

令和 4 年 7 月 1 日現在

機関番号：12608

研究種目：基盤研究(A) (一般)

研究期間：2018～2020

課題番号：18H03770

研究課題名(和文) マルチスケール計算によるSiC酸化機構に現れる複合相関とその界面電子物性への影響

研究課題名(英文) Multi-scale calculations for complex correlation appearing in SiC oxidation and its impact on electronic properties

研究代表者

松下 雄一郎 (Matsushita, Yu-ichiro)

東京工業大学・物質・情報卓越教育院・特任准教授

研究者番号：90762336

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 38,850,000円

研究成果の概要(和文)：本課題では第一原理理論計算に基づいて、SiC-MOS界面欠陥の構造特定と界面欠陥低減法の理論的提案を行なった。SiC/SiO₂界面に現れる欠陥の特定は、SiC-MOSデバイス特性の改善において重要な課題である。本研究課題では、SiC-MOS界面欠陥として2つの欠陥候補を特定に成功した。1つは、SiCの伝導帯下端の波動関数に由来するSiC固有の欠陥であり、もう1つは界面に析出した炭素関連欠陥である。特に、界面に析出した炭素関連欠陥を提言する方法として、熱酸化を使わない酸化膜形成法を提案した。また、それを実験によって検証した結果、界面欠陥密度を10分の1にまで低減できていることがわかった。

研究成果の学術的意義や社会的意義

SiC/SiO₂界面に現れる欠陥の特定とその低減は、SiC-MOSデバイス特性の改善において重要な研究課題である。本課題では、理論計算に基づき、界面欠陥の特定とその低減法を提案した。特に、その低減法は実験によって有効性が示され、界面欠陥密度の大幅な低減に成功した。ここで開発された技術は、省エネ社会実現に大きく貢献するものと考えられる。この研究課題は、パワー半導体デバイスにおける日本のプレゼンス拡大に大きく貢献するものとする。

研究成果の概要(英文)：In this project, we propose a method to identify SiC-MOS interface defects and to reduce the defects at the SiC/SiO₂ interface based on first-principles calculations. In this study, two candidate defects at the SiC-MOS interface were successfully identified: one is an intrinsic defect in SiC due to the wave function at the lower end of the conduction band of SiC, and the other is a carbon-related defect precipitated at the interface. In particular, we proposed an oxide film formation method without thermal oxidation as a method to propose carbon-related defects precipitated at the interface. The experimental results showed that the density of interfacial defects could be reduced to one-tenth.

研究分野：物性理論、量子アルゴリズム

キーワード：SiC DFT 欠陥

様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

持続可能な開発目標の実現が世界的にも重要な課題となっている昨今、エネルギーを無駄なく使用するテクノロジーが大きな注目を集めている。省エネ時代実現のための、要となるパーツがパワーデバイスと呼ばれる電子デバイスである。パワーデバイスは、直流-交流や、電圧変換など、電力変換を司る電子デバイスであり、より効率的にエネルギーを転送する・使用するために、身の回り至る所の電気製品に組み込まれている電子部品である。パワーデバイスの開発において、電力変換時におけるエネルギー損失をいかに低減し、無駄なくエネルギーを変換するかは、重大な課題である。現在のところ、シリコン(Si)を用いたパワーデバイスが主流となっているが、シリコン物性値に由来するデバイス特性の限界値に接近した現在、他のパワー半導体への期待が増している。

以上のような背景のもと、炭化ケイ素(SiC)は、次世代パワーデバイス半導体として大きく注目されている。SiCはその優れた物性値から、Siパワーデバイスと比べてオン抵抗を理論上、300分の1程度にまで低減することが知られており、その開発が大きな注目を集めている。特に、MOSFET(金属酸化膜半導体電界効果トランジスタ)の研究開発が注目されている。実際に、既にSiC-MOSデバイスは市場にも出回り始めており、電車や車、さまざまな場面でSiパワーデバイスを置き換え始めている状況である。

しかし、SiC-MOSデバイスにおいては、SiC/SiO₂界面における高密度欠陥に由来して、デバイス特性は理論性能値のせいぜい10%程度であるのが現状である。実際に、高密度界面欠陥は、キャリアトラップとして働き、チャンネル抵抗の上昇を招くこととなる。既に、実験・理論による多くの先行研究があるにも関わらず、その界面欠陥の微視的な構造の特定には未だ成功していなかった。高密度界面欠陥の微視的な構造の特定とその低減法を開発することは、重要な課題であった。

2. 研究の目的

本研究では、実験値に基づかない原子論シミュレーションにより、パワーデバイスの設計指針を与えることが目的である。以上の目的のため、以下の3つのことを明らかにすることを目標と設定した。

1. SiC/SiO₂界面欠陥の微視的構造の特定
2. SiC/SiO₂界面欠陥の低減法の提案
3. より高精度で高信頼性な材料シミュレーション手法の開発

3. 研究の方法

理論計算から界面欠陥構造を特定する上で、実験値を用いない第一原理計算は重要な位置を占める。特に、第一原理計算の中でも、密度汎関数理論(DFT)に基づく理論シミュレーションは、その比較的小さい計算コストからしばしば用いられる理論計算法である。本研究においても、DFTに基づいた理論計算を行なった。また、点欠陥の電子状態を高精度に求めるため、SiCのバンドギャップを定量的にも再現するようにHSE(Heyd-Scuseria-Ernzerhof)近似を用いた。HSE近似を用いることにより、SiCバンドギャップの実験値3.3eVのところを、3.4eVと定量的に再現することを確認した。

