

受付 ID	16a61
分野	物質科学

## 実空間差分法に基づく第一原理電子構造・量子輸送特性計算コードの開発

### Development of first-principles calculation code for electronic structure and quantum transport based on real-space finite-difference method

小野 倫也

筑波大学計算科学研究センター

#### 1. 研究目的

本研究課題では、これまで独自に開発してきた量子力学の第一原理電子状態・電気伝導特性計算コード **RSPACE** を用い、**SiC** パワーデバイスの性能向上に貢献できるデータを引き出すこと、ならびに計算科学手法を用いたデバイスデザイン技術を構築することを目的としている。

#### 2. 研究成果の内容

**SiC** を用いたパワーデバイスには、エネルギー問題の解決や国内半導体デバイス産業の復興に向け、大きな期待が寄せられている。しかし、**SiC-MOS** 界面でのキャリア移動度が **SiC** バルクに対して 10%程度しかなく、**Si** バルクに対して 90%以上を誇る **Si-MOS** に比べ、深刻な欠点となっている。したがって、**SiC** パワーデバイスの普及には、移動度の向上が急務である。これまで、**SiC-MOS** 界面の欠陥準位によるキャリア散乱が移動度低下の原因であることが実験的研究より示唆されている。しかし、どのような界面欠陥がキャリアを散乱するのかは定性的な議論しかなく、詳しいことは分かっていない。**SiC-MOS** の移動度の向上のためには、界面の電子状態を理解し、制御する必要がある。

本年度は、**SiC-MOS** 界面の原子構造とキャリア散乱特性の関係を、**RSPACE** を用いて評価した。まず、熱酸化過程のシミュレーションをもとに、酸化中に現れる原子構造がキャリア散乱に与える影響を調べた。**SiC** は伝導帯端に自由電子的な振る舞いをする特徴的な準位を持ち、その電子状態は、酸化による酸素原子侵入により顕著に変わる。伝導帯端準位の変化を起因とするキャリア散乱は、電氣的に活性な界面欠陥よりも大きいことを明らかにした。この結果は、**Si** デバイスでは散乱因子として考えられてこなかった電氣的に不活性な欠陥でも、**SiC** デバイスでは活性な欠陥と同程度にキャリアを散乱することを示すものである。

#### 3. 学際共同利用として実施した意義

**RSPACE** の伝導計算ルーチンは、電子状態計算ルーチンに比べて 10 倍程度計算コストが高い。本学際共同利用では、伝導計算ルーチンに関して、計算機科学分野の研究者のアイデアを借りた高速化も行っている。

#### 4. 今後の展望

計算機科学分野の研究者との議論により、伝導計算に用いる電極自己エネルギー計算部の高速計算ルーチンを作成中である。このルーチンを RSPACE に組み込み、伝導計算の更なる大規模化を目指す。

#### 5. 成果発表

##### (1) 学術論文

- ・ S. Iwase, C. J. Kirkham, and T. Ono, Phys. Rev. B **95** 041302 (2017).
- ・ Y. Egami, S. Tsukamoto, and T. Ono, Quantum Matter **6** 4 (2017).
- ・ T. Ono, C. J. Kirkham, and S. Iwase, ECS Trans. **75** 121 (2016).
- ・ C. Kirkham and T. Ono, Materials Science Forum **858** 457 (2016).
- ・ T. Ono, S. Saito, and S. Iwase, Jpn. J. Appl. Phys. **55** 08PA01 (2016).

##### (2) 学会発表

- ・ T. Ono: Density functional theory study on transport property of nanomaterials, 5th International Conference from Nanoparticles and Nanomaterials to Nanodevices and Nanosystems (IC4N), (June 26-30, 2016, Porto Heli, Greece). [invited]
- ・ T. Ono, C. J. Kirkham, and S. Iwase: First-Principles Study on Electron Conduction at 4H-SiC(0001)/SiO<sub>2</sub> Interface, Pacific Rim Meeting on Electrochemical and Solid-State Science 2016, (October 2-7, 2016, Honolulu, USA). [invited]
- ・ T. Ono, C. Kirkham, and 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), E-3-03.
- ・ T. Ono and C. J. Kirkham: First-principles study on atomic and electronic structures of 4HSiC(0001)/SiO interface, APS March Meeting 2017, (March 13-17, 2017, New Orleans, USA), V36.00006.

##### (3) その他

- ・ 素子中の電子の流れ 原子スケールで解明, 日刊工業新聞, 平成29年2月1日.
- ・ デバイス中の電子の流れ 高精度に解析, 科学新聞, 平成29年2月3日.

使用計算機	使用計算機に○	配分リソース*
HA-PACS		
HA-PACS/TCA		
COMA	○	1440 時間
※配分リソースについては 32node 換算時間をご記入ください。		