

受付 ID	17a23
分野	物質科学

実空間差分法を用いた大規模伝導計算コードの開発

Development of large-scale transport calculation code using 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

近年の実験技術の向上により、数ナノメートルスケールの構造体を作成し、その構造、電子状態、電気伝導特性などを計測することが可能になっている。このようなスケールの物理現象を理解・制御するには、ナノスケールでの物質の微視的世界の基本法則に基づき理解することが重要であることは言うまでもない。ところが、現在のアプローチは実験により経験的に判明している因果関係を頼りに分析を行っており、その内部のメカニズムが分かっていない場合が多い。このように実験的研究のみでは明らかにすることが困難な問題に対し、実験的手法に加えて理論計算により各現象がなぜ起こるのかという内部のメカニズムを明らかにすることができれば、その応用、発展の可能性がさらに広がるはずである。本研究では、第一原電子状態・量子輸送特性シミュレーションのための実空間差分法に基づいた新しい計算手法およびそれに基づいた計算コード **RSPACE** の開発・改良し、新たなナノデバイスの開発に応用することを目的としている。

2. 研究成果の内容

平成29年度は、実験研究グループと協力したパワーデバイス用 **SiC/SiO₂** 界面の原子構造の解明と、**RSPACE** の伝導計算に用いる波動関数接合法の改良を行った。

SiC/SiO₂ 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/SiO₂** 界面は **Si/SiO₂** 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。本プロジェクトでは、透過電子顕微鏡のデータを援用し、第一原理電子状態・伝導特性計算のモデルになる界面原子構造の探索を行い、実デバイス界面に現れるであろう界面原子構造のいくつかを発見した。

波動関数接合法では、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。本プロジェクトでは、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。

3. 学際共同利用として実施した意義

異種材料が接合した界面原子構造は、両者の格子定数の不一致しないため、大きな計算モデルが必要である。また、波動関数接合に用いる連分数は大規模な逆行列計算を必要とするため、`scalapack`を用いた並列計算が必須である。本成果は、学際共同利用により、`COMA`の複数ノードを利用できたため得られたものである。

4. 今後の展望

平成29年度に得られた`SiC/SiO2`の界面原子構造に対し、開発した波動関数接合による伝導計算法を用いて、界面の原子構造とキャリア移動特性の解析を行い、`SiC/SiO2`界面のキャリア移動度低下メカニズムを解明するとともに、実空間差分法を用いた第一原理伝導計算の有用性を示す。

5. 成果発表

(1) 学術論文

- K. Takagi, T. Ono: First-principles study on leakage current caused by oxygen vacancies at `HfO2/SiO2/Si` interface, *Jpn. J. Appl. Phys.*, accepted.
- S. Tsukamoto, T. Ono, S. Blügel: Improvement of accuracy in the wave-function-matching method for transport calculations, *Phys. Rev. B* **97** 115450 (2018).
- T. Ono, C.J. Kirkham, S. Saito, Y. Oshima: Theoretical and experimental investigation of the atomic and electronic structures at the `4H-SiC(0001)/SiO2` interface, *Phys. Rev. B* **96** 115311 (2017).
- S. Iwase, Y. Futamura, A. Imakura, T. Sakurai, T. Ono, Efficient and Scalable Calculation of Complex Band Structure using Sakurai-Sugiura Method, *SC '17 Proceedings of the International Conference for High Performance Computing, Networking, Storage and Analysis* 40 (2017).

(2) 学会発表

- 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) (Invited).
- 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) (Invited).

使用計算機	使用計算機 に○	配分リソース※	
		当初配分	追加配分
HA-PACS/TCA			
COMA	○	82500	20625
Oakforest-PACS	○	320000	
※配分リソースについてはノード時間積をご記入ください。			