

令和 5 年 6 月 13 日現在

機関番号：13901

研究種目：基盤研究(A)（一般）

研究期間：2018～2021

課題番号：18H03873

研究課題名（和文）量子論コンピューティクスによるパワー半導体界面形成機構と電子物性の解明

研究課題名（英文）Clarification of interface formation and electronic properties of power semiconductors through quantum theoretical computics

研究代表者

押山 淳 (Oshiyama, Atsushi)

名古屋大学・未来材料・システム研究所・特任教授

研究者番号：80143361

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 32,400,000円

研究成果の概要（和文）：本課題の目的は、コンピューティクス・アプローチにより、パワー半導体科学の未解明の諸問題を量子論により解明することである。方法論としては、深層学習を用いた軌道不要のオーダーN計算スキーム（OFDFTスキーム）を新たに開発し、従来手法である我々のRSDFTスキーム（2011年ゴードンベル賞受賞）を凌駕する高速計算に成功した。パワー半導体科学としては、SiC、GaNにフォーカスし、RSDFT、OFDFTを用い、薄膜成長の機構解明、絶縁体とのデバイス界面でのキャリアトラップのミクロな同定などに成功した。成果は、主要学術雑誌における29篇の原著論文、学会における11件の招待講演として公表された。

研究成果の学術的意義や社会的意義

半導体デバイス界面、薄膜成長表面での量子論に立脚した原子プロセス解明は、物理科学的には未踏の重要分野であり、またナノテクノロジーの局面に突入した工学および社会実装の観点からは、国の豊かさを支える技術的基盤である。本課題での量子論計算科学（コンピューティクス）アプローチによる計算手法の開発は、次世代スーパーコンピューター・アーキテクチャにおける計算科学の発展に寄与するものであり、またそれを応用した省エネルギー半導体デバイス構造での表面・界面原子反応の解明は我が国の半導体産業の復権に資するものである。

研究成果の概要（英文）：The purpose of this project is to resolve problems quantum mechanically in the field of power-semiconductor science based on the computics approach. In methodology viewpoints, we have newly developed order-N orbital-free density-functional-theory (OFDFT) scheme using the neural network, and demonstrated its validity and the higher performance compared with our RSDFT code which is the Gordon-Bell-prize winner in 2011. In semiconductor-science viewpoints, we have unveiled atomic processes in epitaxial growth of GaN and SiC, and microscopically identified carrier traps at the interfaces with gate insulators, using the RSDFT and OFDFT schemes. The obtained achievements are in public as 29 original papers in major science journals and as 11 invited talks in the inter- and intra-national conferences.

研究分野：計算物質科学

キーワード：量子論 密度汎関数理論 コンピューティクス HPC パワーエレクトロニクス エピタキシャル成長
デバイス界面

科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属します。

1. 研究開始当初の背景

半導体表面界面系は電子デバイスの作用原理を具現化する舞台である。そこでの原子構造、電子状態さらには電子機能の解明は、科学と工学の発展には欠かせない。さらに半導体テクノロジーはナノメートルのスケールに突入しており、上記物性機能の解明には量子論に基づく計算科学的アプローチが必須である。近年のスーパーコンピュータの発達と計算科学的アプローチの進展は、こうした物質科学課題の重要課題解明への期待を抱かせるが、ハードウェアのアーキテクチャに即したアルゴリズムおよび数理手法の開拓なしには、満足のいく実行効率は望めない。HPC(High Performance Computing)技術を駆使した新たな計算物質科学へのアプローチ、コンピューティクス・アプローチ(<http://computics-material.jp/>)、が必要である。本研究は、こうした量子論コンピューティクス・アプローチにより、半導体科学、とくにパワー半導体科学とテクノロジーの喫緊の課題解決を目指し、複雑大規模系に対する量子論第一原理計算の実行可能性・有効性に対する「問い」に答えるものとしてスタートした。

2. 研究の目的

本研究の目的は、量子論の第一原理に立脚した HPC を遂行し、また次世代の新たな計算手法を開発し、それにより異種物質界面系、薄膜成長系における原子構造形成過程のダイナミクスを明らかにし、そこでの原子構造と電子状態を決定し、発生する界面欠陥の性質を解明し、それによって異種物質界面の電気的および光学的性質の量子物理学による解明と予測を行うことである。

