平成22年計算科学研究センター部門紹介

量子物性部門

筑波大学　計算科学研究センター
白石賢二

構成員
白石賢二、日野健一、岡田晋、
Tong Xiao-Min、前島展也、岩田潤一、
（矢花一浩）

量子物性部門の主な研究テーマ

量子物性部門のミッション

２１世紀の産業革命の基礎となる科学的知見を我々量子物性部門発で創成する。

具体的テーマ

- ナノ新物質・ナノ新構造体の新しい物理現象を設計・予言し、将来のナノ科学・ナノ技術の基礎を形成する。

  （岡田、小泉、岩田、（白石））
- 空間軸としてナノメートル領域の科学を構築すると同時に時間軸でピコ・フェムト秒領域の科学を構築し、21世紀の物性科学・デバイス概念に必要不可欠な「ナノメートル・ピコ・フェムト秒領域の物理概念」の創成を行う。

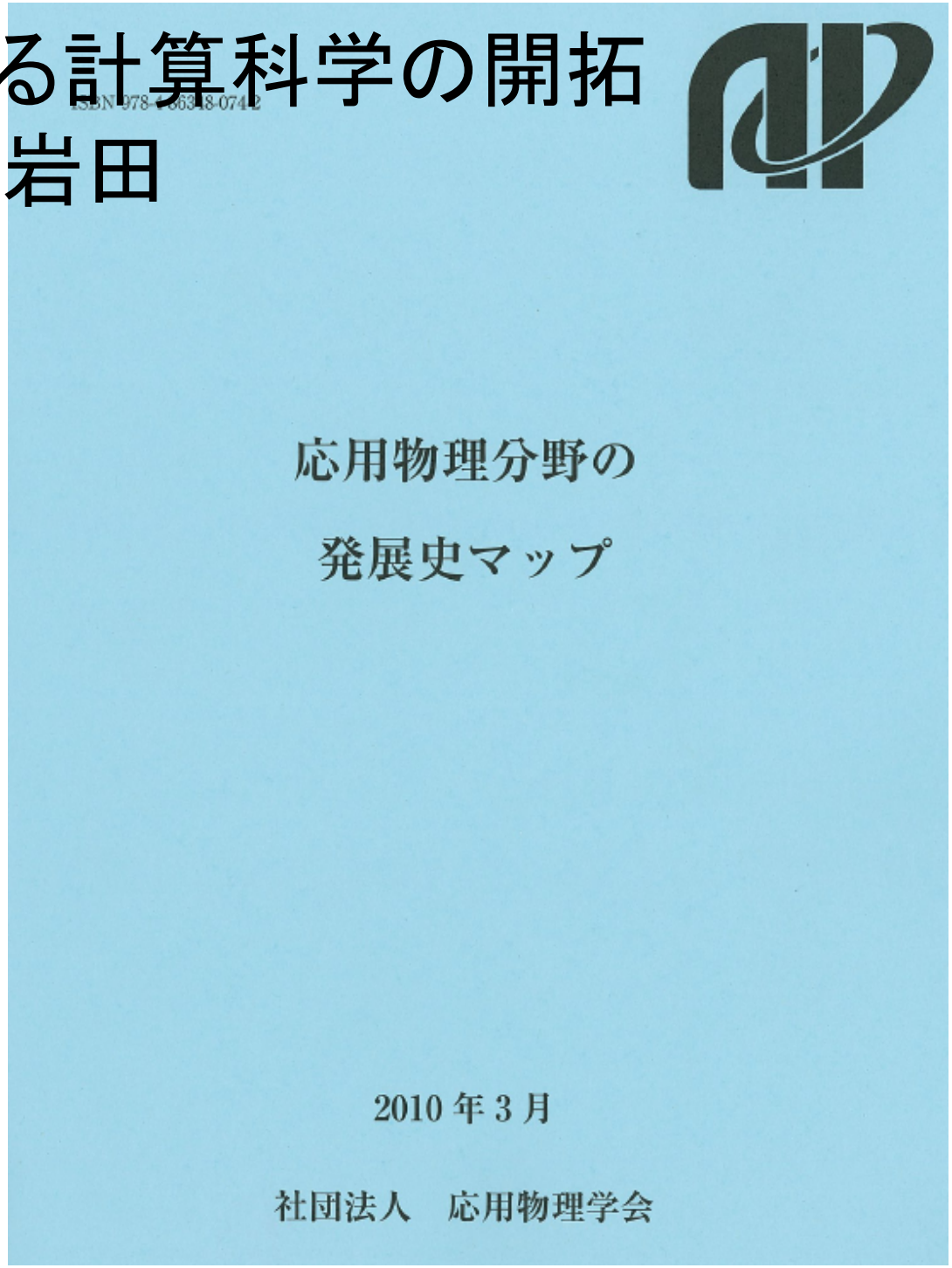
  （白石、日野、Tong、前島、（矢花））

量子物性部門のこれまでの成果

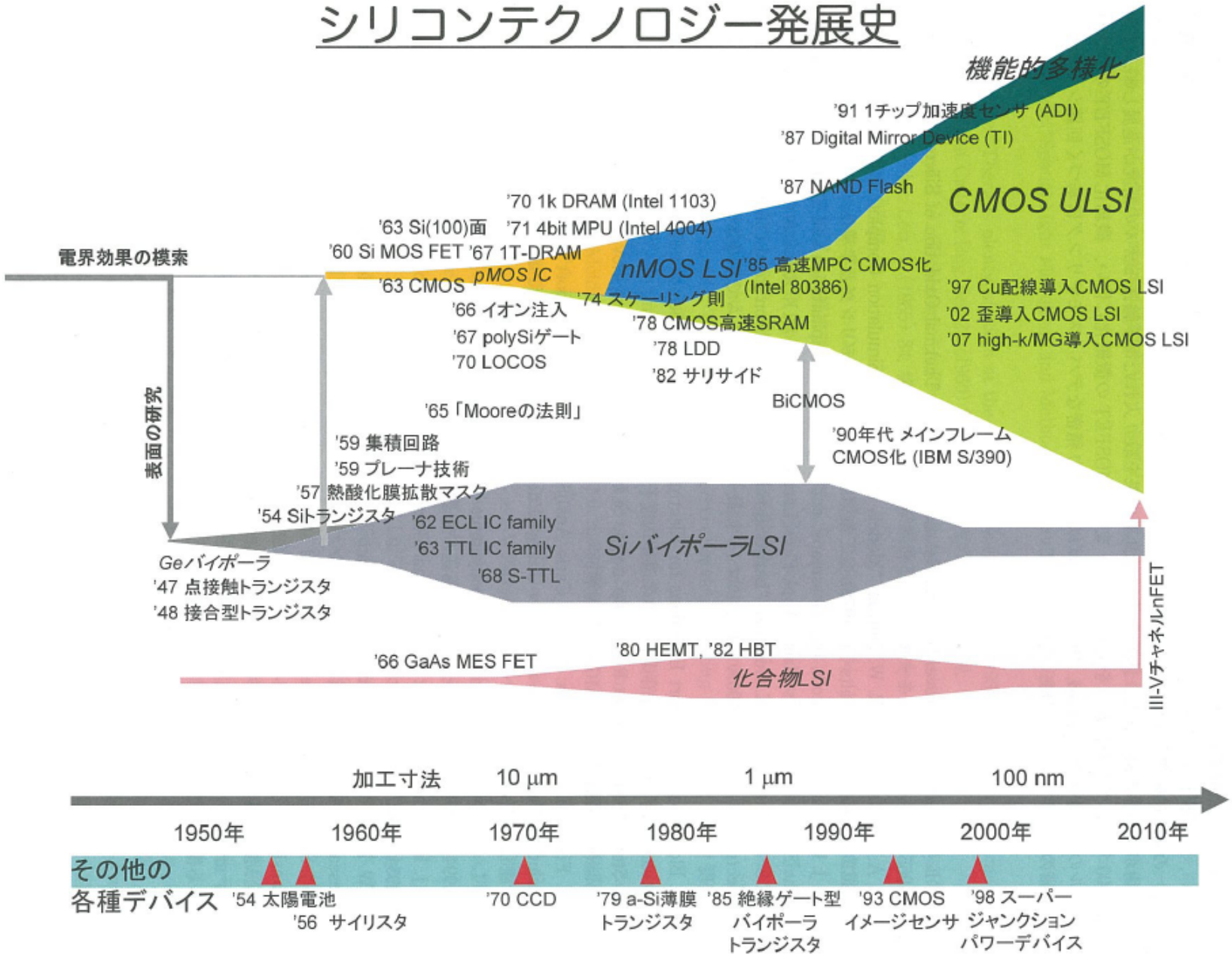
- 産業界に第一原理計算の威力を認めさせ、大規模第一原理計算への期待を高めた。（白石、岩田）
- ナノ新物質・ナノ新材料の物性予言を世界に先駆けて行った。(岡田、小泉)
- 光誘起の量子ダイナミクスと量子制御による物性予言を世界に先駆けて行った。(日野、トン、前島)

成果1：産業を支える計算科学の開拓
白石、岩田

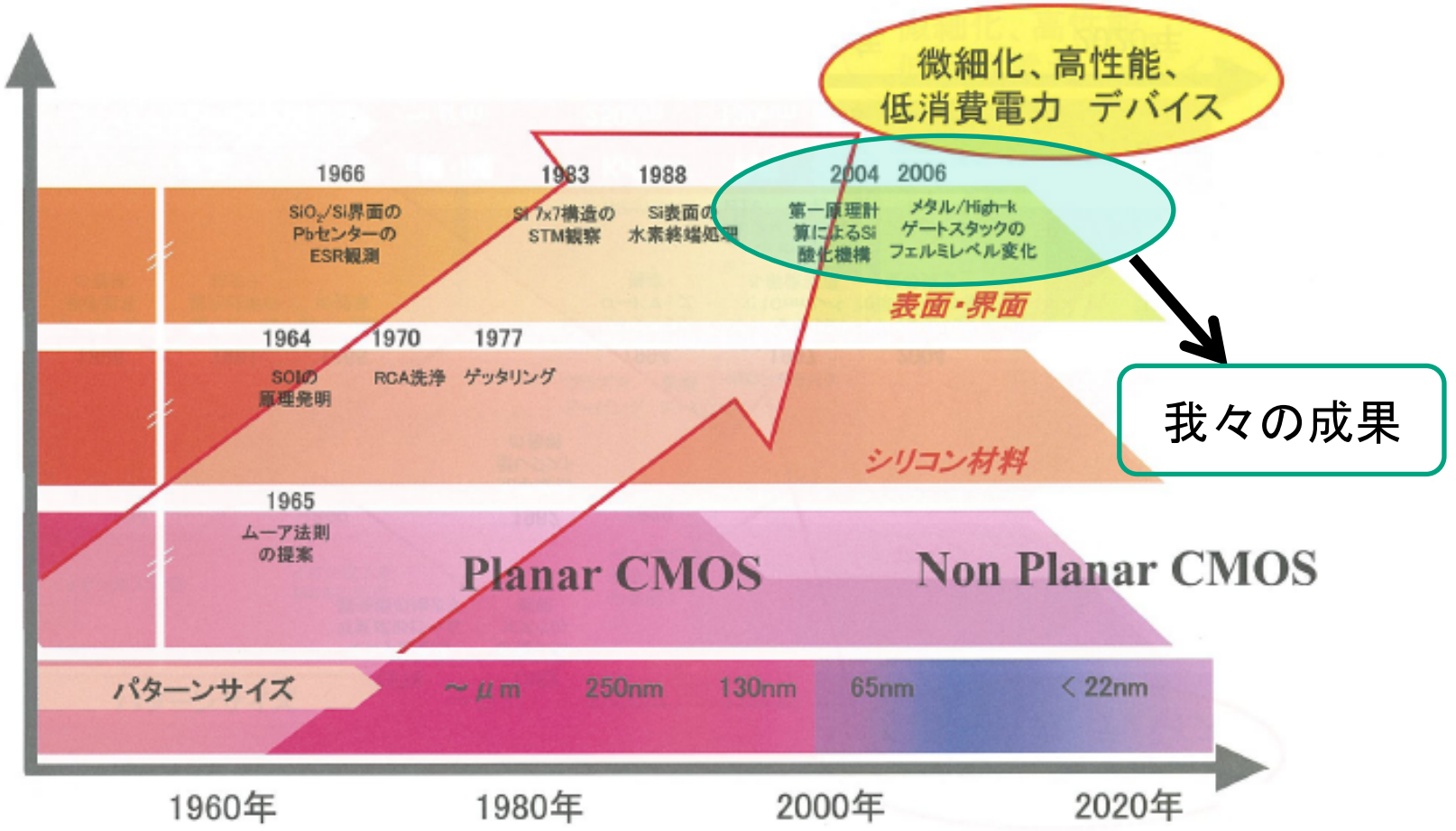
産業を支える物理学（計算科学）を目指し、デバイスの微細化とあいまって、大きな成功をおさめた。



