

## VII-3 表面界面物性グループ

### 1. メンバー

准教授	小野 倫也
D2	岩瀬 滋
M2	高木 謙介
B4	種崎 智貴
B4	中西 健太

### 2. 概要

実空間差分法に基づく第一原理電子状態・伝導特性計算コード RSPACE を開発している。コード開発に関しては、伝導特性計算の自己エネルギー計算部の高速化を行った。RSPACE を使ったアプリケーションでは、パワーデバイス用として期待されている SiC/SiO<sub>2</sub> 界面の原子構造の特定を、実験グループと協力して行った。

### 3. 研究成果

#### 【1】実空間差分法に基づく第一原理電気伝導・伝導特性計算コード RSPACE の開発

波動関数接合法を用いた電気伝導計算法では、現実的な時間内で電極の一般化ブロッホ波を計算することは困難である。そのため、進行波と緩やかに減衰もしくは増大するエバネッセント波のみを計算する方法が用いられるが、透過率の計算精度が低下することが報告されている。本年度は、連分数を用いた伝導計算に用いる自己エネルギーの計算方法の開発と連分数の物理的な意味づけ、ならびに進行波と緩やかに減衰もしくは増大するエバネッセント波のみ精度劣化を引き起こすことなく透過率を計算する方法の開発を行った。

#### 【2】SiC-MOSFET 開発における界面電子状態シミュレーション

SiC/SiO<sub>2</sub> 界面はパワーデバイス用途で期待されているものの、キャリア移動度が低いことが実用化に向けた課題となっている。原因解明のために界面原子構造・電子状態とキャリア散乱機構の解明が必要であるが、SiC/SiO<sub>2</sub> 界面は Si/SiO<sub>2</sub> 界面よりも実験・計算データが少なく、原子構造の解明にも至っていない。本年度は、走査型透過電子顕微鏡(STEM)像を援用し、第一原理電子状態・伝導特性計算のモデルに用いる界面原子構造の探索を行った。まず、図 1(a)に示す実験で得られた STEM 像より、界面における

原子層間隔を測定した。実験で得られたデータを用いて、界面における原子面の間隔を調べた。次に、候補となる  $\text{SiO}_2$  の結晶多形の中から、 $\text{SiC}(0001)$  面に格子定数が概ね一致するものを選び出し、STEM 像との格子間隔の一致、界面の形成エネルギーを比較し、図 1(b) に示す原子構造を得た。STEM より、図 1(a) の D-D' 部と E-E' 部は原子構造が異なることが分かっている。これはそれぞれ図 1(b) の左側、右側に対応するものと考

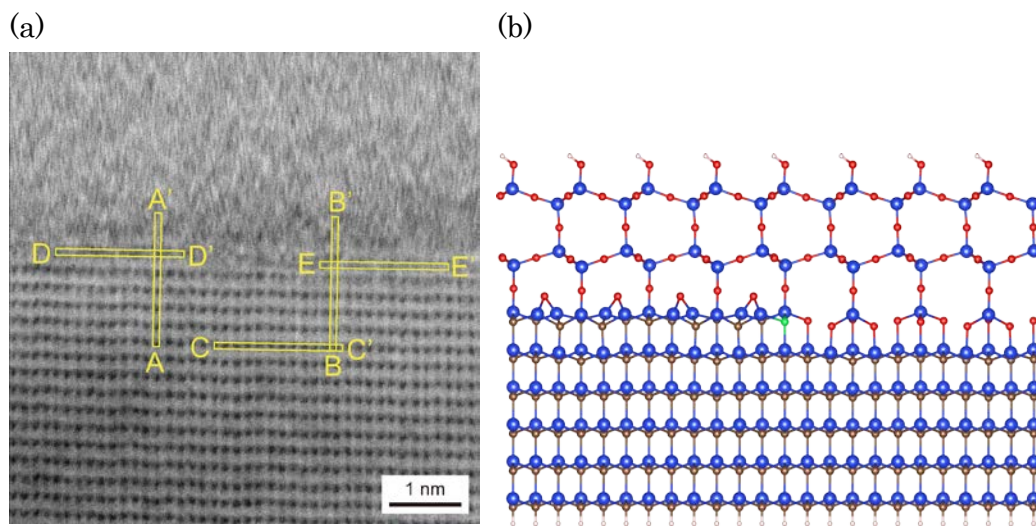


図 1 SiC/SiO<sub>2</sub> 界面の STEM 像(a)と第一原理計算により得られた界面原子構造(b)。青球は Si 原子、茶球は C 原子、赤球は O 原子、緑球は N 原子、白球は H 原子である。