3. 研究の方法

本研究での基礎となる理論は密度汎関数理論 (DFT: Density Functional Theory) である。界面形成のダイナミクスを追跡する、あるいはアモルファス相を計算機上で作成するためには、大規模な第一原理分子動力学法 (FPMD: First Principles Molecular Dynamics) 計算を長時間 (サブナノ秒=100 万 MD ステップ) 行うことが必要になる。さらに、異種物質界面の電子状態計算では、異なる物質相を同等の精度で記述する必要がある。いわば、空間・時間・精度の三つの軸に関して、従来手法を質的に向上させる必要がある。そうした計算手法の開発においては、今後のアーキテクチャの変化を視野にいれた HPC 技術の採用と進展著しい機械学習の手法を取り入れることを計画した。物質ターゲットとしては次世代パワーエレクトロニクスの基幹材料である Silicon Carbide (SiC) と Gallium Nitride (GaN) に的を絞った。

4. 研究成果

1) 深層学習によるオーダー N -Orbital-Free DFT 計算手法の開拓と物質科学への応用

DFT の基本定理は、相互作用しあっている電子系 (つまり現実の物質) の全エネルギー E は電子密度 $\rho(\mathbf{r})$ の汎関数として正確に記述できるというものである。したがって、その汎関数の形がわかれば $E(\rho)$ の $\rho(\mathbf{r})$ に対するオイラー方程式を解くことにより、 $\rho(\mathbf{r})$ が求まり、全エネルギーが計算でき、ターゲット物質の物性が議論できる。しかし $E[\rho]$ の正確な形はわからない。そこで全エネルギーを独立な仮想電子系の運動エネルギーとその残りの部分に分けるスキームが始められた [Kohn-Sham (KS) スキーム]。このスキームでは仮想電子系の運動エネルギーは各電子の軌道 Kohn-Sham 軌道 φ_i ($i = 1 \dots N$) であらわされ、もともとの ρ に対するオイラー方程式は φ_i に対するターゲットサイズ N に比例する数の方程式群 (KS 方程式) に変換される。この KS スキームは、多くの物質群に対して大きな成功をおさめ、計算物質科学の隆盛を支えている。しかし N 個の軌道を導入したおかげで、Kohn-Sham 方程式は非線形に絡み合った方程式群となり、その解法の計算コストはオーダー N^3 となっている。しかし DFT の基本に立ち返れば、運動エネルギーの、 ρ についての汎関数の形がわかれば、解くべきオイラー方程式は一つであり、計算コストはオーダー N となり、飛躍的な計算効率の上昇が見込まれる。この軌道を用いないスキームを Orbital-Free DFT (OFDFT) とよぶ。今回、この運動エネルギー汎関数の形をニューラルネットワーク (NN) によって明らかにし、新たな NN-OFDFT 法を開発した。運動エネルギー汎関数 $T[\rho]$ の形としては以下のようなものを考えた。

$$T[\rho] = \int \tau^{TF}(\mathbf{r}) F(s^2, q; \mathbf{W}) d\mathbf{r}$$

ここで、 τ^{TF} は一様電子密度の系に対する運動エネルギー密度、 F は実際の系での、一様電子密度の場合の運動エネルギーからのずれを表す enhancement 因子である。 F の形としては様々なものを考えることが可能だが、ここでは電子密度とその 2 次微分までの関数で表されると仮定する (2 次の密度勾配近似)。すなわち $s = |\nabla \rho| / [2(3\pi^2)^{1/3} \rho^{4/3}]$ 、および $q = \nabla^2 \rho / [4(3\pi^2)^{3/2} \rho^{5/3}]$ である。 \mathbf{W} が今回導入した NN の重みパラメータ $w_{jk}^{(l)}$ の集合であり、 $l-1$ 層の k 番目のニューロンと l 層の j 番目のニューロンとを結びつけるシナプスと言えらる。(図 1) この重みパラメータを training により教育し、最適な運動エネルギー汎関数を求める。Training では運動エネルギー

ギー汎関数の汎関数微分の各メッシュ点での値を用いたコスト関数 L を最小化した。

Training はダイヤモンド構造の炭素の計算データを用いて行った。

ダイヤモンドで教育された NN で生み出された汎関数を用いて 24 種の異なる物質群 (diamond, graphene, fcc-Si, beta-tin-Si, SiC, bcc-Li, fcc-Al, fcc-Cu, bcc-Na, NaCl および 7 種の原子、6 種の分子) に対して電子密度分布を計算し、従来法である KS スキーム(KSDFT)の結果と比較した。過去の近似理論で導かれた汎関数を用いた OFDFT に比べ、今回の NN-OFDFT は最良の結果を与えた。