シリコンテクノロジー発展史



1－2－1. 表面・界面・シリコン材料技術の発展史



2009年度　シリコンテクノロジー分科会 表面・界面・シリコン材料研究委員会

1－2．シリコン技術史各論

以降の項では，今日のシリコン技術を牽引するコア技術について，シリコンテクノロジ分科会の関連研究委員会で作成したサブマップを紹介する．

1－2－1．表面・界面・シリコン材料技術

微細化を追求するプレーナ型 MOSFET の開発とともに，1960 年代からシリコンの表面・界面・材料の研究は進展し続けてきた．すなわち SiO_2/Si MOS 界面の界面準位である Pb センターの Electron Spin Resonance（ESR）による観察[30]や，高品質の SiO_2/Si MOS 界面を形成するための熱酸化前のシリコン基板清浄化法[31]や，素子の劣化の原因となる重金属を酸素析出欠陥などウエーハの結晶特性を使って排除するイントリンシック・ゲッタリングの研究[32]など，パターンサイズがミクロンレベルの CMOS の工業生産を支える主要な技術に関する本質的な研究は 1960 年代から 1970 代になされた．また，バルクシリコンプロセスの微細化原理であるムーアの法則の提案の前に，次世代のプロセスとして Silicon on Insulator（SOI）プロセスの研究[33]もすでに 1964 年に始まっていた．微細化がさらに進みパターンサイズがサブミクロンレベルになった 1980 年代に入ってからは，走査型トンネル電子顕微鏡（STM）に代表される各種表面物理測定手法の高度化，ならびに水素終端処理技術などの試料処理技術の高度化により，シリコン表面・界面・材料の研究は，いっそうミクロで精緻なものとなった[34, 35]．このように実験で可能となったミクロな観察・制御技術を理解するために，2000 年代に入ると，第一原理計算手法が取り入れられて，研究に大きく貢献するようになってきた[36]．長年の研究課題であったシリコンの酸化機構や，CMOS プロセスに新たに取り入れられたメタル／high-k ゲートスタック構造のフェルミレベル位置などについてのミクロなモデルが，第一原理計算を用いて提案された[37]．

今後は，45 nm を超すさらなる微細化とともに，高性能化，低消費電力化が強く追求されて行くことになり，新しい材料の導入ばかりでなく非プレーナ型 MOSFET の開発も進むであろう．そこでは，例えば次のような研究が必要となるものと予想される．Ⅰ）マトリクス中の原子・分子に対する高分解能かつ高感度の 3 次元複合分析技術に関する研究，Ⅱ）無機／有機／生体を含むヘテロ系の成長・反応ダイナミクスや，宇宙から降り注ぐ放射線などの外乱の影響のモデル化に関する研究，Ⅲ）大規模第一原理計算，長時間分子動力学計算ならびに量子輸送計算を統一した，ミクロからマクロへのシームレスな設計・検証に関する研究，Ⅳ）揺らぎや自己組織化などの物理的限界に挑戦する研究．このように，プレーナプロセスの開発では必要がなかった新たな観点の，表面・界面・シリコン材料研究が必要となろう．

[30] Y. Nishi: "Electron Spin Resonance in SiO_2 Grown on Silicon", Jpn. J. Appl. Phys. 5 (1966) 333. SiO_2/Si 界面の Pb センターを ESR により観測

[31] W. Kern: "Cleaning Solutions Based on Hydrogen for Use in Silicon Semiconductor Technology", RCA Rev. 31 (1970) 187. 良質な SiO_2/Si 界面を形成するための Si 基板表面清浄化法（RCA 洗浄）の確立

[32] T. Y. Tan, E. E. Gardner, and W. K. Tice: "Intrinsic Gettering by Oxide Precipitate Induced Dislocations in Czochralski Si", Appl. Phys. Lett. 30 (1977) 175. 真性ゲッタリングのメカニズムの詳細検討

[33] H. M. Manasevit, and W. I. Simpson: "Single-Crystal Silicon on a Sapphire Substrate", J. Appl. Phys. 35 (1964) 1349. サファイアー基板上へ単結晶シリコンをエピタキシャル成長することに成功（SOI の原理発明）

[34] G. Binnig, H. Rohrer, Ch. Gerber, and E. Weibel: "7x7 Reconstruction on Si (111) Resolved in Real Space", Phys. Rev. Lett. 50 (1983) 120. Si (111) 7x7 表面超構造の原子像を STM により観察

[35] T. Takahagi, I. Nagai, A. Ishitani, H. Kuroda, and Y. Nagasawa: "The Formation of Hydrogen Passivated Silicon Single-Crystal Surfaces Using Ultraviolet Cleaning and HF Etching", J. Appl. Phys. 64 (1988) 3516. 清浄な水素終端 Si (100) 表面を得るためのウエット処理法の開発

[36] H. Kageshima, M. Uematsu, K. Akagi, S. Tsuneyuki, T. Akiyama, and K. Shiraishi: "Theoretical Study of Excess Si Emitted from Si-Oxide/Si Interfaces", Jpn. J. Appl. Phys. 43 (2004) 8223. 第一原理計算による Si 酸化過程のミクロスコピックな描像の検討

[37] Y. Akasaka, G. Nakamura, K. Shiraishi, N. Umezawa, K. Yamabe, O. Ogawa, M. Lee, T. Amiaka, T. Kasuya, H. Watanabe, T. Chikyow, F. Ootuka, Y. Nara, and K. Nakamura: "Modified Oxygen Vacancy Induced Fermi Level Pinning Model Extendable to P-Metal Pinning", Jpn. J. Appl. Phys. 45 (2006) L1289. メタル／high-k ゲートスタックのフェルミレベル位置に関するモデルの検討

シリコンテクノロジー発展史を理解するための必読論文として推奨された論文

なった[34], [35]. このように実験で可能となったミクロな観察・制御技術を理解するために，2000年代に入ると，第一原理計算手法が取り入れられて，研究に大きく貢献するようになってきた[36]. 長年の研究課題であったシリコンの酸化機構や，CMOSプロセスに新たに取り入れられたメタル／high-kゲートスタック構造のフェルミレベル位置などについてのミクロなモデルが，第一原理計算を用いて提案された[37].

