

「超並列計算機用デバイス機能予測シミュレーターの開発」

神戸大学大学院工学研究科

小野 倫也

1 研究の背景と目的

近年の半導体デバイスや光通信デバイスは、微細化によって高性能化を達成してきたと言っても過言ではない。これまで微細化の限界が幾度となく懸念されてきたが、その壁を打ち破り高性能化を実現してきた。現在では、そのサイズは数ナノメートルに達している。このようなスケールの物理現象を制御するには、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。

たとえば、自動車などの電動化が進むなか、SiCをはじめとするワイドバンドギャップ半導体を用いたパワーデバイスは、電力変換時のエネルギー損失が小さく、世界規模で増え続けるエネルギー消費を大幅に削減できるデバイスとして期待されている。しかし、SiC-MOSのキャリア移動度は、SiCバルクの移動度  $1,000(\text{cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1})$  に比べて 5%程度しかなく、Siバルク比 90%以上を誇る Si-MOS を考えると、SiC-MOS は SiC の優れた性能を十分に引き出せていない。窒素系ガスによるアニールで界面に窒素原子を挿入することにより、 $100(\text{cm}^2\text{V}^{-1}\text{s}^{-1})$  の移動度を達成した報告があるが、SiCバルクの移動度に遠く及ばない。界面に導入された窒素原子と移動度の関係が明らかになっておらず、実験のみでは電子論的な観点から移動度向上に対するプロセス設計指針が立てられないのが現状である。

量子力学の第一原理に基づくシミュレーションは、計算機の性能向上を受けて発展してきた。近年では、物質やデバイスのデザインに利用されつつあるものの、夥しい計算量を必要とするため適用範囲が限られている。適用範囲が制限されている最大の理由として、広く用いられている基底関数を用いた計算手法が近年の計算機の発展の傾向である超並列計算に適していないことが挙げられる。課題代表者らのグループでは、このような欠点を持たない超並列計算に適した実空間差分法に基づく第一原理計算法とこれに基づく計算プログラム RSPACE を開発してきた。本研究では、RSPACE を「富岳」で高速に実行できるようチューニングし、半導体デバイスの機能予測シミュレーターとして構築することを最終目的とする。開発するシミュレーターの機能を実証するマイルストーンとして、窒素系ガスでアニール処理を施した SiC MOS 界面の電気伝導特性を解析し、移動度低下要因を探る。

2 研究方法・研究内容

研究開始前に散乱領域を複数のサブ領域に分割し、サブ領域単位で計算したグリーン関数を連結することにより、計算コストをモデルサイズの 2 乗から 1 乗に比例するように抑えることができる方法を発見した。大型計算機センターのスパコンでは、効果が得られているものの膨大なメモリを使用するため、富岳での実行の妨げとなることが分っていた。本課題では、「富岳」で大規模シミュレーションを実現できるようプログラムの改良とその機能実証、さらに完成したプログラムで半導体デバイスの機能予測を実施するための SiC MOS 界面原子構造探索を実施した。具体的には、下記のように研究項目を整理して研究を進めた。

**a. グリーン関数計算用共役勾配法プログラムの富岳用チューニング**

サブ領域のグリーン関数を連結するには、サブ領域同士が接する面のグリーン関数の値があれば十分である。従来の方では、グリーン関数を計算する方法の都合から、サブ領域全体のグリーン関数を保持していた。これでは使用メモリがかさむため、接する面のみのグリーン関数を計算するアルゴリズムを開発し、使用メモリを削減した。また、既存計算コードは、グリーン関数の連結に 1 エネルギーサンプル点あたり単一のプロセスで実行するアルゴリズムを採用していたが、連結断面を拡大すると 1 プロセスあたりのメモリ使用量が大规模計算の障害となることが明らかであったため、複数のプロセスで分担して実行するアルゴリズムに置き換えた。

**b. 世界最大級のモデルを用いた第一原理伝導特性計算**

項目 a.で開発した計算コードの有用性を実証するため、世界最大規模の第一原理伝導特性計算を実施した。本項目では、従来法では原子数が多く、取り扱いが困難であった不純物がドーピングされた多層カーボンナノチューブの伝導特性計算を実施し、不純物の入り方と伝導特性の関係を明らかにした。

**c. 窒化アニール後の SiC-MOS 界面のキャリア散乱解析**

課題代表者らは、熱酸化のみで作成された SiC-MOS の場合、これまで Si-MOS では検討されてこなかった界面に陽に欠陥準位を作らない原子構造でも、キャリア散乱要因になることを示した[S. Iwase, C. J. Kirkham, T. Ono, Phys. Rev. B 95, 041302 (2017)]。窒素原子が挿入された界面は、熱酸化 SiC-MOS 界面よりも大規模な計算モデルが必要となる