また、点欠陥の安定性を高精度に計算するために、計算セルサイズの有限サイズ補正を行った。有限サイズセル補正として、最新の手法、大場-熊谷法を用いた。(Physical Review B 89, 195205 (2014).)これにより、点欠陥の形成エネルギーを高精度に求めた。

4. 研究成果

3. の3つの目標に対して以下の成果を得た。以下では、それぞれの目標に対して得られた成果を紹介する。

- (1) 「目標 1. SiC/SiO₂界面欠陥の微視的構造の特定」に対する成果は以下の通りである。

我々は、密度汎関数計算を行い、界面欠陥の微視的な姿を明らかにした。界面欠陥の有力な候補の一つは、界面に残留する炭素関連欠陥である。本研究では、SiCバルク、SiO₂膜、SiC/SiO₂ジャスト界面の3領域に分布する炭素関連欠陥、合計120種類の安定性とその温度・酸素分圧依存性を密度汎関数法に基づく理論計算により明らかにした[1]。Figure 1には、その結果を示す。理論計算の結果、実際の実験で用いられる温度と酸素分圧の条件下では、界面近傍に炭素関連欠陥が生成していることがわかった。特に、ジャスト界面に分布する残留炭素欠陥は安定化し、多量に存在することがわかった。この計算結果は、界面での残留炭素欠陥の形成がエネルギー的に安定であり、熱酸化により界面に残留炭素欠陥が必然的に生成されることを示している。実際に、界面炭素欠陥はSiCの酸化で取り残された残留炭素が界面に析出したものであり、実験的にもSIMS実験などで観測がなされている。

[1] T. Kobayashi et. al., JAP, **126**, 145302 (2019).

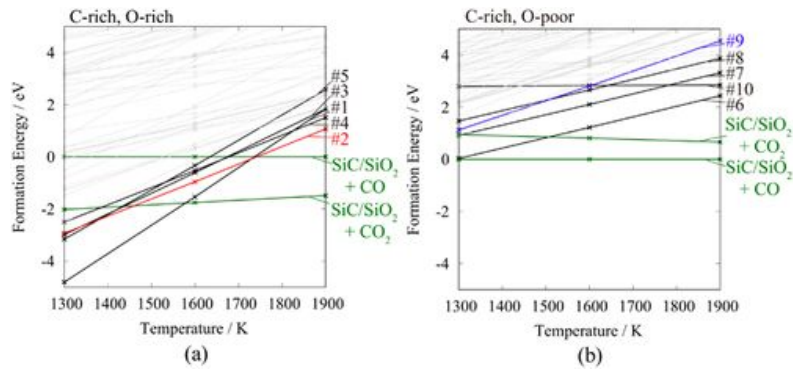


Figure 1, SiC/SiO₂界面における炭素関連欠陥の形成エネルギーの温度依存性. 左図は、炭素リッチ (SiC/SiO₂界面近傍の環境に相当)、酸素リッチ (酸素分圧の高い環境に相当) における計算結果. 右図は、炭素リッチ (SiC/SiO₂界面近傍の環境に相当)、酸素リッチ (酸素分圧の低い環境に相当) における計算結果を表している. 形成エネルギーが大きいほど、不安定であることを意味する. 黒い実線は SiC/SiO₂ ジャスト界面における炭素欠陥、青い実線は SiO₂ 中の炭素欠陥、赤い実線は SiC バルク中の炭素欠陥、緑の実線は CO (気体) や CO₂ (気体) を意味する.

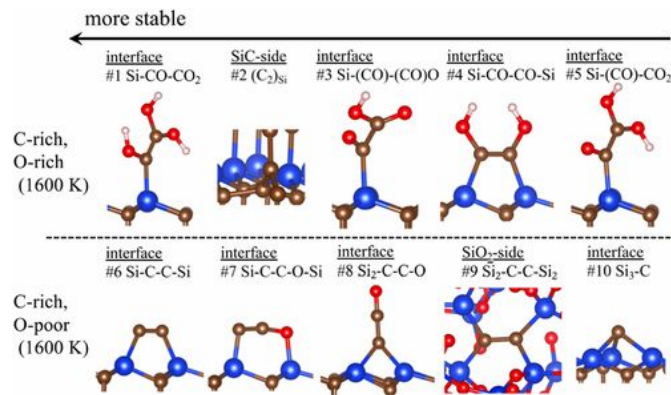


Figure 2, Figure1 において、比較的安定であるとわかった炭素関連欠陥上位 5 種類の構造. 青いボールは Si を、茶色いボールは炭素を、赤いボールは酸素を、白いボールは水素を表す.

計算結果から、酸素分圧の低い低酸素分圧環境下における熱酸化の方が、高酸素分圧環境下よりも炭素関連欠陥が不安定化していることを示している。つまり、低酸素分圧環境下における熱酸化の方がより界面炭素欠陥が少ないことを意味し、より良い界面構造を作りうることを示している。このことは、最近の実験での報告と合致していることがわかった。(T. Hosoi, et. al., APL **109**, 182114 (2016).)

また、Figure1 において得られた計算結果に対応して、その炭素関連欠陥の構造を表したのが Figure2 である。Figure 2 において、低酸素分圧環境下において、炭素ダングリングボンドが見られていることが特徴である。また、我々はこの炭素ダングリングボンド欠陥の超微細構造定数の計算を行った。これは実際に、ごく最近、ESR (電子スピン共鳴法) によって SiC/SiO₂ 界面で実際に測定されたシグナルと良い一致を示し、界面における炭素ダングリングボンド (Pbc センタ) の構造特定に成功した [2]。Figure 3 は ESR スペクトルと、Pbc センタの構造を示している。

[2] T. Umeda, et.al., APEX **116**, 071604 (2020).