また構造定数 (固体の場合の格子定数、体積弾性率、分子の原子間距離等) も計算され、Kohn-Sham スキームで得られた値と良好な一致を示している。一例として、表 1 に fcc-Cu、bcc-Na、NaCl、graphene の例を示す。また他のすべての物質群に対する構造定数計算結果と合わせて、すべての物質群に対しての Kohn-Sham スキームによる結果からのずれの MARE (Mean Absolute Relative Error) も表 1 に示してある。過去の汎関数に比べての優位性は顕著である。

今回開発した OFDFT コードと KSDFT で最速とみなされる RSDFT コードの計算時間比較も行った。対象は SiC 結晶を選んだ。今回の NN-OFDFT コードはきれいにオーダー N の計算時間スケーリングを示しており、RSDFT との計算時間のクロスオーバーは高々数百個であった。ミクロナスケールの超大規模計算への応用が期待できる。以上の成果は、Phy. Rev. Res.誌に公表された。

表 1: 4 種の金属、イオン結晶、グラフェンの構造定数。MARE は他の 20 種の物質に対する構造定数と合わせて Mean Absolute Relative Error を示したものの。

	fcc-Cu		bcc-Na		NaCl		graphene	MARE	
	a_0	B_0	a_0	B_0	a_0	B_0	a_0	a_0	B_0
NN	3.730 (2.33)	169 (6.96)	4.227 (-0.91)	7.98 (3.50)	5.678 (3.61)	27.7 (6.94)	2.448 (0.29)	1.39	11.1
NN ^[bare]	3.887 (6.64)	228 (44.3)	4.045 (-5.18)	9.73 (26.2)	5.187 (-5.35)	32.4 (25.1)	2.377 (-2.62)	4.74	38.4
PGSL0.25	3.795 (4.12)	138 (-12.4)	4.250 (-0.38)	8.00 (3.75)	5.595 (2.10)	22.9 (-11.5)	2.433 (-0.32)	1.66	12.1
LKT	3.762 (3.21)	175 (10.7)	4.245 (-0.50)	7.91 (2.61)	5.596 (2.12)	23.8 (-8.20)	2.402 (-1.59)	1.66	14.5
TF(1/5)vW	3.799 (4.21)	88.4 (-44.1)	4.116 (-3.51)	8.49 (10.1)	6.056 (10.5)	6.75 (-73.9)	2.593 (6.24)	6.10	47.0
KSDFT	3.645	158	4.266	7.71	5.480	25.9	2.441		

2) パワー半導体エピタキシャル成長機構解明

次世代省エネルギー半導体デバイスの有力材料であるワイドギャップ半導体のエピタキシャル成長機構の解明に DFT アプローチで挑戦し、ステップフロー成長のマイクロ機構を解明した。パワー半導体デバイス構造ではエピタキシャル膜の品質が極めて重要な要素となる。ターゲットとしては、SiC と GaN に焦点を当てたが、ここでは GaN について説明する。

GaN の MOVPE (MetalOrganic Vapor Phase Epitaxy) 成長では、Ga 源として TMGa [Trimethyl Gallium: Ga(CH₃)₃]、N 源としてアンモニア[NH₃]、キャリアガスとして H₂ と N₂ が反応炉内に流入し、気相および基板上での熱分解 (基板温度 1300K) により、GaN 薄膜が成長する。したがって気相中の反応経路をまずは明らかにし、その結果生じた分子が基板表面上でどのような反応を起こすかを調べるのが王道である。

気相反応については、本研究課題遂行中の我々の計算により、TMGa は GaH₃ まで分解し、成長表面は Ga リッチとなっていることが判明した。一方 N ソースである NH₃ は気相で分解せずに表面に到達することが名大実験グループでの質量分析実験から明らかになっている。したがって表面成長反応としては、Ga リッチ表面での NH₃ の振舞いを調べるべきである。そこで DFT 計算を行った結果、GaN(0001)表面での NH₃ は Ga アドアトム上に吸着し、NH と H₂ に分解し、NH は弱い Ga-Ga ボンドに侵入することが判明した[J. Phys. Chem. C 2018]。続く反応は、NH の表面テラス上での拡散経路の決定と拡散エネルギー障壁の計算である。図 2 にあるように、NH は等価な安定位置を比較的に低いエネルギー障壁を越えて経めぐる事が判明した。その拡散障壁の高さは 0.6 eV と計算された。