今後は，45 nmを超すさらなる微細化とともに，高性能化，低消費電力化が強く追求されて行くことになり，新しい材料の導入ばかりでなく非プレーナ型MOSFETの開発も進むであろう．そこでは，例えば次のような研究が必要となるものと予想される．Ⅰ）マトリクス中の原子・分子に対する高分解能かつ高感度の3次元複合分析技術に関する研究，Ⅱ）無機／有機／生体を含むヘテロ系の成長・反応ダイナミクスや，宇宙から降り注ぐ放射線などの外乱の影響のモデル化に関する研究，Ⅲ）大規模第一原理計算，長時間分子動力学計算ならびに量子輸送計算を統一した，ミクロからマクロへのシームレスな設計・検証に関する研究，Ⅳ）揺らぎや自己組織化などの物理的限界に挑戦する研究．このように，プレーナプロセスの開発では必要がなかった新たな観点の，表面・界面・シリコン材料研究が必要となろう．

[34] G. Binnig, H. Rohrer, Ch. Gerber, and E. Weibel: "7x7 Reconstruction on Si (111) Resolved in Real Space", Phys. Rev. Lett. 50 (1983) 120. Si (111) 7x7 表面超構造の原子像をSTMにより観察

[35] T. Takahagi, I. Nagai, A. Ishitani, H. Kuroda, and Y. Nagasawa: "The Formation of Hydrogen Passivated Silicon Single-Crystal Surfaces Using Ultraviolet Cleaning and HF Etching", J. Appl. Phys. 64 (1988) 3516. 清浄な水素終端Si (100) 表面を得るためのウエット処理法の開発

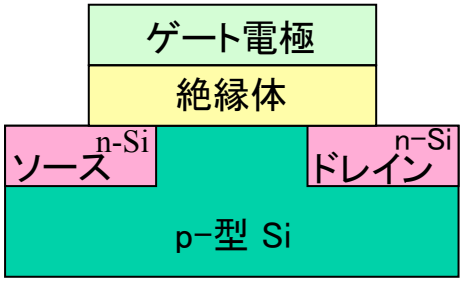
[36] H. Kageshima, M. Uematsu, K. Akagi, S. Tsuneyuki, T. Akiyama, and K. Shiraishi: "Theoretical Study of Excess Si Emitted from Si-Oxide/Si Interfaces", Jpn. J. Appl. Phys. 43 (2004) 8223. 第一原理計算によるSi酸化過程のミクロスコピックな描像の検討

[37] Y. Akasaka, G. Nakamura, K. Shiraishi, N. Umezawa, K. Yamabe, O. Ogawa, M. Lee, T. Amiaka, T. Kasuya, H. Watanabe, T. Chikyow, F. Ootuka, Y. Nara, and K. Nakamura: "Modified Oxygen Vacancy Induced Fermi Level Pinning Model Extendable to P-Metal Pinning", Jpn. J. Appl. Phys. 45 (2006) L1289. メタル／high-kゲートスタックのフェルミレベル位置に関するモデルの検討