これらの結果はいずれも、SiC/SiO₂ 界面近傍における炭素関連欠陥の計算と定性的に整合していることがわかり、計算結果が確かに実験と矛盾していないことがわかる。

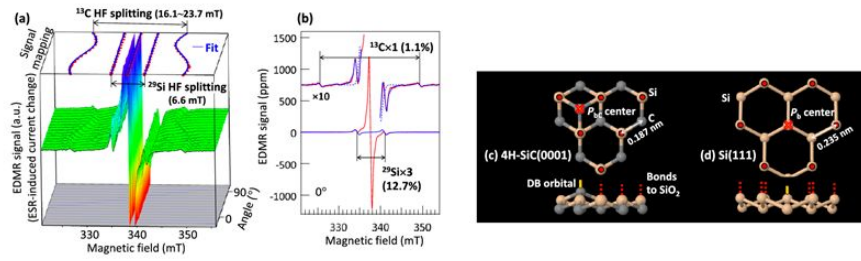


Figure 3, (a)(b) ESR スペクトルと(c) Pb センタの構造、(d) Si 表面上のシリコンダンダリングポンド(Pb センタ)の構造。

さらには、SiC 以外のワイドバンドギャップ半導体として、 α -Ga₂O₃ 中の点欠陥の形成エネルギーも計算によって求め、その有望性を調査した。その結果、Ga-リッチにおいても、O-リッチ環境においても、どちらも p 型において Ga インタースティシャル欠陥の形成エネルギーが負をとっていることがわかる。形成エネルギーが負であることから、自発的に欠陥が発生することを意味し、p 型半導体を実現しないことを意味する [3]。

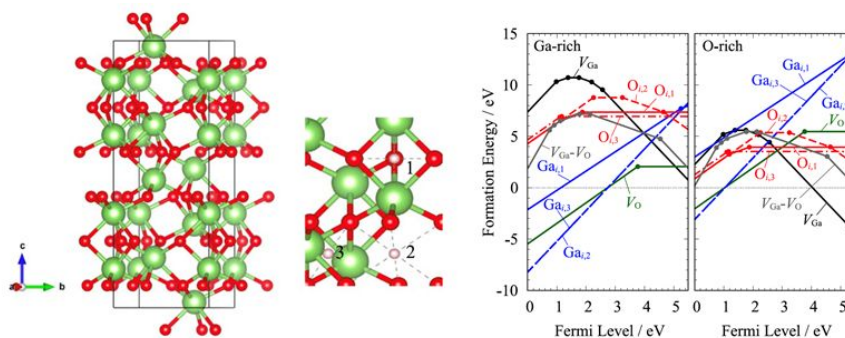


Figure 4, α -Ga₂O₃ 結晶(左図)と α -Ga₂O₃ 結晶中の点欠陥の形成エネルギー(右図)。

[3] T. Kobayashi, et. al., APEX **12**, 091001 (2019).

(2) 「目標 2. SiC/SiO₂ 界面欠陥の低減法の提案」に対する成果は以下の通りである。

目標 1 で明らかになった通り、ジャスト SiC/SiO₂ 界面において炭素関連欠陥がエネルギー的に安定であることがわかった。それはつまり、SiC の熱酸化による界面における炭素関連欠陥の生成は不可避であることを意味する。次に、界面の炭素関連欠陥の低減法を検討した。その結果、熱酸化を用いない酸化膜形成法を考案した (Figure 5 参照) [4]。つまり、提案プロセスでは、水素エッチング後に Si 薄膜を成膜し、SiC の酸化が進行しない温度で Si 膜のみを酸化し、SiO₂ 膜を形成するというものである。酸化膜形成後に N₂ 窒化界面処理を行うことで、界面欠陥の低減を行った。また、提案手法の有効性を実験で確認したところ、界面準位密度が従来の $10^{11} \text{cm}^{-2} \text{eV}^{-1}$ よりも一桁小さい $(1-4) \times 10^{10} \text{cm}^{-2} \text{eV}^{-1}$ の高品質な界面構造を実現することを明らかにした (Figure 6 参照)。

[4] T. Kobayashi. Et. al., APEX, **13**, 091003 (2020).

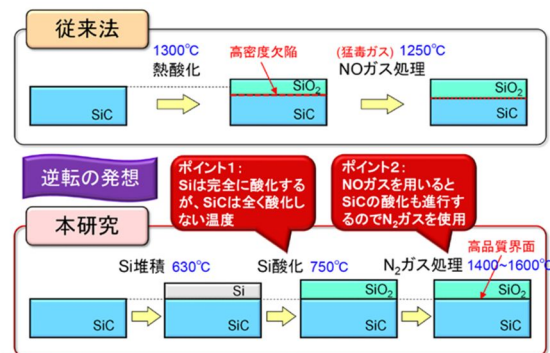


Figure 5, SiC の酸化膜形成法. 従来法は、熱参加を用いるもの(上図)であり、新しい酸化膜形成法ではシリコンを堆積し、シリコンのみを酸化することにより酸化膜を形成する(下図)。

SiO₂/SiC界面の欠陥密度の比較

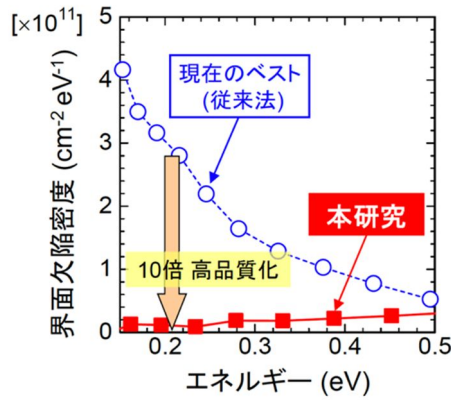


Figure 6, 新しい酸化膜形成法で作成された SiC/SiO₂界面欠陥の密度. 伝導帯下端からのエネルギーに対する界面欠陥密度. 従来法に比べて、界面欠陥密度が 10 分の 1 に低減.