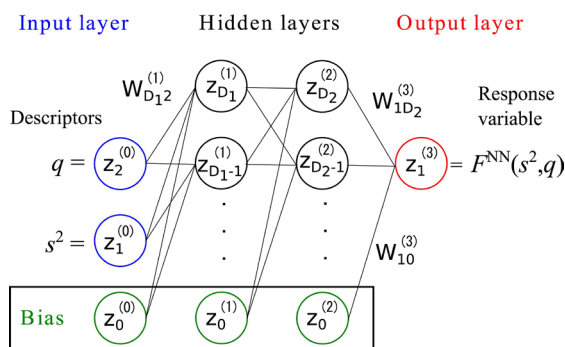


図 1: ニューラルネットワークの模式図。hidden layer の数が 2 の場合。 q と s が記述子であり、enhancement 因子 F が出力である。実際の計算では 3 個の hidden layer、layer あたり 5 個のニューロンを用いた。

一方、成長表面では原子ステップが存在し、そのステップが成長することによりエピタキシャル成長が起こる。ステップ構造には全部で 5 つの可能性がある。[11-20]方向に微傾斜した面では Ga と N の双方がステップ端に現れる GN ステップ端、[1-100]方向に微傾斜した面では、Ga がステップ端に現れ、構造最適化前には 2 本あるいは 3 本のダングリングボンドが登場する Ga2 および Ga3 ステップ端、N がステップ端に現れる場合は同様に N2 および N1 ステップ端がそれである。今回我々はそのすべてのステップ構造を全エネルギー計算により最適化し、その生成エネルギーを求めた。一例が図 3 に示した[11-20]に微傾斜した GaN(0001)表面に特徴的な GN ステップ構造、および[1-100]方向に微傾斜した(0001)表面に特徴的な Ga2 ステップ構造である。いずれの場合にも、ステップ端では上テラスの Ga と下テラスの Ga が新たなボンドを形成している。このリボンドが半導体表面ステップでの構造的特徴である。しかしこのボンドは Ga-N のボンドに比べて弱い。それは表示した電子密度からも明らかである (図 3)。

このステップ端にテラス上を拡散してきた NH が取り込まれるプロセスを考える。テラス上の 2 つの独立な NH がステップ端に取り込まれた場合の安定構造が図 4(a)である。この構造はテラス上に NH がいる場合に比べて 0.45 eV エネルギーを得ることがわかった。つまり NH はステップ端に引き寄せられる。ここで表面にリッチに存在する Ga 原子が新たにこのステップ端に近づき、二つの NH の H が H₂として脱離し、代わりに新たな Ga が N のダングリングボンドを修復する過程を考えると、その最終構造は図 4(b)のようになることが判明した。計算の結果、この過程は成長温度、成長炉内の気圧下での自由エネルギー変化を計算すると、十分に起こり得る過程であることがわかった。この最終構造を[0001]方向から見たのが図 4(c)である。反応前の GN ステップ端が 1 ユニット進んだことが明らかである。これがステップフロー・エピタキシャル成長の素過程であると考えられる。これらの成果は、Appl. Surf. Sci., Appl. Phys. Lett., Jpn. J. Appl. Phys., J. Cry. Growth 等の学術誌に公表された。

3) 省エネルギー半導体機能発現と floating state の役割

以前の我々の DFT 計算で、充填率が低い疎な物質では、原子の周囲ではなく原子から離れた内包空間に分布する電子状態 (floating state) が存在することが明らかになった。それは一見して疎なカーボンナノ物質のような階層的物質群 (岡田他、PRB 2000、PRL 2001) にとどまらず、典型的半導体である四面体構造物質 (充填率 0.34) においてもユビキタスに存在し (松下他、PRL 2012, 2014)、実験的に知られている SiC の結晶多型による、バンドギャップの 40%もの変化を見事に説明する。さらに SiC(0001)/SiO₂ MOS デバイス界面での原子層積層欠陥が電子トラップを引き起こすことを明らかにした (松下他、NanoLett 2017)。さらに本研究課題における DFT 計算により、省エネデバイスとして重要な不揮発性フラッシュメモリにおいても、この floating state が重要であることが判明したので、以下に報告する。

現在の 3D-NAND フラッシュメモリは Si-MOS

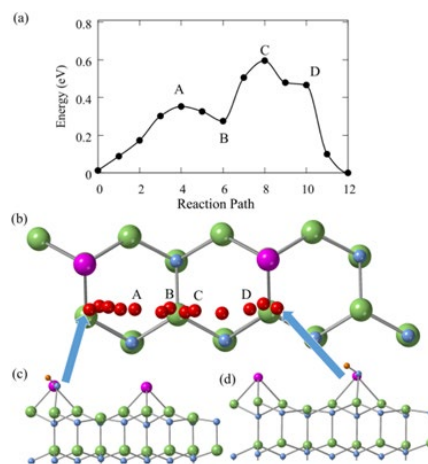


図 2: GaN(0001)表面テラス上での NH ユニットの拡散。テラス上 Ga サイトに吸着した NH₃は H₂と NH ユニットの分解し、NH ユニットの弱い Ga-Ga ボンドに侵入する (c)。この配置から隣の同等な配置 (d)までの NH の拡散経路 (b) とその経路に沿ったエネルギー・プロファイル (a) が計算された。青は N 原子、橙は水素原子、緑と赤ワイン色は Ga 原子を表している。(b)での赤ドットは拡散経路に沿った NH の N の位置を表す。

