

VII-3 表面界面物性グループ

1. メンバー

准教授 小野 倫也
研究員 Kirkham Christopher

2. 概要

物質の電子状態や伝導特性を量子力学の第一原理に基づいて高精度に計算でき、最先端のスーパーコンピュータで大規模計算を実現できる計算手法の開発を行っている。また、開発した第一原理計算コード RSPACE を用いた大規模シミュレーションにより、表面や界面で起こる物理現象の解明と予測を行っている。さらに、発見した物理現象をデバイスに応用する研究にも取り組むとともに、計算科学手法によるデバイスデザイン技術の構築を推進している。

3. 研究成果

【1】第一原理計算コード RSPACE の開発

超並列計算機での計算に適した実空間差分法に基づく第一原理電子状態・伝導特性計算法とこの方法に基づく計算コード RSPACE を開発している。RSPACE の伝導特性計算において、散乱領域の摂動グリーン関数の計算と電極の自己エネルギーの計算は、計算のボトルネックのひとつである。前者については、平成 26 年度までに数理研究グループと協力して解決法を開発した。平成 27 年度は、後者の問題に取り組んだ。後者の問題の本質は、一般化ブロッホ状態を計算する二次固有値問題用ソルバーである QZ 法は全固有値固有ベクトルを計算するため、計算量が行列サイズの 3 乗に比例しプロセス並列化にも向かないことである。この問題を回避すべく、本研究グループで以前開発していた波動関数接合法を用いた伝導計算法のテクニックを応用し、自己エネルギーが満たすべき連分数方程式を利用して自己エネルギーを計算する方法を開発した。

この方法は、進行波と進行波の直交補空間を用いて連分数方程式を解くので、全固有値固有ベクトルの計算を必要としない。そのため、QZ 法の使用による計算速度の制約

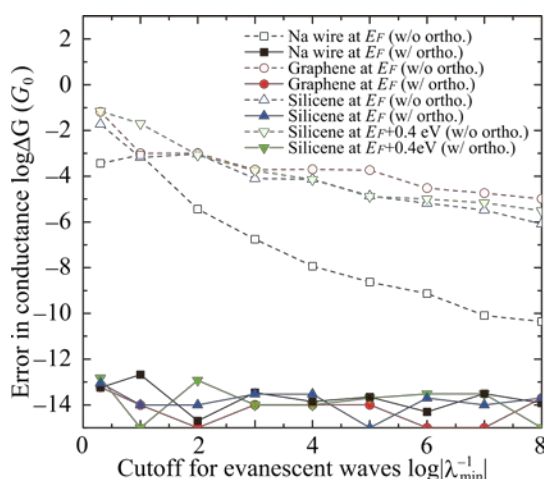


図 1 厳密解との比較。従来の回避法で計算した結果(点線)と本研究で開発した結果(実線)。文献[4]より。

がない。開発した計算方法の精度評価のため、この方法で計算した電極自己エネルギーを用いてナノ構造の電気伝導特性を計算した結果と、従来法の厳密な方法計算した電極自己エネルギーを用いた結果、および従来の回避法で計算した電極自己エネルギーを用いた結果の差を図1に示す。従来の回避法では、厳密解との差が顕著であるが、本計算手法で用いた自己エネルギーを用いると、厳密解との差は数値計算の有効数字の範囲内である。この方法は、QZ法を用いる必要がないだけでなく、並列計算に有利な櫻井-杉浦法を活用できるため、さらなる高速化が期待できる。

【2】SiC-MOSFET 開発における界面電子状態シミュレーション

代表的な SiC-MOS 界面に用いられる SiC(0001)面は、4 回周期で SiC 原子層が積層し、h(hexagonal)面と k(cubic)面が交互に現れる。h 面の表面 3 原子層分は cubic 積層構造を持ち、k 面は hexagonal 積層構造が現れる。表面エネルギーは、h 面よりも k 面の方が低いため、表面では h 面が優位に現れることが実験的に確認されている。これに対し界面では、h 面と k 面がほぼ同じ割合で出現することが実験的に確認されている。本研究グループでは、開発した第一原理計算コード RSPACE を用いて、このような h 面、k 面と呼ばれる積層面に起因する 4H-SiC(0001)/SiO₂ 界面の電子状態の違いを調べた。SiC は、伝導帯端に floating states という特徴的な準位をもつ。この準位の波動関数は cubic 積層の領域に分布し、原子周りではなく Si に囲まれた四面体構造の内部に局在する。