4. 「目標 3. より高精度で高信頼性な材料シミュレーション手法の開発」に対する成果は以下の通りである。

より高精度で高信頼性な材料シミュレーションを実現すべく、量子コンピュータのアルゴリズムの開発を検討した。虚時間発展法は材料科学において昔から知られた方法であるが、量子コンピュータ上において虚時間発展法を実現するアルゴリズムを開発した。特に、虚時間発展法を量子コンピュータ上で実装する際、大きな問題は非ユニタリ演算である虚時間発展演算子をいかにしてユニタリゲート操作のみの量子コンピュータ上で実装するか、である。本研究では、虚時間発展演算子が作用されたベクトルをよく近似するようにユニタリ演算子を構築し、量子コンピュータ上でゲート操作として実行を行う量子アルゴリズムの開発に成功した。Figure 7 には、本研究で開発した非局所近似(NLA)の適用結果を示す。Figure 7 は、非局所近似虚時間発展法を 10 サイトの 3 正則マックスカット問題に適用した結果である。10 サイトの 3 正則マックスカット問題において、厳密解は-12 であり、虚時間発展ステップ 10 において厳密解に対して非局所近似が良い精度で解を見出していることを示している。具体的には、NLA-D2 の時には 95%の精度、NLA-D3 では 100%の精度を出していることがわかる [5]。一方、古典アルゴリズムを用いた際の近似精度は 93%であり、量子虚時間アルゴリズムを用いた計算では古典アルゴリズムの精度限界を超え得る可能性を見出すことができた。