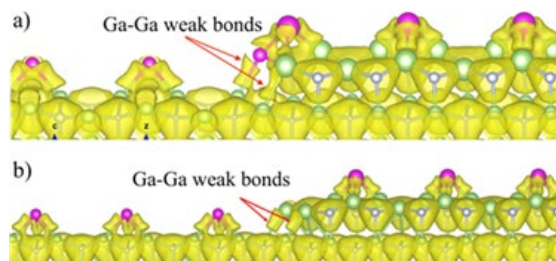


図 3: GaN(0001)微傾斜面での安定原子ステップ構造。(a)GN ステップ、(b)Ga2 ステップ。大きい球、小さい球が Ga、N 原子を表している。黄色い雲は計算された電子密度の等値面。

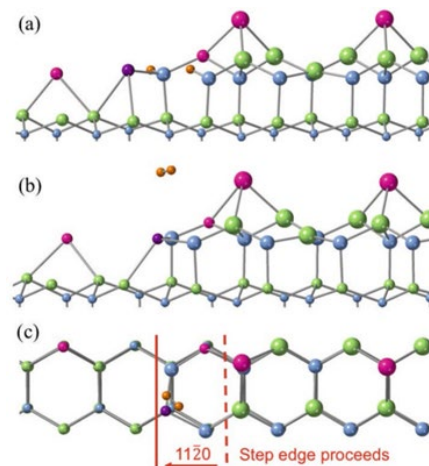


図 4: エピ成長の素過程。青が窒素原子、橙が H 原子、緑、赤紫、赤は Ga 原子。

構造界面に積層させたアモルファス SiN をメモリーユニットとして用いているが、そのメモリー機能発現のマイクロ機構はわかっていない。実験的にわかっているのは、アモルファス SiN は Si リッチ (N プア) であること、 10^{20} cm^{-3} 個以上の水素原子が含まれていること、の 2 点である。そこで SiN の結晶型である $\beta\text{-Si}_3\text{N}_4$ を例にとり、そこでの窒素原子空孔 (V_N) 構造と電子状態を DFT のハイブリッド近似によって調べた。最初の大きな発見は、ホストの SiN の伝導帯の性質である。図 5 は $\beta\text{-Si}_3\text{N}_4$ の伝導帯下端の電子軌道 (Kohn-Sham 軌道) である。軌道は構成原子の軌道から構成されているわけではなく、格子間に広がった floating 状態であることがわかった。SiN の充填率は 0.28 であり、floating 状態が出現するのは当然とも云える。

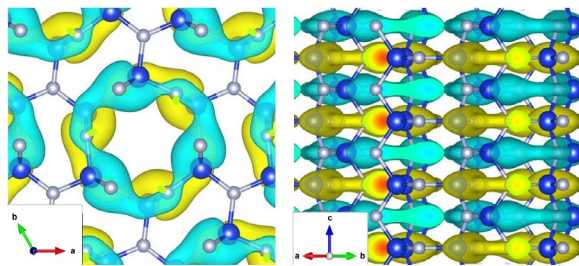


図 5: $\beta\text{-Si}_3\text{N}_4$ の伝導帯下端の電子軌道。(a) c 軸方向と (b) それに垂直な方向からの軌道の等値面 (青+, 黄-)。青と白の球はそれぞれ Si、N 原子。

SiN 中 N 原子は周囲の 3 つの Si 原子とボンドを形成している。したがって、 V_N が生じると最近接の 3 つの Si 原子からのダングリングボンド (db) が出現し、中性状態ではそこに 3 電子が局在する。3 つの db 状態は、原子構造の対称性から、全対称の状態ひとつと 3Si 原子間に節をもつ 2 つの状態に分裂し、前者は価電子帯中に、また後者はギャップ中に存在する (図 6)。したがって中性状態での 3 個の電子は全対称状態に 2 個、ギャップ中状態に 1 個の電子を収容する。ギャップ中のフェルミ準位の位置に依存して、これらのギャップ中状態は 0 個から 4 個までの電子を収容し、 V_N は +1 から -3 までの荷電状態を取る。