主要産業シリコンテクノロジーを計算科学で先導することに我々で成功。

具体例： シリコンナノワイヤFETの電子状態解析

従来型（プレーナ型）FET（電界効果トランジスタ）

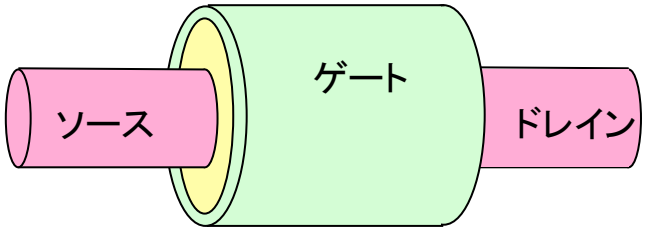


これまでLSIの高性能化・省電力化・高集積化はFET（電界効果トランジスタ）の微細化によって実現されていた

しかしながら微細化を押し進めるLSIの発展は2020～2030年に終焉を迎えると予想されている。

微細化に伴い漏れ電流増大 → LSIの消費電力の大きな部分

漏れ電流抑制のため新しい構造のトランジスタが模索されている。
中でもシリコンナノワイヤFETは究極の構造であると有力視されている。

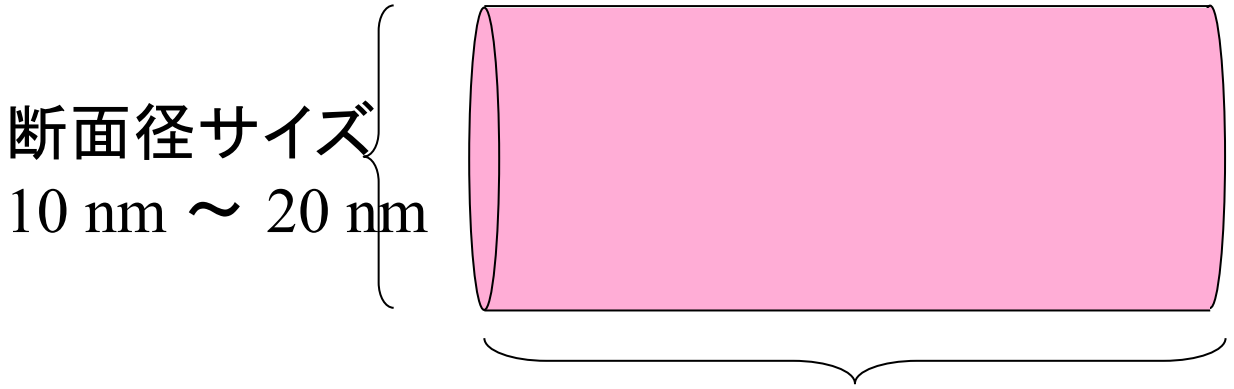


ナノ：量子力学に支配される世界

シリコンナノワイヤFETの解析・設計には量子力学的第一原理計算が不可欠

どの程度の大きさまで必要か？

シリコンナノワイヤ



モデル原子数

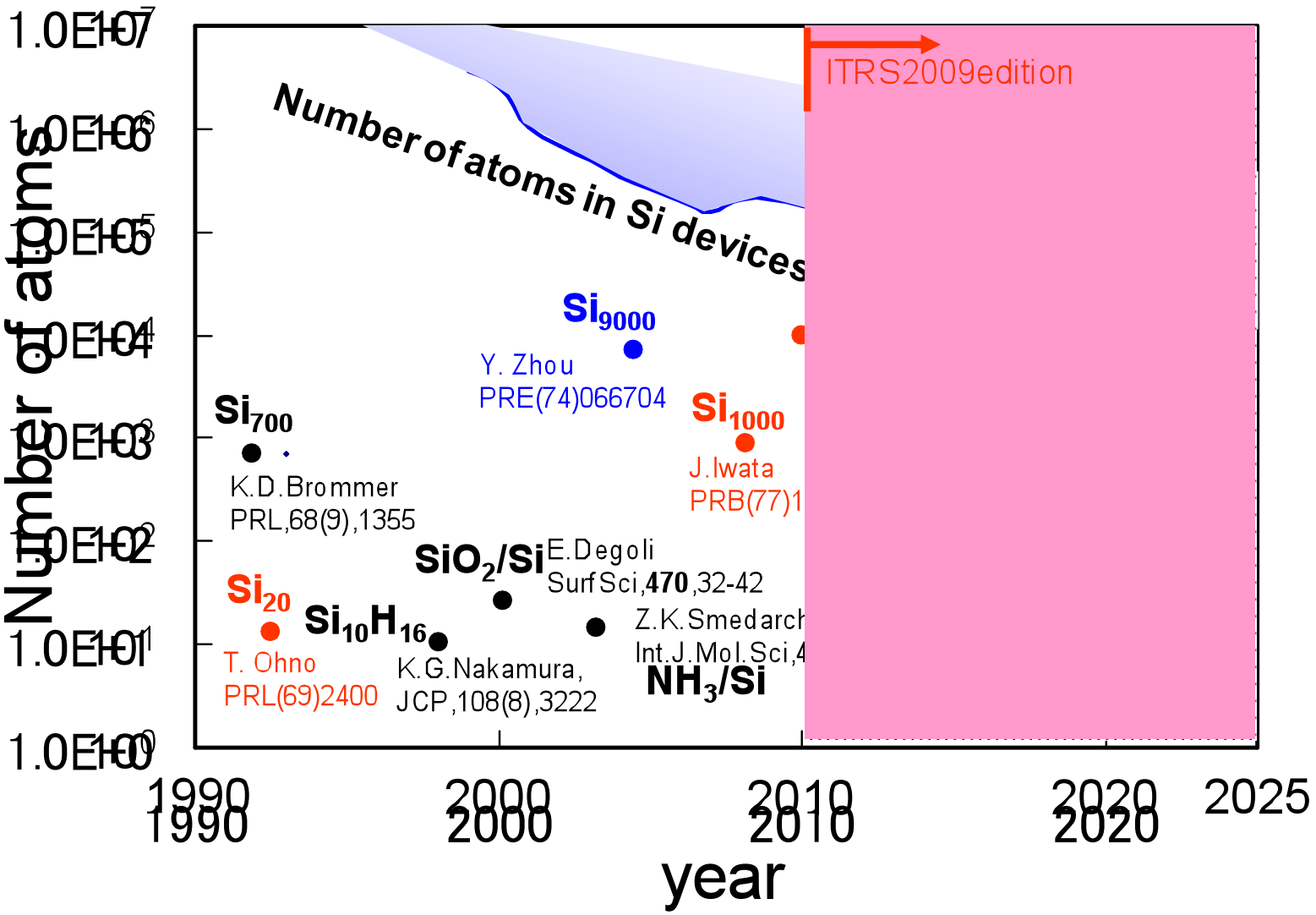
直径 10 nm ： 2,000原子 ～ 46,000原子

直径 20 nm ： 10.000原子 ～ 178,000原子

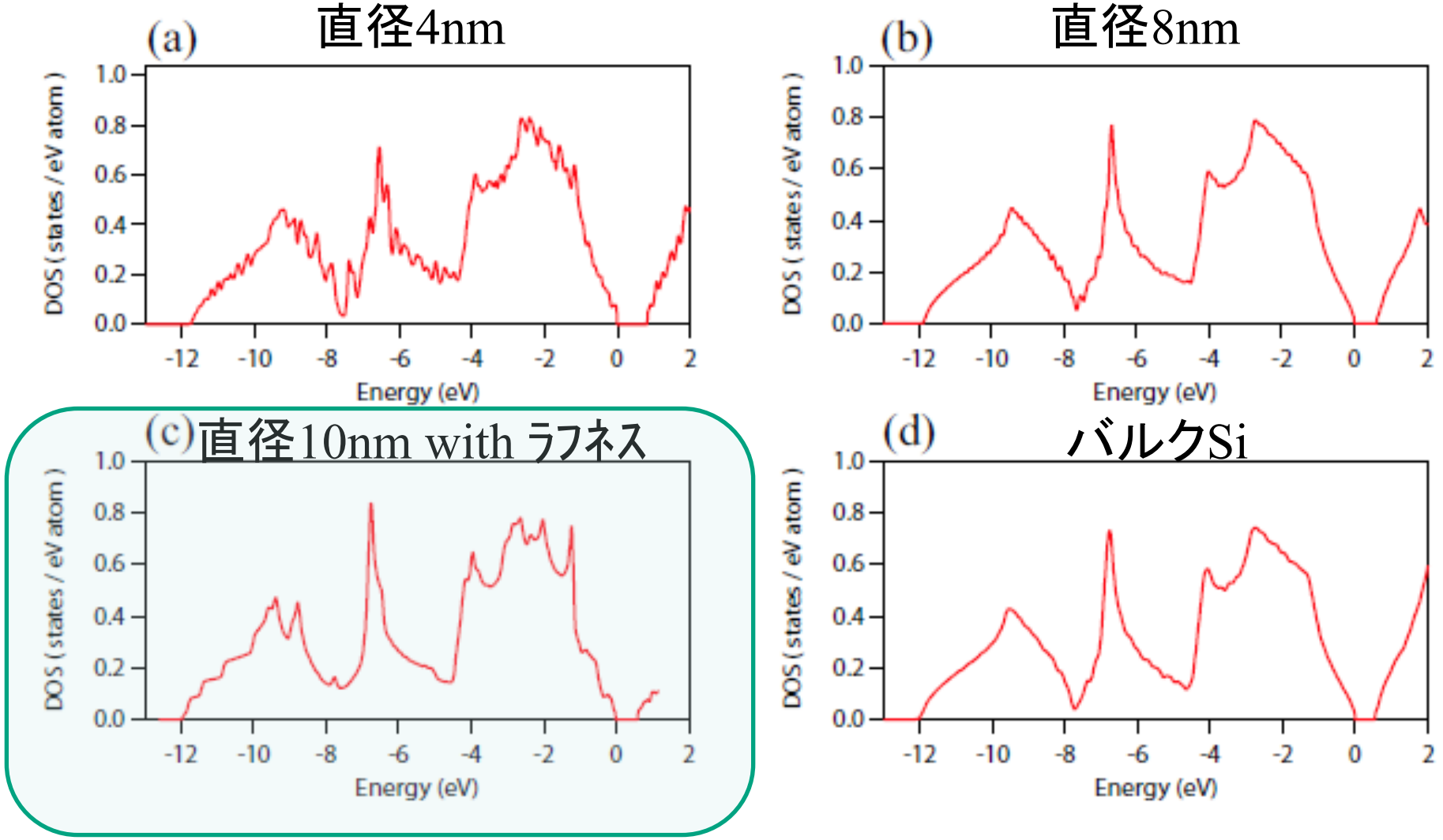
このサイズですら、これまで第一原理電子状態計算は不可能であった
今回我々はこれを可能にした。