[5] H. Nishi, *et. al.*, npj quantum information 7, 85(2021) にて報告を行なった。

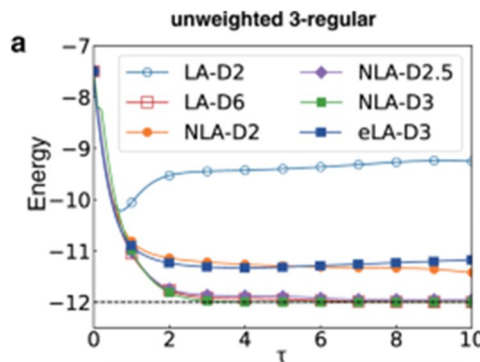


Figure 7, 虚時間発展法を 10 サイトの 3 正則グラフへと適用した際の量子コンピュータのシミュレーション結果。横軸は虚時間ステップ、縦軸はエネルギーを示す。局所近似(LA)、非局所近似(NLA)、拡張局所近似(eLA)の比較を行う。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計25件（うち査読付論文 24件 / うち国際共著 1件 / うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 Kobayashi Takuma, Harada Kou, Kumagai Yu, Oba Fumiyasu, Matsushita Yu-ichiro	4. 巻 125
2. 論文標題 Native point defects and carbon clusters in 4H-SiC: A hybrid functional study	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 125701 ~ 125701
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.5089174	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Kuroiwa Yuichiro, Matsushita Yu-ichiro, Harada Kou, Oba Fumiyasu	4. 巻 115
2. 論文標題 Theoretical prediction of strain-induced carrier effective mass modulation in 4H-SiC and GaN	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Applied Physics Letters	6. 最初と最後の頁 112102 ~ 112102
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.5122215	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Kobayashi Takuma, Gake Tomoya, Kumagai Yu, Oba Fumiyasu, Matsushita Yu-ichiro	4. 巻 12
2. 論文標題 Energetics and electronic structure of native point defects in α -Ga ₂ O ₃	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Applied Physics Express	6. 最初と最後の頁 091001 ~ 091001
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7567/1882-0786/ab3763	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Kobayashi Takuma, Matsushita Yu-ichiro	4. 巻 126
2. 論文標題 Structure and energetics of carbon defects in SiC (0001)/SiO ₂ systems at realistic temperatures: Defects in SiC, SiO ₂ , and at their interface	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 145302 ~ 145302
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.5100754	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Kosugi Taichi、Matsushita Yu-ichiro	4. 巻 101
2. 論文標題 Construction of Green's functions on a quantum computer: Quasiparticle spectra of molecules	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review A	6. 最初と最後の頁 1-12
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevA.101.012330	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Umeda T., Kobayashi T., Sometani M., Yano H., Matsushita Y., Harada S.	4. 巻 116
2. 論文標題 Carbon dangling-bond center (carbon Pb center) at 4H-SiC(0001)/SiO2 interface	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Applied Physics Letters	6. 最初と最後の頁 071604 ~ 071604
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.5143555	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Kasper C., Klenkert D., Shang Z., Simin D., Gottscholl A., Sperlich A., Kraus H., Schneider C., Zhou S., Trupke M., Kada W., Ohshima T., Dyakonov V., Astakhov G. V.	4. 巻 13
2. 論文標題 Influence of Irradiation on Defect Spin Coherence in Silicon Carbide	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review Applied	6. 最初と最後の頁 1-11
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevApplied.13.044054	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Anderson Christopher P., Bourassa Alexandre, Miao Kevin C., Wolfowicz Gary, Mintun Peter J., Crook Alexander L., Abe Hiroshi, Ul Hassan Jawad, Son Nguyen T., Ohshima Takeshi, Awschalom David D.	4. 巻 366
2. 論文標題 Electrical and optical control of single spins integrated in scalable semiconductor devices	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Science	6. 最初と最後の頁 1225 ~ 1230
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1126/science.aax9406	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Niethammer Matthias, Widmann Matthias, Rendler Torsten, Morioka Naoya, Chen Yu-Chen, Stohr Rainer, Hassan Jawad Ul, Onoda Shinobu, Ohshima Takeshi, Lee Sang-Yun, Mukherjee Amlan, Isoya Junichi, Son Nguyen Tien, Wrachtrup Jorg	4. 巻 10
2. 論文標題 Coherent electrical readout of defect spins in silicon carbide by photo-ionization at ambient conditions	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Nature Communications	6. 最初と最後の頁 1-8
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1038/s41467-019-13545-z	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Miao Kevin C., Bourassa Alexandre, Anderson Christopher P., Whiteley Samuel J., Crook Alexander L., Bayliss Sam L., Wolfowicz Gary, Thiering Gergo, Udvarhelyi Peter, Ivady Viktor, Abe Hiroshi, Ohshima Takeshi, Gali Adam, Awschalom David D.	4. 巻 5
2. 論文標題 Electrically driven optical interferometry with spins in silicon carbide	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Science Advances	6. 最初と最後の頁 1-7
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1126/sciadv.aay0527	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Widmann Matthias, Niethammer Matthias, Fedyanin Dmitry Yu., Khramtsov Igor A., Rendler Torsten, Booker Ian D., Ul Hassan Jawad, Morioka Naoya, Chen Yu-Chen, Ivanov Ivan G., Son Nguyen Tien, Ohshima Takeshi, Bockstedte Michel, Gali Adam, Bonato Cristian, Lee Sang-Yun, Wrachtrup Jorg	4. 巻 19
2. 論文標題 Electrical Charge State Manipulation of Single Silicon Vacancies in a Silicon Carbide Quantum Optoelectronic Device	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Nano Letters	6. 最初と最後の頁 7173 ~ 7180
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.nanolett.9b02774	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Son Nguyen Tien, Stenberg Pontus, Jokubavicius Valdas, Abe Hiroshi, Ohshima Takeshi, Ul Hassan Jawad, Ivanov Ivan G.	4. 巻 114
2. 論文標題 Energy levels and charge state control of the carbon antisite-vacancy defect in 4H-SiC	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Applied Physics Letters	6. 最初と最後の頁 212105 ~ 212105
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.5098070	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Seino Kaori, Oshiyama Atsushi	4. 巻 13
2. 論文標題 Energetics of the surface step and its morphology on the 3C-SiC(111) surface clarified by the density-functional theory	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Applied Physics Express	6. 最初と最後の頁 015506 ~ 015506
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7567/1882-0786/ab598a	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Bui Kieu My, Boero Mauro, SHIRAIISHI Kenji, Oshiyama Atsushi	4. 巻 59
2. 論文標題 A two-dimensional liquid-like phase on Ga-rich GaN (0001) surfaces evidenced by first principles molecular dynamics	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Japanese Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 1-5
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7567/1347-4065/ab650b	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Shintaku Fumiya, Yoshio Daichi, Kangawa Yoshihiro, Iwata Jun-Ichi, Oshiyama Atsushi, Shiraishi Kenji, Tanaka Atsushi, Amano Hiroshi	4. 巻 13
2. 論文標題 Computational study of oxygen stability in vicinal m(10-10)-GaN growth by MOVPE	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Applied Physics Express	6. 最初と最後の頁 055507 ~ 055507
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.35848/1882-0786/ab8723	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Yoshio Daichi, Shintaku Fumiya, Inatomi Yuya, Kangawa Yoshihiro, Iwata Jun-Ichi, Oshiyama Atsushi, Shiraishi Kenji, Tanaka Atsushi, Amano Hiroshi	4. 巻 2020
2. 論文標題 Oxygen Incorporation Kinetics in Vicinal m (10-10) Gallium Nitride Growth by Metal Organic Vapor Phase Epitaxy	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 physica status solidi (RRL) Rapid Research Letters	6. 最初と最後の頁 2000142 ~ 2000142
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1002/pssr.202000142	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Kobayashi Takuma, Harada Kou, Kumagai Yu, Oba Fumiyasu, Matsushita Yu-ichiro	4. 巻 125
2. 論文標題 Native point defects and carbon clusters in 4H-SiC: A hybrid functional study	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 125701 ~ 125701
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.5089174	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Hijikata Yasuto, Horii Takashi, Furukawa Yoritaka, Matsushita Yu-ichiro, Ohshima Takeshi	4. 巻 2
2. 論文標題 Oxygen-incorporated single-photon sources observed at the surface of silicon carbide crystals	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Journal of Physics Communications	6. 最初と最後の頁 111003 ~ 111003
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1088/2399-6528/aaede4	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Kobayashi Takuma, Matsushita Yu-ichiro, Kimoto Tsunenobu, Oshiyama Atsushi	4. 巻 58
2. 論文標題 Structural determination of phosphosilicate glass based on first-principles molecular dynamics calculation	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Japanese Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 011001 ~ 011001
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7567/1347-4065/aae89b	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Matsushita Yu-ichiro, Oshiyama Atsushi	4. 巻 57
2. 論文標題 Structural stability and energy levels of carbon-related defects in amorphous SiO ₂ and its interface with SiC	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Japanese Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 125701 ~ 125701
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7567/JJAP.57.125701	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Matsushita Yu-ichiro, Furukawa Yoritaka, Hijikata Yasuto, Ohshima Takeshi	4. 巻 464
2. 論文標題 First-principles study of oxygen-related defects on 4H-SiC surface: The effects of surface amorphous structure	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Applied Surface Science	6. 最初と最後の頁 451 ~ 454
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.apsusc.2018.09.072	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Bui Kieu My, Iwata Jun-Ichi, Kangawa Yoshihiro, Shiraiishi Kenji, Shigeta Yasuteru, Oshiyama Atsushi	4. 巻 507
2. 論文標題 First-principle study of ammonia decomposition and nitrogen incorporation on the GaN surface in metal organic vapor phase epitaxy	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of Crystal Growth	6. 最初と最後の頁 421 ~ 424
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jcrysgro.2018.11.031	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Bui Kieu My, Iwata Jun-Ichi, Kangawa Yoshihiro, Shiraiishi Kenji, Shigeta Yasuteru, Oshiyama Atsushi	4. 巻 507
2. 論文標題 First-principle study of ammonia decomposition and nitrogen incorporation on the GaN surface in metal organic vapor phase epitaxy	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Journal of Crystal Growth	6. 最初と最後の頁 421 ~ 424
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.jcrysgro.2018.11.031	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 J. Davidsson, V. Ivady, R. Armiento, T. Ohshima, N. T. Son, A. Gali, I. A. Abrikosov	4. 巻 114
2. 論文標題 Identification of divacancy and silicon vacancy qubits in 6H-SiC	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Applied Physics Letters	6. 最初と最後の頁 112107 ~ 112111
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.5083031	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 該当する