電子状態計算の結果、図2に示すように h 面では界面第一層から floating states が現れるのに対し、k 面では界面第二層から floating states が現れることが分かった。これは、k 面では界面第二層より cubic 積層構造が始まることから説明できる。次に、熱酸化により導入される O 原子を、界面の SiC 結合の間に挿入した。図3に示すように、h 面では界面伝導帯端の floating states のエネルギーが増加し、界面での禁制帯幅が広がるのに対し、k 面では界面の禁制帯幅に変化がないことが分かった。結晶中の floating

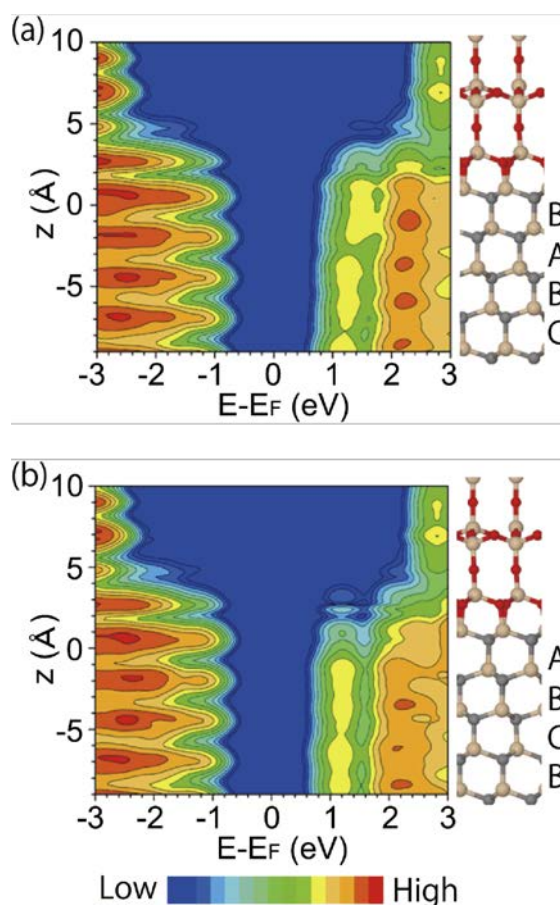


図2 酸素導入前の局所状態密度。(a) h 面。(b) k 面。文献[3]より。

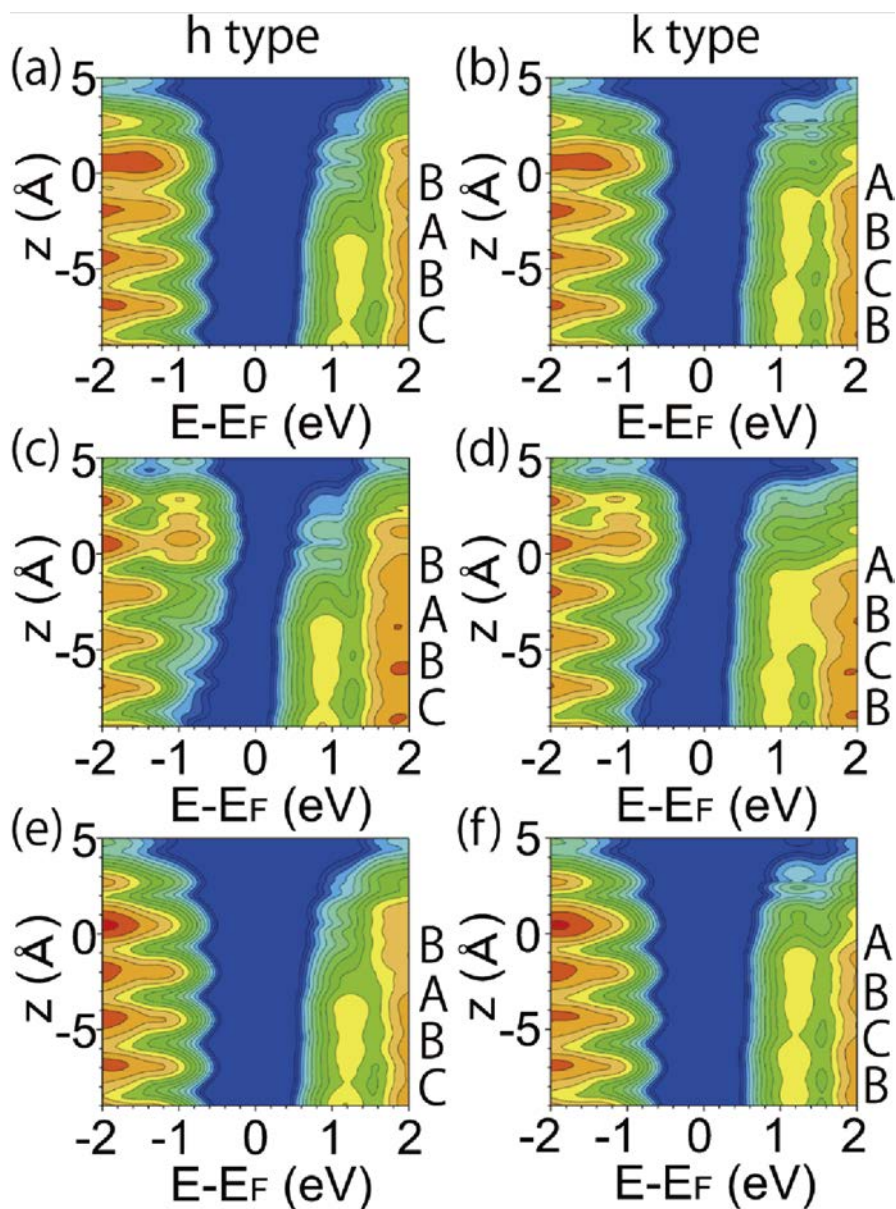


図3 酸素導入後の局所状態密度。(a), (b) O原子1個。(c), (d) O原子2個。(e), (f) O原子3個挿入後にCO分子を放出。文献[3]より。

states は、C よりも Si の方が電気陰性度の低いので、静電ポテンシャルが低い Si に囲まれた四面体構造内部に局在する。h 面では、電気陰性度の大きい O 原子が挿入されることにより、四面体構造内部の静電ポテンシャルが上昇することで禁制帯幅が広がる。一方、k 面は界面部に floating states が現れないため、禁制帯幅の変化が小さいと説明できる。

