, Toyohiro Chikyow, Keisaku Yamada, Masaaki Niwa, Yoshio Nishi, and Kenji Shiraishi, "Generalized Mechanism of the Resistance Switching in Binary-Oxide-Based Resistive Random-Access Memories", *Physical Review B*, 87, 155201 (5 pages) (2013).
12. Katsumasa Kamiya and Susumu Okada, "Energetics and Electronic Structures of Alkanes Adsorbed on Carbon Nanotubes", *Japanese Journal of Applied Physics*, 52, 04CN07 (3 pages) (2013).
13. Kenji Shiraishi, Keita Yamaguchi, Moon Young Yang, Seong-Geon Park, Katsumasa Kamiya, Yasuteru Shigeta, Blanka Magyari-Köpe, Masaaki Niwa, and Yoshio Nishi, "Computational Study toward Micro Electronics Engineering", *Proceedings of 2012 28th International Conference on*

<学術講演>

1. 長川健太、加藤重徳、真栄力、神谷克政、白石賢二、酸化による C-C 欠陥の形成と SiC MOSFET の性能劣化の理論的考察、第 21 回 SiC 研究会講演会、2012 年 11 月、大阪市中央公会堂、大阪府。
2. 長川健太、加藤重徳、真栄力、神谷克政、白石賢二、SiC 酸化による Si-Si 結合欠陥の形成と結晶多形による違いの考察、第 21 回 SiC 研究会講演会、2012 年 11 月、大阪市中央公会堂、大阪府。
3. 神谷克政、長川健太、個別討論会「SiC-MOS デバイス研究開発に関する最新動向と技術課題」、第 21 回 SiC 研究会講演会、2012 年 11 月 19~20 日、大阪市中央公会堂、大阪府。(パネル討論)
4. 長川 健太, 加藤 重徳, 真栄 力, 神谷 克政, 白石 賢二、酸化により引き起こされる SiC の本質的欠陥 第 18 回 ゲートスタック研究会 -材料・プロセス・評価の物理- 2013 年 1 月 25~26 日、ニューウェルシティー湯河原、静岡県
5. 真栄 力, 長川 健太, 神谷 克政, 白石 賢二、第一原理計算を用いた結晶多形の異なる薄膜 SiC における歪みによる電子構造変化の考察、第 21 回 SiC 研究会講演会、2012 年 11 月、大阪市中央公会堂、大阪府。
6. 真栄 力, 長川 健太, 神谷 克政, 白石 賢二、第一原理計算を用いた結晶多形の異なる薄膜 SiC における歪みによる電子構造変化の考察と MOSFET の最適面方位の提言、第 18 回 ゲートスタック研究会 -材料・プロセス・評価の物理-2013 年 1 月 25~26 日、ニューウェルシティー湯河原、静岡県
7. C. Shinnei, K. Chokawa, K. Kamiya and K. Shiraishi, Effect of Strain to the Electronics Structures of SiC Thin Film with Various Poly Types and Suggestion of Suitable MOSFET Direction, Workshop and IEEE EDS Mini-colloquium on Nanometer CMOS Technology (WIMNACT) 37 2013 年 2 月 18 日、東京工業大学、東京都
8. <招待講演> 白石賢二, 長川健太, 海老原康裕、加藤重徳、真栄力、神谷克政、第一原理計算に基づく SiC-MOSFET の設計指針、第 21 回 SiC 研究会講演会、2012 年 11 月、大阪市中央公会堂、大阪府。
9. <招待講演> Kenji Shiraishi, Katsumas Kamiya, Yasuhiro Ebihara, Kenta Chokawa, and Shigenori Kato, Atomistic investigation of SiC/SiO₂ interfaces for the SiC-MOSFET power devices, The Collaborative Conference on Crystal Growth (3CG), Orlando, Florida, USA, 12 月 11 日~14 日
10. <招待講演> K. Shiraishi, K. Chokawa, S. Kato, C. Shinnei, and K. Kamiya 、Guiding Principles toward SiC-MOSFET for Future Power Device Applications, Workshop and IEEE EDS Mini-colloquium on Nanometer CMOS Technology (WIMNACT) 37 2013 年 2 月 18 日、東京工業大学、東京都
11. <招待講演> K. Shiraishi, T. Shiokawa, G. Fujita, Y. Takada, M. Muraguchi, T. Yamamoto, T. Endoh, Y. Hatsugai, “Theoretical study of multi-electron wave packet dynamics in semiconductor nano-structures”, 2nd International Conference on Small Sciences,