1. 著者名 Hijikata Yasuto	4. 巻 92
2. 論文標題 Macroscopic simulations of the SiC thermal oxidation process based on the Si and C emission model	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Diamond and Related Materials	6. 最初と最後の頁 253 ~ 258
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.diamond.2019.01.012	査読の有無 無
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

[学会発表] 計47件 (うち招待講演 14件 / うち国際学会 20件)

1. 発表者名 小杉太一, 松下雄一郎
2. 発表標題 量子コンピュータを用いた分子の線形応答関数の計算
3. 学会等名 第75回日本物理学会年次大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 小杉太一, 松下雄一郎
2. 発表標題 結合クラスター法による分子のグリーン関数の解析
3. 学会等名 2019年日本物理学会秋季大会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Yuichiro Matsushita, Tetsuo Hatakeyama
2. 発表標題 Ab-initio study on 4H-SiC(0-33-8)/SiO ₂ interface structures and its electronic structures
3. 学会等名 第80回応用物理学会秋季学術講演会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Takuma Kobayashi, Tomoya Gake, Yu Kumagai, Fumiyasu Oba, Yu-ichiro Matsushita
2. 発表標題 Structural and Electronic Properties of Native Point Defects in α -Ga ₂ O ₃
3. 学会等名 第80回応用物理学会秋季学術講演会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Taichi Kosugi, Yu-ichiro Matsushita
2. 発表標題 Quantum algorithms for Green's functions and linear response functions on quantum computers
3. 学会等名 第81回応用物理学会春季学術講演会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 松下雄一郎
2. 発表標題 結合クラスター理論による準粒子スペクトル計算：古典と量子コンピュータ上での実装と適用
3. 学会等名 第29回日本MRS年次大会（招待講演）
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 K. M. Bui, M. Boero, K. Shiraishi, and A. Oshiyama
2. 発表標題 Gallium Diffusion and Ammonia Decomposition on Growing GaN Surface: First Principles Molecular Dynamics Simulations
3. 学会等名 International Conference on Solid State Devices and Materials
4. 発表年 2019年

1 . 発表者名 T. Nakano, K. Chokawa, Y. Harashima, M. Araidai, K. Shiraishi, A. Oshiyama, A. Kusaba, Y. Kangawa, A. Tanaka, Y. Honda, H. Amano
2 . 発表標題 Microscopic Reason for the Leakage Current due to the Mg-Attached Dislocation in GaN
3 . 学会等名 International Conference on Solid State Devices and Materials (国際学会)
4 . 発表年 2019年

1 . 発表者名 F. Shintaku, Y. Kangawa, J. I. Iwata, A. Oshiyama, K. Shiraish, A. Tanaka, H. Amano
2 . 発表標題 Theoretical approach to oxygen incorporation mechanism in vicinal m-GaN MOVPE
3 . 学会等名 International Conference on Solid State Devices and Materials (国際学会)
4 . 発表年 2019年

1 . 発表者名 Y. Harashima ¹ , T. Nakano, A. Oshiyama, K. Shiraishi
2 . 発表標題 Modeling of the Leakage Current in GaN mediated through the Dislocation-Impurity Complex
3 . 学会等名 International Conference on Solid State Devices and Materials (国際学会)
4 . 発表年 2019年

1 . 発表者名 K. M. Bui, M. Boero, K. Shiraishi and A. Oshiyama
2 . 発表標題 Computics Approach toward Clarification of Microscopic Mechanisms of Epitaxial Growth of Gallium Nitride
3 . 学会等名 International Conference on Materials and Systems for Sustainability 2019 (ICMaSS2019), (Nagoya, Japan) (国際学会)
4 . 発表年 2019年