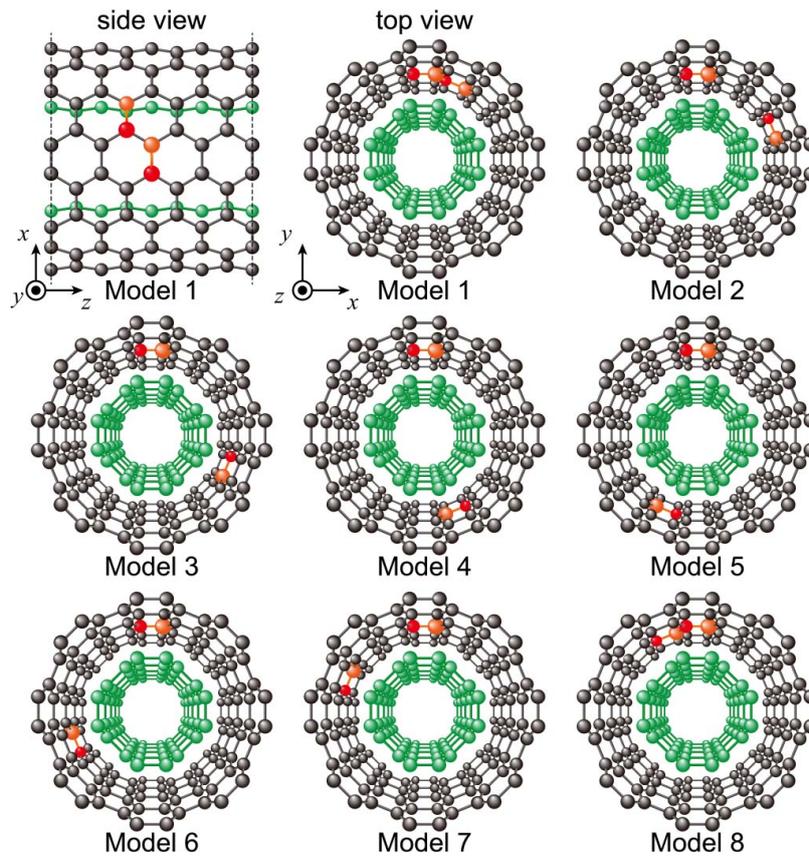


図 1: 計算に用いた(4,4)@(8,8)カーボンナノチューブのパーツ。灰球と緑球は炭素原子、赤球は窒素原子、橙球はホウ素原子を表す。Y. Egami, S. Tsukamoto, T. Ono, Phys. Rev. Res. 3, 013038 (2021)より転載。

が、上記 a.の改良と「富岳」の利用により、計算モデルの拡大が見込める。窒素が挿入された界面のキャリア散乱を RSPACE で解析することにより、界面での窒素原子とキャリア散乱の関係を調べる。2020 年度は「富岳」の共用前であるため、大型計算機センターのスパコンを用いて 2021 年度以降に「富岳」を用いて実施する窒素系ガスでアニール処理を施した SiC MOS 界面の原子構造を解析した。

### 3 研究成果

改良した RSPACE のパフォーマンスの高さを示すため、BN がドーピングされた (4,4)@(8,8) カーボンナノチューブの伝導特性解析を行った。BN をドーピングした原子構造は、図 1 に示すパーツを規則的に並べたものと、ランダムに並べたものを用いた。図 2 に BN を規則的にパーツを並べた場合とランダムな位置にドーピングした場合のコンダクタンススペクトルの違いを示す。規則的な位置にドーピングした場合は、ナノチューブが長くなるにつれ、コンダクタンススペクトルが

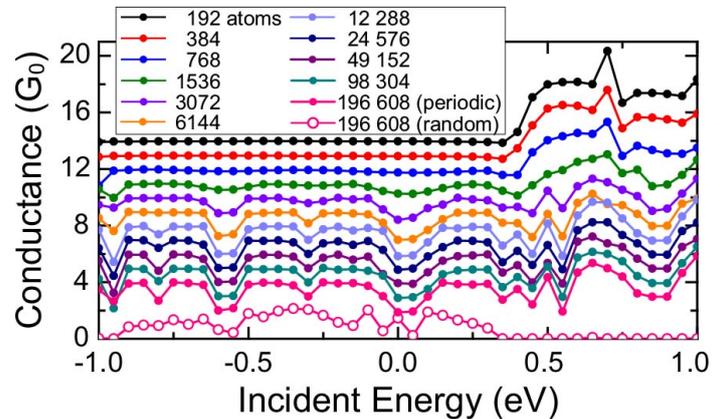


図 2: (4,4)@(8,8)カーボンナノチューブのコンダクタンススペクトル。ランダムに不純物がドーピングされたナノチューブは、コンダクタンススペクトルがなだらかになる。Y. Egami, S. Tsukamoto, T. Ono, Phys. Rev. Res. 3, 013038 (2021)より転載。