えられる。平成 30 年度は、この原子構造を用いて界面のキャリア移動特性評価を行う。

#### 4. 受賞、外部資金、知的財産権等

1. 科学技術振興機構、先導的物質変換領域、小野倫也、分担、2012 年度より継続、0 円、「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」
2. 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、2017 年度 0 円、「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」
3. 日本学術振興会、基盤研究(B)：小野倫也、代表、2017 年、2000 千円、「大規模第一原理スピン輸送シミュレーターの開発と革新的デバイス用界面構造の設計」
4. 民間企業、共同研究：小野倫也、代表、2017 年、900 千円

#### 5. 研究業績

(1) 研究論文

A) 査読付き論文

1. T. Ono, C. J. Kirkham, S. Saito, Y. Oshima, "Theoretical and experimental investigation of the atomic and electronic structures at the 4H-SiC(0001)/SiO<sub>2</sub> interface", Phys. Rev. B 96 115311 (2017).
2. S. Sato, S. Iwase, K. Namba, T. Ono, K. Hara, A. Fukuoka, K. Uosaki, K. Ikeda, "Electrical Matching at Metal/Molecule Contacts for Efficient Heterogeneous Charge Transfer", ACS Nano 12 1228-1235 (2018).
3. S. Tsukamoto, T. Ono, S. Bluegel, "Improvement of accuracy in the wavefunction-matching method for transport calculations", Phys. Rev. B 97 115450 (2018).

(2) 国際会議発表

A) 招待講演

1. T. Ono, "Density functional theory calculation for interface electronic structure of SiC power electronic devices", EMN Meeting on Quantum, (June 18-21, 2017, Vienna, Austria).
2. T. Ono, "DFT calculation for electronic structure and carrier scattering property at SiC-MOS interface", European Advanced Energy Materials Congress, (March 25-28, 2018, Stockholm, Sweden).

B) 一般講演

1. T. Ono, C. J. Kirkham, S. Iwase, "First-principles study on carrier scattering property at 4H-SiC(0001)/SiO<sub>2</sub>", 2016 International Conference on Solid State Devices and Materials, September 26-29, 2016, Tsukuba, Japan.
2. T. Ono, C. J. Kirkham, "First-principles study on atomic and electronic structures of 4HSiC(0001)/SiO<sub>2</sub> interface", APS March Meeting 2017, March 13-17, 2017, New Orleans, USA.

(3) 国内学会・研究会発表

A) 招待講演

1. 小野倫也, "第一原理計算と高速計算機を用いた材料探索・デバイス設計", 情報機構セミナー, (2017年6月13日, 東京).
2. 小野倫也, "第一原理計算によるデバイス用界面の電子状態とキャリア伝導解析", 日本物理学会 2017年秋季大会, (2017年9月21日~24日, 岩手).

B) その他の発表

1. T. Ono, S. Tsukamoto, "Improvement of accuracy of wave-function-matching technique for first-principles electron-transport calculation", APS March Meeting 2018, (March 5-9, 2018, Los Angeles, USA).
2. S. Iwase, Y. Futamura, A. Imakura, T. Sakurai, T. Ono, "Efficient and Scalable Calculation of Complex Band Structure Using Sakurai-Sugiura Method", International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis (SC17), (November 12-17, 2017, Denver, USA).
3. 小野倫也, 第一原理計算による窒化処理後の SiC/SiO<sub>2</sub> 界面構造探索, 応用物理学会秋季学術講演会, (2017年9月5日～8日, 福岡).
4. 高木謙介, 小野倫也, HfO<sub>2</sub>/SiO<sub>2</sub> 界面における酸素空孔欠陥が及ぼすリーク電流の第一原理計算, 応用物理学会秋季学術講演会, (2017年9月5日～8日, 福岡).
5. 岩瀬滋, 二村保徳, 今倉暁, 櫻井鉄也, 塚本茂, 小野倫也, 周回積分法を用いた電極の自己エネルギーの計算方法の提案と第一原理伝導計算への応用, 日本物理学会 第73回年次大会, (2018年3月22日～25日, 千葉).