この結果は、n チャネル SiC-MOSFET によく使われる SiC(0001)面の電子移動度を制限するメカニズムの一つであると予想される。移動度を向上させるには floating states の影響を軽減させるか、(0001)面以外の結晶面で MOS 界面を作成する必要がある

る。現時点で、前者の方法は実現困難であるため、(0001)面と違う結晶面を用いた界面の評価を、筑波大パワエレ研・産総研の実験グループと協力して進めている。

4. 受賞、外部資金、知的財産権等

1. 科学技術振興機構、戦略的創造研究推進事業・さきがけ、小野倫也、代表、2013年度～2016年度、「計算科学的手法による省電力・低損失デバイス用界面のデザイン」
2. 東京大学、委託研究、小野倫也、代表、2012年度～2015年度、「実空間手法に基づくナノ構造の電子・スピン輸送特性計算コードの開発」
3. 科学技術振興機構、先導的物質変換領域、小野倫也、分担、2012年度～2016年度、「二酸化炭素活性化機構の学理に基づくメタノール室温合成触媒の創成」
4. 文部科学省、ポスト「京」で重点的に取り組むべき社会的・科学的課題に関するアプリケーション開発・研究開発、小野倫也、分担、2014年度～2018年度、「次世代の産業を支える新機能デバイス・高性能材料の創成」