さらに次世代スパコンができれば実デバイスサイズのシリコンナノワイヤほとんど全てをカバーできる

Siデバイス中の原子の数の変遷（SRAMを例に）

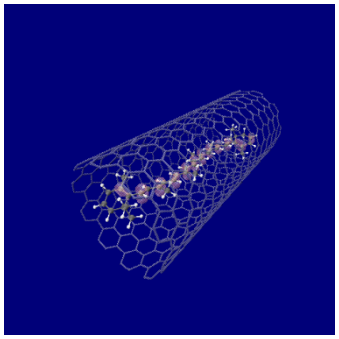


世界最大(14000原子計算)の第一原理電子状態計算で得られたシリコンナノワイヤの電子状態密度



Iwata et al. J. Comp. Phys. 2010

成果２：ナノ新物質・ナノ新材料の物性予言を世界に先駆けて行った。（岡田）



炭素ナノ構造物質：フラーレン, CNT, ピーポッド, 内包CNT

ピーポッド: Phys. Rev. Lett. **86,** 3835 (01):被引用227回
炭素ナノチューブ: Phys. Rev. Lett. 87, 127401 (01):被引用191回

岡田CREST「計算科学によるグラファイト系材料基礎物性解明とそのデバイス応用における設計指針の開発」へと展開

低次元ナノ構造物質：
折り畳みグラフェン

線形バンドのシフト

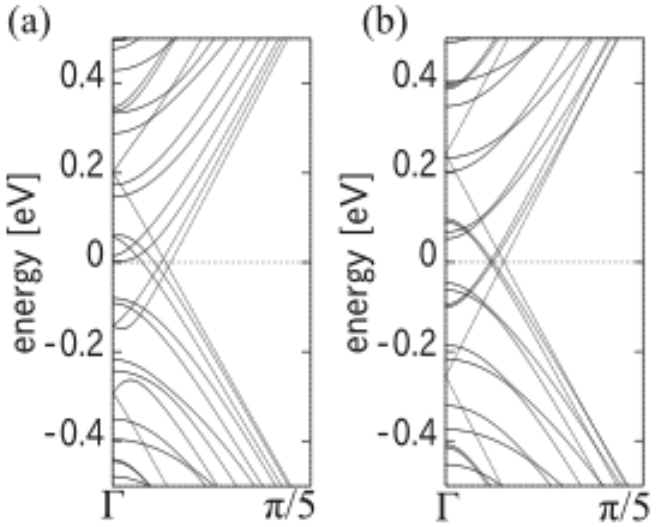
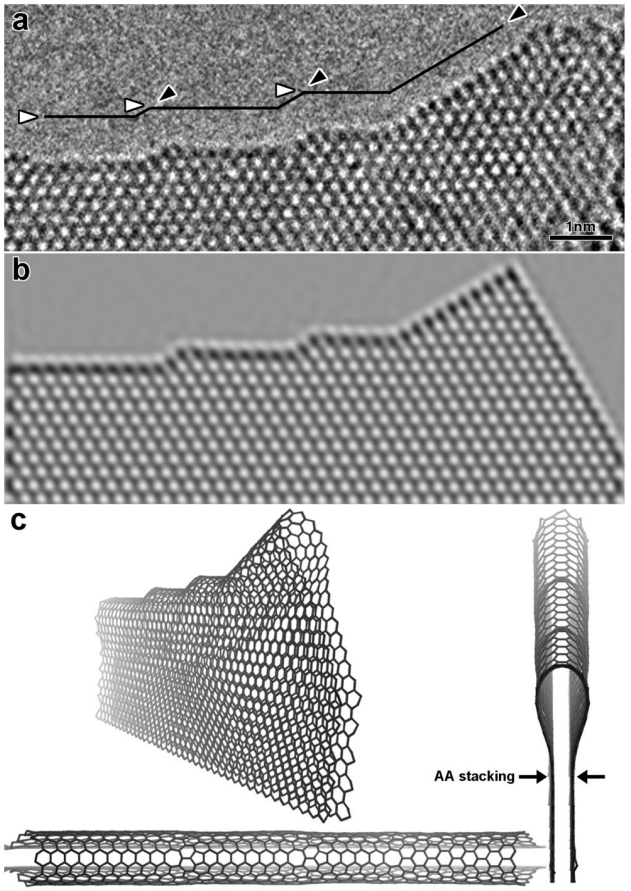


Fig. 2. Electronic structure of (a) folded graphene with armchair edges in an AA stacking arrangement and (b) bilayer graphene with armchair edges in AA stacking arrangements. Energies are measured from the Fermi level energy.