こうした荷電状態とは本質的に異なる状態が存在することが計算で判明した。それは局在 floating 状態というべきもので、図 7 にその軌道状態を示す。 V_N 最近接の 3Si 原子周囲の空間に浮かんでいるような状態である。db 軌道の成分はすでに別のギャップ中の電子状態となっているので、これはホスト中に存在した floating 状態 (図 5) の内のひとつが、窒素空孔付近の引力ポテンシャル (SiN 中の N は負に帯電しているため、その欠損は引力ポテンシャルを生む) を感じて局在したものである。電子準位のエネルギー位置としては、図 6 の赤線で示すように、電子捕獲により大きく下方シフトし、ギャップ中に出現する。これらの局在 floating 状態は、db 状態とは大きく異なり、電子の捕獲・放出に対して原子構造、ボンド配置の再構成が見られない。言い換えれば、捕獲・放出が可逆的であることを示しており、メモリー機能の発現には有利であることが示唆される。さらに、実際のサンプルには水素原子が多量に含まれている。そこで、 V_N と水素の複合体の構造と電子状態を DFT-ハイブリッド近似で調べた。その結果、H 原子は V_N と複合体を形成し、最安定な複合体では、+2、中性、-2 の荷電状態を取ることが判明した。以上の結果は、Phy. Rev. B 誌、Jpn. J. Appl. Phys. 誌上で公表された。

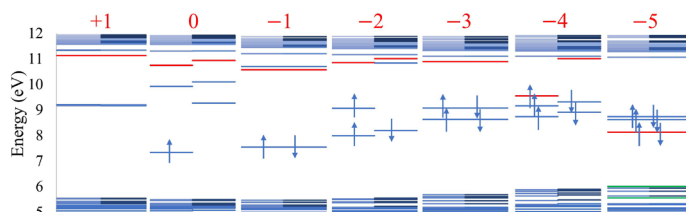


図 6: V_N によって誘起されたギャップ付近の電子状態。 V_N は +1 から -5 までの荷電状態を取り得る。6eV 以下、11 eV 以上の青線は、価電子帯、伝導帯に対応、他の青線は db 状態。赤線が新たに発見された局在 floating 状態。

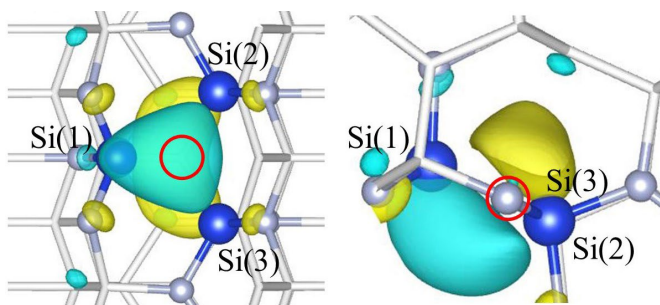


図 7: 局在 floating 状態の電子軌道。 V_N 近接の 3Si 原子の成す平面に垂直方向 (a) および平行方向 (b) からの軌道の等値面 (青+, 黄-)。青と白の球はそれぞれ Si、N 原子。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計29件（うち査読付論文 29件 / うち国際共著 3件 / うちオープンアクセス 1件）