1. 発表者名 K. Seino and A. Oshiyama
2. 発表標題 Microscopic identification of surface steps of SiC by the density-functional calculations
3. 学会等名 International Conference on Silicon Carbide and Related Materials 2019 (Kyoto/Japan) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 制野 かおり、押山 淳
2. 発表標題 第一原理計算によるSiC表面のステップモフォロジーの検討 (口頭発表)
3. 学会等名 第67回応用物理学会学術講演会 (上智大学)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 制野 かおり、押山 淳
2. 発表標題 実空間密度汎関数法によるSiC表面ステップの構造と安定性の解明 (口頭発表)
3. 学会等名 日本物理学会第75回年次大会 (名古屋大学)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 井本文裕、今田正俊、押山淳
2. 発表標題 機械学習による軌道フリー密度汎関数理論とその応用 (口頭発表)
3. 学会等名 日本物理学会第75回年次大会 (名古屋大学)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 山崎 雄一, 千葉 陽史, 佐藤 真一郎, 牧野 高紘, 山田 尚人, 佐藤 隆博, 土方 泰斗, 児嶋 一聡, 土田 秀一, 星乃 紀博, 大島 武
2. 発表標題 SiC デバイス内に作製したシリコン空孔の光・電気同時励起時における光学特性
3. 学会等名 応用物理学会 先進パワー半導体分科会 第6回講演会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 千葉 陽史, 山崎 雄一, 牧野 高紘, 佐藤 真一郎, 山田 尚人, 佐藤 隆博, 土方 泰斗, 大島 武
2. 発表標題 SiC結晶中シリコン空孔の光検出磁気共鳴信号にアニール温度が及ぼす影響
3. 学会等名 応用物理学会 先進パワー半導体分科会 第6回講演会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 榎原 拓真, 佐藤 真一郎, 児嶋 一聡, 山崎 雄一, 土方 泰斗, 大島 武
2. 発表標題 4H-SiC中の窒素・空孔複合欠陥の形成量と窒素不純物濃度の関係
3. 学会等名 応用物理学会 先進パワー半導体分科会 第6回講演会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 T. Ohshima, S.-i. Sato, T. Narahara, Y. Yamazaki, Y. Abe, T. Umeda, Y. Hijikata
2. 発表標題 Creation of nitrogen-vacancy centers in SiC by ion irradiation
3. 学会等名 30th International Conference on Defects in Semiconductors (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 T. Ohshima, Y. Yamazaki, Y. Chiba, Y. Hijikata, K. Kojima, S.-Y. Lee, W. Kada
2. 発表標題 Position-Selective Silicon Vacancy Formation in Silicon Carbide Devices using Proton Beam Writing
3. 学会等名 Quantum 2019 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 T. Ohshima
2. 発表標題 Creation of silicon vacancy in silicon carbide using proton beam writing techniques for quantum sensing
3. 学会等名 Workshop on Ion beams for future technologies 2019 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Y. Chiba, Y. Yamazaki, S.i. Sato, T. Makino, N. Yamada, T. Satoh, Y. Hijikata, T. Ohshima
2. 発表標題 Enhancement of ODMR Contrasts of Silicon Vacancy in SiC by Thermal Treatment
3. 学会等名 International Conference on Silicon Carbide and Related Materials 2019 (ICSCRM2019) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 T. Narahara, S.-i. Sato, K. Kojima, Y. Yamazaki, Y. Hijikata, T. Ohshima
2. 発表標題 Effects of Nitrogen Impurity Concentration on Nitrogen-Vacancy Center Formation in 4H-SiC
3. 学会等名 International Conference on Silicon Carbide and Related Materials 2019 (ICSCRM2019) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 S.-i. Sato, T. Narahara, S. Onoda, Y. Yamazaki, Y. Hijikata, B. C. Gibson, A. D. Greentree, T. Ohshima
2. 発表標題 Near Infrared Photoluminescence in High-Purity Semi-Insulating 4H-SiC Irradiated with Energetic Charged Particles
3. 学会等名 International Conference on Silicon Carbide and Related Materials 2019 (ICSCRM2019) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Y. Yamazaki, Y. Chiba, S.-I. Sato, T. Makino, N. Yamada, T. Satoh, K. Kojima, Y. Hijikata, H. Tsuchida, N. Hoshino, T. Ohshima
2. 発表標題 Optically detected magnetic resonance study of 3D arrayed silicon vacancies in SiC pn diodes
3. 学会等名 International Conference on Silicon Carbide and Related Materials 2019 (ICSCRM2019) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 山崎 雄一, 千葉 陽史, 佐藤 真一郎, 牧野 高紘, 山田 尚人, 佐藤 隆博, 土方 泰斗, 児嶋 一聡, 土田 秀一, 星乃 紀博, 大島 武
2. 発表標題 SiCデバイス内の3次元配列シリコン空孔を用いた光検出磁場共鳴測定
3. 学会等名 2019年 第80回応用物理学会秋季学術講演会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 千葉 陽史, 山崎 雄一, 牧野 高紘, 佐藤 真一郎, 山田 尚人, 佐藤 隆博, 土方 泰斗, 大島 武
2. 発表標題 SiC結晶中シリコン空孔のODMR信号に熱処理温度が及ぼす影響
3. 学会等名 2019年 第80回応用物理学会秋季学術講演会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 榎原 拓真, 佐藤 真一郎, 児島 一聡, 山崎 雄一, 土方 泰斗, 大島 武
2. 発表標題 4H-SiC中の窒素・空孔複合欠陥の形成における窒素不純物濃度の影響
3. 学会等名 2019年 第80回応用物理学会秋季学術講演会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 新田 翔司, 土方 泰斗
2. 発表標題 PLイメージング法による異なるオフカット角を有する4H-SiC基板中の酸化誘起積層欠陥の観測
3. 学会等名 先進パワー半導体分科会第6回講演会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 小野寺 奎, 鎌田 憲彦, 土方 泰斗, 武山 昭憲, 大島 武, 吉江 徹
2. 発表標題 Below-Gap励起光を用いたFET構造4H-SiCの欠陥準位の検出
3. 学会等名 第80回応用物理学会秋季学術講演
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Y. Hijikata, Y.-i. Matsushita, and T. Ohshima
2. 発表標題 Room temperature electronic-controllable quantum devices using single-photon sources in SiC crystals
3. 学会等名 2nd The Asia-Pacific Conference on Silicon Carbide and Related Materials (APCSCRM 2019) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Y. Hijikata, Y.-i. Matsushita, and T. Ohshima
2. 発表標題 Structure identification and characterization of the single-photon sources formed on the surface of silicon carbide crystal
3. 学会等名 2019 Energy Materials and Nanotechnology on Epitaxy (EMN Meeting on Epitaxy 2019) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Y. Hijikata
2. 発表標題 Room temperature electronic-driven quantum devices using single defects in silicon carbide semiconductors
3. 学会等名 2019 International Seminar on Electron Devices Design and Production (SED-2019) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Yu-ichiro Matsushita
2. 発表標題 Quasiparticle spectra based on wave function theory: Application of coupled-cluster theory and self-energy functional theory
3. 学会等名 21st Asian Workshop on First-Principles Electronic Structure Calculations (ASIAN-21) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 松下雄一郎
2. 発表標題 第一原理計算によるSiC酸化膜界面の伝導帯端の揺らぎ -SiC MOS界面の構造特定に向けて
3. 学会等名 先進パワー半導体分科会第12回研究会 (招待講演)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 小林拓真、松下雄一郎
2. 発表標題 第一原理計算によるSiC/SiO ₂ 界面近傍の炭素関連欠陥の構造同定
3. 学会等名 応用物理学会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 小林拓真、松下雄一郎、奥田貴史、木本恒暢、押山淳
2. 発表標題 りん処理によるSiC/SiO ₂ 界面の炭素関連欠陥の低減機構
3. 学会等名 応用物理学会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 松下雄一郎、小林拓真
2. 発表標題 SiC酸化膜中の窒素関連欠陥の構造とその電子状態
3. 学会等名 応用物理学会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 N. Mori, G. Mil'nikov, J. Iwata, and A. Oshiyama
2. 発表標題 Quantum transport device simulation based on real-space density functional theory and non-equilibrium Green's function method
3. 学会等名 International Union of Materials Research Societies - International Conference on Electronic Materials (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Atsushi Oshiyama
2. 発表標題 Computics approach to power semiconductors: Reactions in GaN epitaxial growth and carrier traps near SiC/SiO ₂ Interfaces
3. 学会等名 37th Electronic Materials Symposium (招待講演)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 押山淳
2. 発表標題 Electronic Properties of Nanometer-Scale Surfaces and Interfaces through Computics Approach
3. 学会等名 日本真空表面学会学術講演会 (招待講演)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Atsushi Oshiyama
2. 発表標題 Large-scale density-functional calculations in real space and its application to bilayer graphene and semiconductor epitaxial growth
3. 学会等名 American Physical Society March Meeting (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 常見 大貴, 佐藤 真一郎, 山崎 雄一, 牧野 高紘, 土方 泰斗, 大島 武
2. 発表標題 SiC表面に形成される単一光子源の酸化膜厚依存性
3. 学会等名 応用物理学会 先進パワー半導体分科会 第5回講演会
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 土方 泰斗, 松下 雄一郎, 大島 武
2. 発表標題 同位体酸素を用いたSiC表面に形成される単一光子源の構造推定
3. 学会等名 第66回応用物理学会春季学術講演会
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Y. Hijikata
2. 発表標題 Growth Rate Simulations of Oxide Films on Silicon Carbide based on the Si and C Emission Model
3. 学会等名 2018 Conference on Intelligent Computing, Communication & Applied Technologies (CICCAT2018) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Y. Hijikata
2. 発表標題 A Macroscopic Simulation of the SiC Thermal Oxidation Process based on the Si and C Emission Model
3. 学会等名 The Asia-Pacific Conference on Silicon Carbide and Related Materials (APCSCRM) (招待講演)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 Y. Hijikata, Y. Furukawa, Y.-i. Matsushita, and T. Ohshima
2. 発表標題 Radiation Efficiency Enhancement of Single Photon Source near Stacking Fault in 4H-SiC Epilayer
3. 学会等名 European Materials Research Society (E-MRS) 2018 Spring Meeting (国際学会)
4. 発表年 2018年