スパイクになる。これは、規則的な構造がバンドを形成し、バンドのエネルギー・波数と一致するエネルギー・波数をもつ電子は、散乱なくナノチューブを通過でき、一致しない電子のみが散乱されるからである。一方、ランダムな位置にドーピングした場合は、コンダクタンススペクトルがなだらかになるものの、電子の散乱が各所で起こり、伝導性が低いことが分かる。

図 3 に伝導電子の散乱波動関数をプロットしたものを示す。計算に用いたモデルでは、外側の(8,8)ナノチューブにのみ BN をドーピングしている。図 3(a)の透過率の高いチャンネルは、内側の(4,4)ナノチューブを伝って伝導していることが分かる。本研究で扱った 19 万 6 千原子超のモデルは、第一原理伝導特性計算に限れば世界最大である。

次に、改良した RSPACE を用いて、窒素系ガスアニール処理を施した SiC MOS 界面

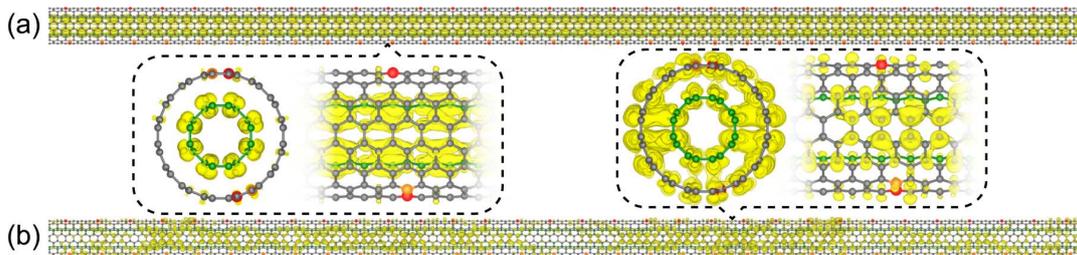


図 3: 6144 原子からなる(4,4)@(8,8)カーボンナノチューブ中を流れる電子の散乱波動関数の確率密度分布。(a)はフェルミエネルギー、(b)はフェルミエネルギーから 0.7eV 高いエネルギーの確率密度分布。

のキャリア散乱特性を予測すべく、界面原子構造の探索を行った。SiC MOS に用いられる SiC の面方位は、(0001)面、(000-1)面、(11-20)面、(1-100)面がある。窒素系ガスアニールによって導入された窒素原子は、SiC/SiO<sub>2</sub> 界面に局在することが二次イオン質量分析法を用いた実験により分かっている。本研究では、MOS 界面の SiC 基板側に窒化遷移層が形成されると仮定し、これらの面方位に対し形成される界面遷移層の形成エネルギーを評価した。窒化層の窒素原子面密度と形成エネルギーを表 1 に示す。窒素原子面密度は、二次イオン質量分析法で得られた実験値とよく一致している。また形成エネルギーより、(1-100)面に沿って窒化層ができる場合が最も安定であることが分かる。

これらの知見を用いて、富岳供用開始後、窒素系ガスアニール処理後の SiC MOS 界面を作成し、キャリア散乱特性を計算する。

表 1: 窒化膜の窒素原子面密度と形成エネルギーの差

面方位	窒素原子面密度 (原子/cm <sup>2</sup> )	形成エネルギーの差 (eV)
(0001)面	$1.22 \times 10^{15}$	0.574
(11-20)面	$1.29 \times 10^{15}$	0.614
(1-100)面	$1.48 \times 10^{15}$	0.000

#### 4 生活や産業への貢献および波及効果

本研究では、富岳での実行を見据えた大規模第一原理計算コード RSPACE の開発と SiC 電子デバイス界面の原子構造解析を行った。今後富岳を用いた大規模第一原理計算を実行することにより、SiC 電子デバイスの機能予測を実現すれば、省電力デバイス作成プロセス設計に資する知見を得ることができる。また、開発した RSPACE を電子デバイスのみならずスピントロニクスデバイスや分子デバイスの機能予測に適用することにより、新奇な機能を発するデバイス開発を期待できる。