- Orland, Florida, Dec. 16-19, 2012.
12. 高田幸宏、塩川太郎、尹永沢、小鍋哲、初貝安弘、白石賢二、山本貴博、「古典-量子クロスオーバー系における電子波束ダイナミクス」、第 73 回応用物理学学会学術講演会、愛媛大学・松山大学、松山市、2012 年 9 月 14 日
 13. 塩川太郎、藤田弦暉、高田幸宏、小鍋哲、村口正和、山本貴博、遠藤哲郎、初貝安弘、白石賢二、「一次元非一様ポテンシャル中の波束ダイナミクス」、日本物理学会 2012 年秋季大会、横浜国立大学、2012 年 9 月 18 日～21 日
 14. 藤田弦暉、塩川太郎、高田幸宏、小鍋哲、村口正和、山本貴博、遠藤哲郎、初貝安弘、白石賢二、「ナノ構造中の多電子波束ダイナミクスにおける電子間相互作用の効果」、日本物理学会 2012 年秋季大会、横浜国立大学、2012 年 9 月 18 日～21 日
 15. 塩川太郎、藤田弦暉、高田幸宏、小鍋哲、村口正和、山本貴博、遠藤哲郎、初貝安弘、白石賢二、
「多電子波束を用いた円電流ダイナミクスへの電子間相互作用の効果」、日本物理学会 2013 年年会、広島大学、2012 年 3 月 26 日～29 日
 16. 藤田弦暉、塩川太郎、高田幸宏、小鍋哲、村口正和、山本貴博、遠藤哲郎、初貝安弘、白石賢二、「スピン自由度を考慮した多電子波束ダイナミクスにおける電子間相互作用の効果」、日本物理学会 2013 年年会、広島大学、2013 年 3 月 26 日～29 日
 17. Yukihiro Takada, Taro Shiokawa, Young Taek Yoon, Satoru Konabe, Yasuhiro Hatsugai, Kenji Shiraishi Takahiro Yamamoto, “Multi-Electron Wave Packet Dynamics for Electron Transport in Classical-Quantum Crossover Regions”, IUMRS-International Conference on Electronic Materials (IUMRS-ICEM 2012), September 23-28, 2012, Pacifico Yokohama, Yokohama, Japan.
 18. Taro Shiokawa, Genki Fujita, Yukihiro Takada, Satoru Konabe, Masakazu Muraguchi, Takahiro Yamamoto, Tetsuo Endoh, Yasuhiro Hatsugai Kenji Shiraishi, “Multi-Electron Wave Packet Dynamics with Long-range Coulomb Interaction”, 2012 Workshop on Innovative Nanoscale Devices and Systems (WINDS 2012), Kohala Coast, Hawaii, USA, December 2-7th, 2012 .
 19. C. M. Puetter, S. Konabe, Y. Hatsugai, K. Shiraishi, “Semi-classical Klein tunneling with Berry curvature effects in graphene”, 2012 Workshop on Innovative Nanoscale Devices and Systems (WINDS 2012), Kohala Coast, Hawaii, USA, December 2-7th, 2012.
 20. Takefumi Kamioka, Hiroya Imai, Yoshinari Kamakura, Kenji Ohmori, Kenji Shiraishi, Masanori Niwa, Keisaku Yamada, Takano Watanabe, ” Current fluctuation in sub-nano second regime in gate-all-around nanowire channels studied with ensemble Monte Carlo/molecular dynamics simulation”, IEEE International Electron Devices Meeting (IEDM), San Francisco, USA, Dec. 11, 2012.
 21. Katsumasa Kamiya, Moon Young Yang, Blanka Magyari-Köpe, Masaaki Niwa, Yoshio Nishi, and Kenji Shiraishi, “Physics in Designing Desirable ReRAM Stack Structure -Atomistic Recipes Based on Oxygen Chemical Potential Control and Charge Injection/Removal”, IEEE International Electron Devices Meeting (IEDM), San Francisco, USA, Dec. 11, 2012.
 22. Taro Shiokawa, Yukihiro Takada, Young Taek Yoon, Satoru Konabe, Masakazu Muraguchi, Mitsuhiro Arikawa, Tetsuo Endoh, Yasuhiro Hatsugai, Kenji Shiraishi, “Applied