〔図書〕 計0件

〔出願〕 計2件

産業財産権の名称 炭化ケイ素半導体装置及びその製造方法	発明者 松下雄一郎	権利者 同左
産業財産権の種類、番号 特許、2019-140141	出願年 2019年	国内・外国の別 国内

産業財産権の名称 量子計算機、量子計算方法及びプログラム	発明者 松下雄一郎, 小杉太一, 西紘史	権利者 同左
産業財産権の種類、番号 特許、2020-038500	出願年 2020年	国内・外国の別 外国

〔取得〕 計0件

〔その他〕

量子コンピュータ材料計算 https://www.msl.titech.ac.jp/~matsushita/ 高崎量子応用研究所 http://www.taka.qst.go.jp/eimr_div/RadEffects/index_j.html 土方研究室ホームページ http://www.opt.ees.saitama-u.ac.jp/~yasuto/index-j.html

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究分担者	大島 武 (Ohshima Takeshi) (50354949)	国立研究開発法人量子科学技術研究開発機構・高崎量子応用研究所 先端機能材料研究部・部長(定常) (82502)	
研究分担者	土方 泰斗 (Hijikata Yasuto) (70322021)	埼玉大学・理工学研究科・准教授 (12401)	
研究分担者	押山 淳 (Oshiyama Atsushi) (80143361)	名古屋大学・未来材料・システム研究所・特任教授 (13901)	

6. 研究組織（つづき）

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究 分 担 者	櫻井 鉄也 (Sakurai Tetsuya) (60187086)	筑波大学・システム情報系・教授 (12102)	

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関