高木、岡田JPSJ (2010)



Z.Liu, K.Suenaga, P.J.F.Harris, and S. Iijima, PRL 102 (2009) 015501

成果３：光誘起の量子ダイナミクスと量子制御による物性予言（日野、Tong、前島）

（１）査読論文：１９編（PRA，PRB，PRL：８編、など）

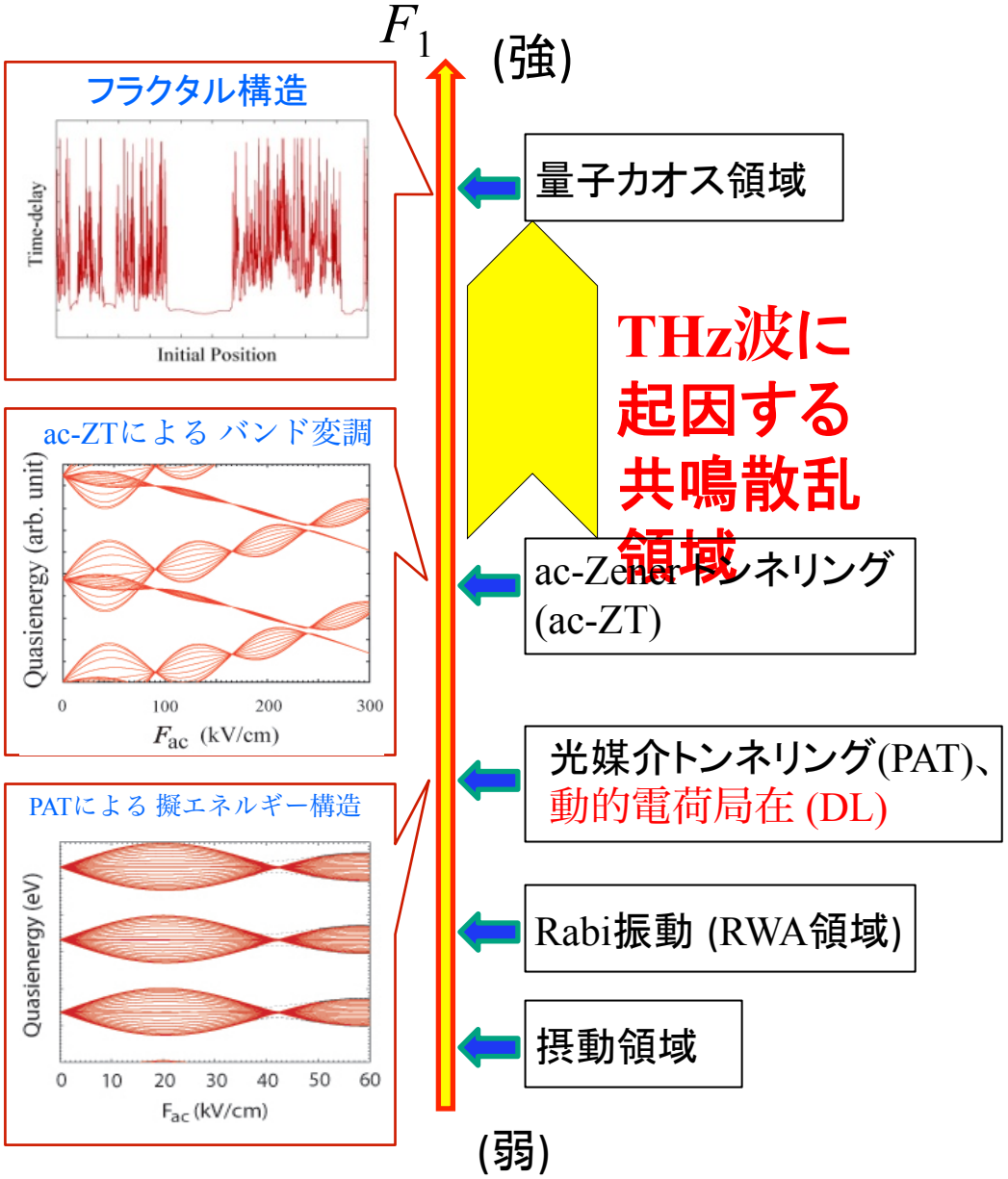
・K. Hino, X. M. Tong and N. Toshima,
"Interacting dynamic Wannier-Stark ladderdriven by a periodic pulse train",
Phys. Rev. B **77**, 045322 (2008).

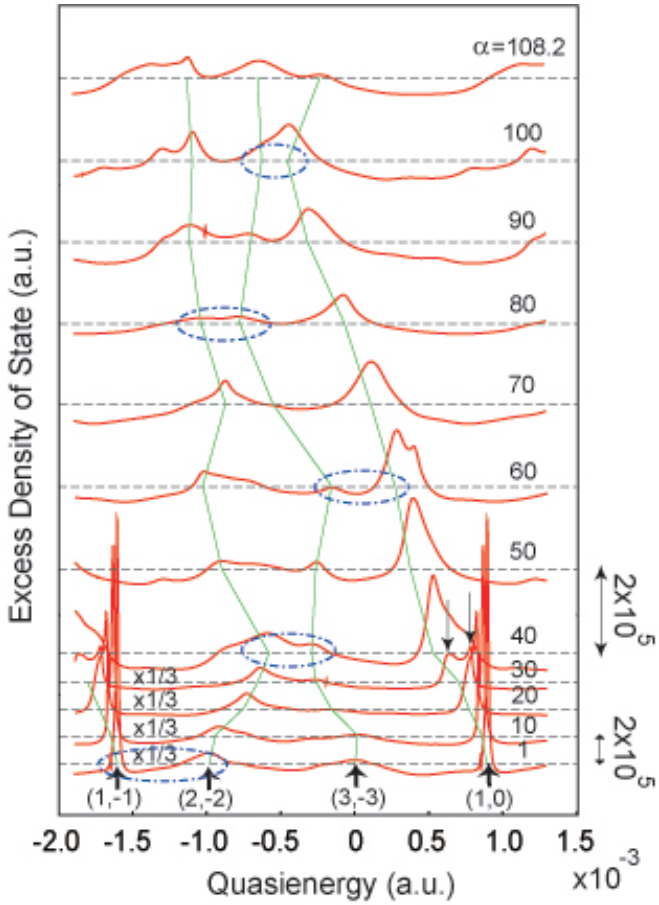
・K. Yonemitsu and N. Maeshima,
"Photoinduced melting of charge order in a quarter-filled electron systemcoupled with different types of phonons",
Phys. Rev. B **76**, 075105 (2007).

