



## 計算科学手法による高機能デバイス界面の設計

応用物理物性およびその関連分野



研究者所属・職名 : 大学院工学研究科・教授

ふりがな おの ともや  
氏名 : 小野 倫也

主な採択課題 :

- [学術変革領域研究\(A\)「計算科学手法による2次元ナノ空間でのキャリア伝導予測と高機能デバイスデザイン」\(2022-2023\)](#)
- [基盤研究\(B\)「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」\(2016-2019\)](#)
- [若手研究\(B\)「第一原理計算による高効率量子輸送デバイスのデザイン」\(2012-2013\)](#)

分野 : 表面界面物性

キーワード : 第一原理計算、界面物性、伝導特性

### 課題

#### ●なぜこの研究をおこなったのか？(研究の背景・目的)

半導体デバイスや光通信デバイスは微細化により高性能化を実現してきており、現在、そのサイズはナノメートルスケールに達する。このようなスケールの物理現象を制御するには、ナノスケールサイズ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。高性能スパコンを駆使したシミュレーション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、ナノスケールで発現する物理現象の応用、発展の可能性が広がる。

#### ●研究するにあたっての苦労や工夫(研究の手法)

ナノスケール構造で発現する物理現象の予言に長けている第一原理シミュレーションは、夥しい計算量を要するため、実際の界面を模した大規模なモデルを扱うことは容易でない。「富岳」等の高性能スパコンで高速にシミュレーションを実行できる実空間差分法に基づく第一原理計算法とこの方法に基づく計算コードRSPACEを独自に開発した。



図1 研究手法のイメージ

## 計算科学手法による高機能デバイス界面の設計

応用物理物性およびその関連分野

## 研究成果

## ●どんな成果がでたか？どんな発見があったか？

## 1. 大規模伝導特性シミュレーションの実現

「富岳」等の高性能スパコンの性能を最大限引き出して高速計算ができるようRSPACEコードを改良し、19万原子超からなるモデルを用いた多層カーボンナノチューブの第一原理伝導特性計算を実現した(Phys. Rev. Research 2021)。これは、第一原理伝導特性計算の中では、発表時点において世界最大級のモデルである。

## 2. SiC-MOSデバイス界面の特異なオン抵抗増加機構の解明

次世代パワーエレクトロニクスデバイスとして期待されているSiC-MOS界面の原子構造とオン抵抗の関係を調べた(図2)。SiC特有の自由電子的な振る舞いをする伝導帯端準位が、酸化による酸素原子侵入によって空間的な揺らぎを生じ、オン抵抗が増加することを発見した。界面に高頻度で起こる酸素原子侵入がオン抵抗を増大させる機構は、従来のSi-MOSでは検討されてこなかった現象である(Phys. Rev. B 2017)。

プレスリリース

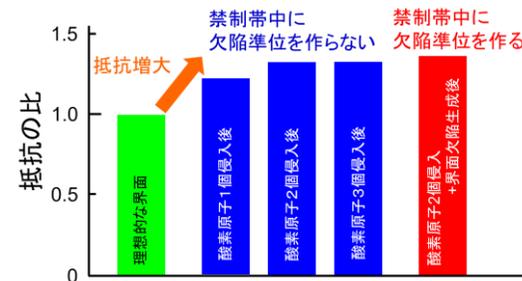
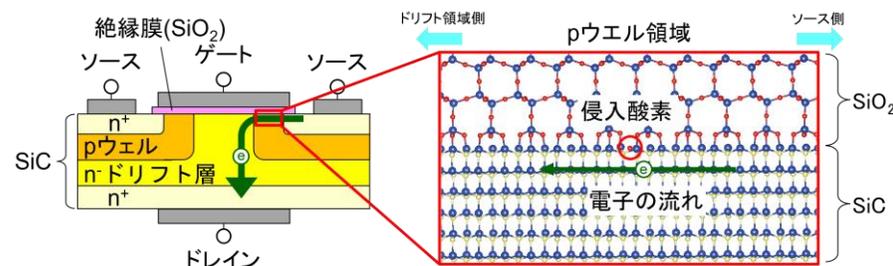
<https://www.jst.go.jp/pr/announce/20170125/index.html>[https://www.kobe-u.ac.jp/research\\_at\\_kobe/NEWS/news/2021\\_12\\_02\\_02.html](https://www.kobe-u.ac.jp/research_at_kobe/NEWS/news/2021_12_02_02.html)

図2 ナノスケールの構造を考慮したSiC-MOS界面の計算モデル(上)と酸化によるオン抵抗の増加(下)

## 今後の展望

## ●今後の展望・期待される効果

スパコンの計算性能の進化は著しく、計算コストの高い第一原理シミュレーションでも実際の実験環境に近いモデルを扱えるようになってきている。開発した計算手法はエレクトロニクスデバイスに限らず、スピントロニクスデバイスや電池・触媒などでの現象解明・機能予測にも適用できる。高機能界面開発に資する知見を得てデバイスのエネルギー利用効率を向上できれば、今後爆発的に増えると予測されているエネルギー消費を低減しSDGsに貢献できる可能性を秘めている。