1. 著者名 My Bui Kieu, Shiraishi Kenji, Oshiyama Atsushi	4. 巻 613
2. 論文標題 Insight into the step flow growth of gallium nitride based on density functional theory	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Applied Surface Science	6. 最初と最後の頁 155840 ~ 155840
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.apsusc.2022.155840	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 Chokawa Kenta, Shiraishi Kenji, Oshiyama Atsushi	4. 巻 133
2. 論文標題 Atomic and electronic structures of interfaces between amorphous $(Al_2O_3)_{(1-x)}(SiO_2)_x$ and GaN polar surfaces revealed by first-principles simulated annealing technique	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 065301 ~ 065301
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0132033	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 Nanataki Fugo, Iwata Jun-Ichi, Chokawa Kenta, Araidai Masaaki, Oshiyama Atsushi, Shiraishi Kenji	4. 巻 62
2. 論文標題 Microscopic physical origin of charge traps in 3D NAND flash memories	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Japanese Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 SC1038 ~ SC1038
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.35848/1347-4065/acaeb3	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 Nanataki Fugo, Shiraishi Kenji, Iwata Jun-ichi, Matsushita Yu-ichiro, Oshiyama Atsushi	4. 巻 106
2. 論文標題 Atomic and electronic structures of nitrogen vacancies in silicon nitride: Emergence of floating gap states	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 155201
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.106.155201	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 Boero Mauro, Imoto Fumihiro, Oshiyama Atsushi	4. 巻 6
2. 論文標題 Atomistic insight into the initial stage of graphene formation on SiC(0001) surfaces	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Review Materials	6. 最初と最後の頁 93403
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevMaterials.6.093403	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 Oshiyama Atsushi	4. 巻 19
2. 論文標題 Chickens or Eggs in the Atomic World: Structures and Electronic Properties of Defects in Semiconductors	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 JPSJ News and Comments	6. 最初と最後の頁 12
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7566/JPSJNC.19.12	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 Boero Mauro, My Bui Kieu, Shiraishi Kenji, Ishisone Kana, Kangawa Yoshihiro, Oshiyama Atsushi	4. 巻 599
2. 論文標題 An atomistic insight into reactions and free-energy profiles of NH ₃ and Ga on GaN surfaces during the epitaxial growth	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Applied Surface Science	6. 最初と最後の頁 153935 ~ 153935
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.apsusc.2022.153935	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 Kimura Tomoya, Chokawa Kenta, Shiraishi Kenji, Oshiyama Atsushi	4. 巻 106
2. 論文標題 Microscopic identification of stepped SiC(0001) and the reaction site of hydrogen-rich epitaxial growth	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 035309 ~ 035309
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.106.035309	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 Kusaba A., Kangawa Y., Kuboyama T., Oshiyama A.	4. 巻 120
2. 論文標題 Exploration of a large-scale reconstructed structure on GaN(0001) surface by Bayesian optimization	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Applied Physics Letters	6. 最初と最後の頁 021602 ~ 021602
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0078660	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 Chokawa Kenta, Shiraishi Kenji, Oshiyama Atsushi	4. 巻 119
2. 論文標題 Defect-free interface between amorphous (Al ₂ O ₃)(1-x)(SiO ₂) _x and GaN(0001) revealed by first-principles simulated annealing technique	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Applied Physics Letters	6. 最初と最後の頁 011602 ~ 011602
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0047088	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 Imoto Fumihito, Imada Masatoshi, Oshiyama Atsushi	4. 巻 3
2. 論文標題 Order-N orbital-free density-functional calculations with machine learning of functional derivatives for semiconductors and metals	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Physical Review Research	6. 最初と最後の頁 033198 ~ 033198
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevResearch.3.033198	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている(また、その予定である)	国際共著 -

1. 著者名 Seino Kaori, Oshiyama Atsushi	4. 巻 561
2. 論文標題 Microscopic mechanism of adatom diffusion on stepped SiC surfaces revealed by first-principles calculations	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Applied Surface Science	6. 最初と最後の頁 149927 ~ 149927
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.apsusc.2021.149927	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 D. Yoshio, F. Shintaku, Y. Inatomi, Y. Kangawa, J.-I. Iwata, A. Oshiyama, K. Shiraishi, A. Tanaka and H. Amano	4. 巻 -
2. 論文標題 Oxygen incorporation kinetics in vicinal m(10-10)-GaN growth by MOVPE	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physica Status Solidi - Rapid Research Letters	6. 最初と最後の頁 2000142 (1-4)
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 K. Chokawa, T. Narita, D. Kikuta, T. Kachi, K. Shiozaki, A. Oshiyama and K. Shiraishi	4. 巻 14
2. 論文標題 Absence of oxygen-vacancy-related deep levels in amorphous (Al ₂ O ₃) _{1-x} (SiO ₂) _x : First-principles exploration of gate oxides in GaN-based devices	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review Applied	6. 最初と最後の頁 014034(1-14)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevApplied.14.014034	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 T. Nakano, Y. Harashima, K. Chokawa, K. Shiraishi, A. Oshiyama, Y. Kangawa, S. Usami, N. Mayama, K. Toda, A. Tanaka, Y. Honda, and H. Amano	4. 巻 117
2. 論文標題 Screw dislocation that converts p-type GaN to n-type: Microscopic study on Mg condensation and leakage current in p-n diodes	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Applied Physics Letters	6. 最初と最後の頁 012105(1-5)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/5.0010664	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, Shiraishi Kenji, Oshiyama Atsushi	4. 巻 557
2. 論文標題 Gallium-gallium weak bond that incorporates nitrogen at atomic steps during GaN epitaxial growth	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Applied Surface Science	6. 最初と最後の頁 149542 ~ 149542
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.apsusc.2021.149542	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 K. Seino and A. Oshiyama	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 2020年
3. 雑誌名 Applied Physics Express	6. 最初と最後の頁 015506(1-4)
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 K. Seino and A. Oshiyama	4. 巻 1004
2. 論文標題 Microscopic Identification of Surface Steps on SiC by Density-Functional Calculations	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Material Science Forum (Trans Tech Publications)	6. 最初と最後の頁 145-152
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) なし	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 K. M. Bui, M. Boero, K. Shiraishi and A. Oshiyama	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 2020年
3. 雑誌名 Japanese Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 SGGK04(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 該当する