新学術領域研究「テラヘルツ光駆動半導体超格子における光着衣電子・正孔系の多体問題」　**研究代表：日野　健一**

へと展開

動的Wannier-Stark 階段(DWSL)における光着衣電子の挙動





[A. Kukuu, et al., Phys. Rev. B (submitted)]

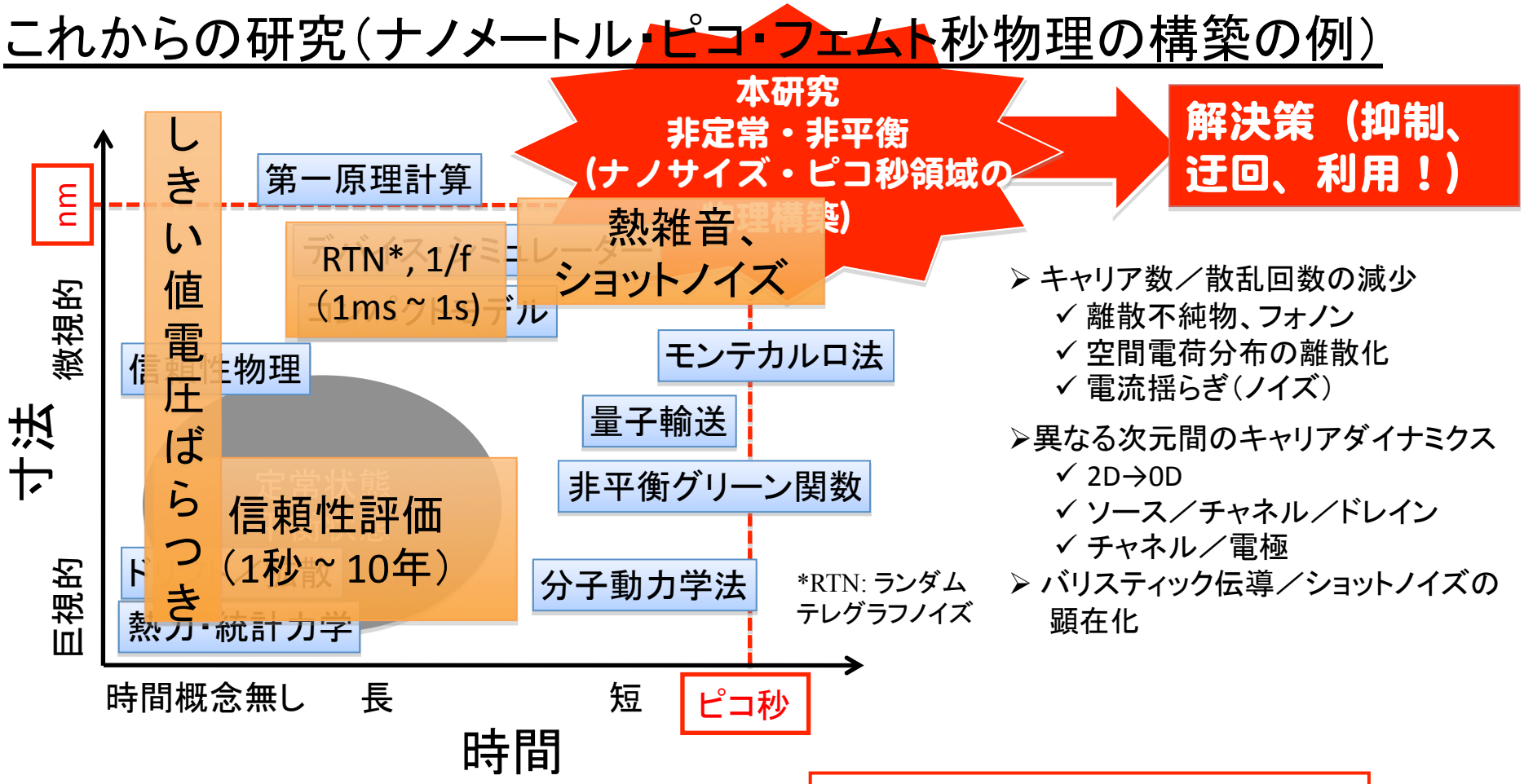
量子物性グループの今後の展開

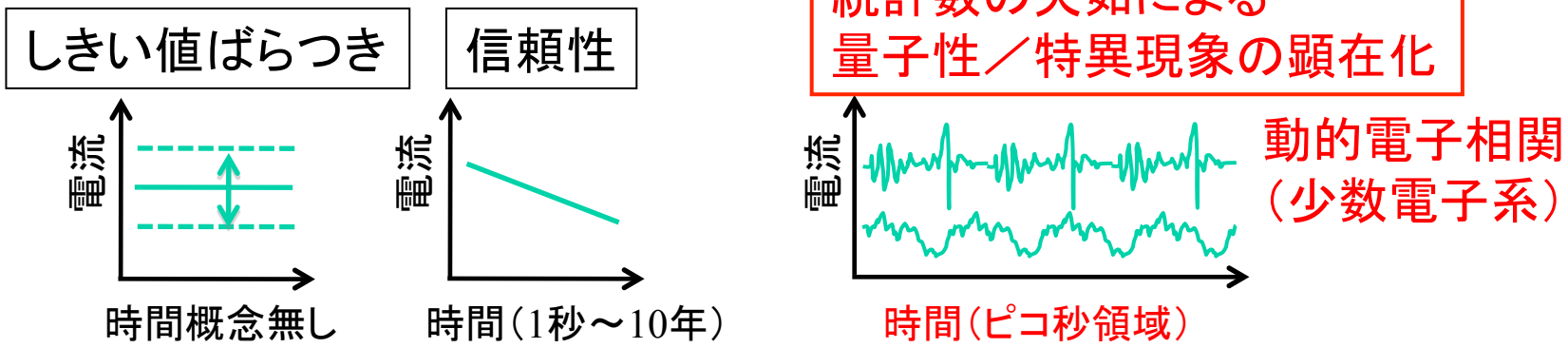
① 現実のデバイスの構成単位を対象とした大規模第一原理計算等を行い、デバイス特性まで予言する（岩田、白石）。次世代スパコンPJと連携。
（岩田、白石：CREST（代表押山）、NEDO（代表岩井（東工大））

② 次世代ナノデバイスにおいて顕著になることが予想されているナノ構造体中のピコ秒領域の電子ダイナミクスを動的・静的電子相関まで含めて計算科学を用いて明らかにし、新しい物理概念を構築すると同時に将来デバイスの原理構築を行う（白石、日野、Tong、前島）。
（白石：CREST（代表大毛利（早稲田）、日野、前島：新学術領域研究（領域代表五神（東大））

③ 次世代デバイス材料として期待されている材料の真の意味の可能性を計算科学によって明らかにし、その取捨選択の指針を明らかにすること（岡田、小泉）。
（岡田：CREST（代表岡田））

これからの研究（ナノメートル・ピコ・フェムト秒物理の構築の例）





まとめ

量子物性部門では、ナノ新物質・ナノ新構造体の新しい物理現象を設計・予言、「ナノメートル・ピコ・フェムト秒領域の物理概念」の創成を通して、21世紀の産業革命の基礎となる科学的知見を我々量子物性部門発で創成し、科学技術立国日本再生に資することを目指す。

Thank you