5. 研究業績

(1) 研究論文

(査読論文)

1. S. Iwase, T. Hoshi, T. Ono, "Numerical solver for first-principles transport calculation based on real-space finite-difference method", Phys. Rev. E 91, 063305 (2015).
2. Y. Egami, S. Iwase, S. Tsukamoto, T. Ono, K. Hirose, "First-principles calculation method for electron transport based on the grid Lippmann-Schwinger equation", Phys. Rev. E 92, 033301 (2015).
3. C. J. Kirkham, T. Ono, "First-principles study on interlayer states at the 4H-SiC/SiO₂ interface and the effect of oxygen-related defects", J. Phys. Soc. Jpn. 85, 024701 (2016).
4. T. Ono, S. Tsukamoto, "Real-space method for first-principles electron transport calculations: Self-energy terms of electrodes for large systems", Phys. Rev. B 93, 045421 (2016).
5. C. J. Kirkham, T. Ono, "Importance of SiC Stacking to Interlayer States at the SiC/SiO₂ Interface", Mater. Sci. Forum 858 457 (2016).

(2) 国際会議発表

(招待講演)

1. T. Ono, "First-Principles Calculations using Real-Space Finite-Difference Method", Advances in Modeling of Nano Materials, June 14-16, 2015, Hefei, China.

2. T. Ono, C. J. Kirkham, "Ab initio investigations for interface electronic structures of SiC-MOS", International Workshop on Dielectric Thin Films for Future Electron Devices – Science and Technology –, November 2-4, 2015, Tokyo, Japan.
3. T. Ono, "Density functional theory calculation for transport property of carbon nanostructures", EMN Meeting on Carbon Nanostructures, March 27-31, Honolulu, USA.

(一般講演)

1. S. Iwase, T. Ono, "Efficient solver of the Green's function method for electronic transport calculations", Psi-k Conference 2015, September 6-10, 2015, San Sabastian, Spain.
2. T. Ono, "Transport calculation method using real-space finite-difference Green's function scheme, Psi-k Conference 2015, September 6-10, 2015, San Sabastian, Spain.
3. T. Ono, C. J. Kirkham, "First-principles electronic-structure calculation for defect at SiC(0001)/SiO₂ interface", 16th International Conference on Silicon Carbide and Related Materials, October 4-9, 2015, Sicily, Italy.
4. T. Ono, C. J. Kirkham, S. Iwase, "Electronic structure and scattering property of 4H-SiC(0001)/SiO₂ interface", APS March Meeting 2016, March 14-18, 2016, Baltimore, USA.

(3) 国内学会・研究会発表

(招待講演)

1. 小野倫也, "SiC 酸化過程と MOS 界面電子状態の第一原理シミュレーション", 応用物理学会先進パワー半導体分科会 第 1 回個別討論会 「SiC 酸化メカニズムと界面欠陥」, 2015 年 8 月 4 日, 東京.
2. 小野倫也, "第一原理計算による SiC/SiO₂ 界面の電子状態とキャリア輸送特性解析", 2015 年度大阪大学産業科学研究所共同研究会, 2016 年 1 月 8 日～9 日, 岐阜.

(一般講演)

1. 小野倫也, "実空間差分法を用いた第一原理輸送特性計算：自己エネルギー項計算の高速化", 日本物理学会第 71 回年次大会, 2016 年 3 月 19-22 日, 東北学院大学.

(4) 著書、解説記事等

1. T. Ono, "First-principles Study on Transport Property of Nanostructures Using Real-space Finite-difference Method, Simulation", 34, 18 (2015).
2. T. Ono, S. Saito, S. Iwase, "First-principles study on oxidation of Ge and its interface electronic structures", Jpn. J. Appl. Phys., accepted.
3. 小野倫也, 塚本茂, 江上喜幸, "実空間差分法を用いた第一原理電気伝導特性計算の高速化", アンサンブル 18, 82 (2016).