- Electric Field Dependence of Multi-electron Wave Packet Dynamics”, The Eighth International Nanotechnology Conference on Communication and Cooperation, Tsukuba, Japan, May 8-11, 2012.
23. Taro Shiokawa, Yukihiro Takada, Satoru Konabe, Masakazu Muraguchi, Tetsuo Endoh, Yasuhiro Hatsugai, Kenji Shiraishi, “The Effect of Coulomb Interaction in Multi-Electron Wave Packet Dynamics”, 31st International Conference on the Physics of Semiconductors, Zurich, Switzerland, July 29-August 3, 2012.
 24. Yukihiro Takada, Young Taek Yoon, Taro Shiokawa, Satoru Konabe, Mitsuhiro Arikawa, Masakazu Muraguchi, Tetsuo Endoh, Yasuhiro Hatsugai, Kenji Shiraishi, “Effectiveness of Time-Dependent Hartree-Fock Approaches for Multi-Electron Wave Packet Dynamics in Nanoscale Structures”, 31st International Conference on the Physics of Semiconductors, Zurich, Switzerland, July 29-August 3, 2012.
 25. Christoph M. Puetter, Satoru Konabe, Kenji Shiraishi, “Wavepacket dynamics in grapheme”, 31st International Conference on the Physics of Semiconductors, Zurich, Switzerland, July 29-August 3, 2012.
 26. Taro Shiokawa, Genki Fujita, Yukihiro Takada, Satoru Konabe, Masakazu Muraguchi, Takahiro Yamamoto, Tetsuo Endoh, Yasuhiro Hatsugai, Kenji Shiraishi, “Effect of Coulomb Interaction in Electron Wave Packet Dynamics in Nanoscale Devices”, 2012 International Conference on Solid State Devices and Materials, Kyoto, Japan, September 25-27, 2012.
 27. <招待講演> Kenji Shiraishi, Moon Young Yang, Katsumasa Kamiya, Blanka Magyari-Köpe, Masaaki Niwa, and Yoshio Nishi, “First Principles Guiding Principles for the Switching Process in Oxide ReRAM”, 2012 IEEE 11th International Conference on Solid-State and Integrated Circuit Technology, Oct. 29-Nov. 1 2012, Paradise Resort Hotel, Xian, China.
 28. <招待講演> Kenji Shiraishi, Moon Young Yang, Katsumasa Kamiya, Hiroyoshi Momida, Blanka Magyari-Köpe, Takahisa Ohno, Masaaki Niwa, and Yoshio Nishi, “On-Off Switching Mechanism of Oxide Based ReRAM by Ab Initio Electronic Structure Calculations”, 2nd International Workshop on Resistive RAM, October 8-9, 2012, Stanford University, Stanford, USA.
 29. <基調講演> Kenji Shiraishi, Keita Yamaguchi, Moon Young Yang, Seong-Geon Park, Katsumasa Kamiya, Yasuteru Shigeta, Blanka Magyari-Köpe, Masaaki Niwa, and Yoshio Nishi, “Computational Study toward Micro Electronics Engineering”, 2012 28th International Conference on Microelectronics, May 13-16 2012, University of Nis, Nis, Serbia.
 30. <招待講演> Katsumasa Kamiya, “First-Principles Studies on Proton Transfer Mechanisms in Cytochrome c Oxidase”, 2012 International Conference on Small Science, December 2012, Wald Disney World Swan and Dolphin, Orlando FL, USA.
 31. <招待講演> Blanka Magyari-Köpe, Katsumasa Kamiya, Kenji Shiraishi, and Yoshio Nishi, “Atomic-size Effects of the Conductive Filaments Formation and Rupture in Resistance Change Based Memory Devices”, 2012 International Conference on Small Science, December

2012, Wald Disney World Swan and Dolphin, Orlando FL, USA.

32. <招待講演> Katsumasa Kamiya, "On-off Switching Mechanism of Oxide Based ReRAM by First Principle Calculation", NCCAVS Thin Film Users Group, November 2012, SEMI Global Headquarters, San Jose, USA.

4. 受賞

1. 長川健太：若手奨励賞（服部賞）、第 18 回ゲートスタック研究会 ー材料・プロセス・評価の物理ー、2013 年 1 月 26 日、口頭発表 東レ総合研修センター、静岡県.
2. ヤンムンヨン：Best Poster Paper Award, Workshop and IEEE EDS Mini-colloquium on Nanometer CMOS Technology (WIMNACT) 37 2013 年 2 月 18 日、東京工業大学、東京都
3. ヤンムンヨン：優秀発表賞、2012 年度韓国物理学会（秋学術論文発表会）、2012 年 10 月

5. 学位論文

博士論文

1. 田中潤一：エッチングプロセスにおける気相および表面反応の研究
2. 鈴木輝夫：ナノスケール Si 半導体デバイスのコンポーネントレベル ESD に関する研究

修士論文

1. 吉崎智浩：4H-SiC 中の点欠陥の理論的検討
2. 近藤大生：Q/N に富んだペプチドがつくるアミロイド線維の構造安定化機構の計算科学的解析
3. 田口真彦：Theoretical study on the absorption spectrum of light-harvesting antenna in photosynthesis based on time-dependent density functional theory and its application for the detection of biomarker in extrasolar planets