1. 著者名 F. Shintaku, D. Yosho, Y. Kangawa, J.-I. Iwata, A. Oshiyama, K. Shiraishi, A. Tanaka and H. Amano	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(1-4)
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 K. Seino and A. Oshiyama	4. 巻 101
2. 論文標題 Density-Functional Calculations for Structures and Energetics of Atomic Steps and their Implication for Surface Morphology on Si-face SiC Polar Surfaces	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Physical Review B	6. 最初と最後の頁 195307(1-10)
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1103/PhysRevB.101.195307	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, Okuda Takafumi, Kimoto Tsunenobu, Oshiyama Atsushi	4. 巻 11
2. 論文標題 Microscopic mechanism of carbon annihilation upon SiC oxidation due to phosphorus treatment: Density functional calculations combined with ion mass spectrometry	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 Applied Physics Express	6. 最初と最後の頁 121301 ~ 121301
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.7567/APEX.11.121301	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 122
2. 論文標題 Reaction Pathway of Surface-Catalyzed Ammonia Decomposition and Nitrogen Incorporation in Epitaxial Growth of Gallium Nitride	5. 発行年 2018年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry C	6. 最初と最後の頁 24665 ~ 24671
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.8b05682	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 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 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 Bui Kieu My, Iwata Jun-Ichi, Kangawa Yoshihiro, Shiraishi 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 -

〔学会発表〕 計12件 (うち招待講演 11件 / うち国際学会 9件)

1. 発表者名 A. Oshiyama
2. 発表標題 Computics approach to development of the next-generation semiconductor science
3. 学会等名 The 30th Anniversary Symposium of the Center for Computational Sciences at the University of Tsukuba (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 A. Oshiyama
2. 発表標題 Clarification of Microscopic Mechanisms of GaN Epitaxial Growth and Interface Formation by Density-Functional Calculations
3. 学会等名 20th International Conference on Metalorganic Vapor Phase Epitaxy (ICMOVPE XX) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 A. Oshiyama
2. 発表標題 Computics Approach in Science of Power Electronics
3. 学会等名 1st Int Conf on Computational Science and Data Analytics " COMDATA 202 (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 A. Oshiyama
2. 発表標題 Computics Approach to Dislocation-Impurity Complexes and Interface Characteristics of GaN Devices
3. 学会等名 31st Int Conf Defects in Semiconductors (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 A. Oshiyama
2. 発表標題 Computics Approach toward Clarification of Atomic Reactions during Epitaxial Growth of GaN
3. 学会等名 Int. Conf. Simulation of Semiconductor Processes and Devices (SISPAD) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 押山淳
2. 発表標題 大規模第一原理計算とデバイス・プロセスシミュレータ統合に向けて - パワー半導体を中心に -
3. 学会等名 電子情報通信学会 (招待講演)
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 A. Oshiyama
2. 発表標題 Structures, electron states and reactions on growing surfaces and at device interfaces of SiC and GaN
3. 学会等名 International Symposium on Wide Gap Semiconductor Growth, Process and Device Simulation 2021 (ISWGPDs2021) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 押山淳
2. 発表標題 パワー半導体エピタキシャル成長機構解明とデバイス界面制御に向けたコンピュータ・アプローチ
3. 学会等名 計算物質科学人材育成コンソーシアム (PCoMS) シンポジウム (招待講演)
4. 発表年 2021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 (Nagahama, Shiga Japan) (招待講演) (国際学会)
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 (神戸) (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 (Boston, USA) (招待講演) (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 Reaction Pathway of Surface-Catalyzed Ammonia Decomposition and Nitrogen Incorporation in Epitaxial Growth of Gallium Nitride
3. 学会等名 American Physical Society March Meeting (Boston, USA) (国際学会)
4. 発表年 2019年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

押山研究室 名古屋大学未来材料・システム研究所 http://ccs.engg.nagoya-u.ac.jp/oshiyama/ 名古屋大学未来材料システム研究所 押山研究室 http://ccs.engg.nagoya-u.ac.jp/oshiyama/

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	洗平 昌晃 (Araidai Masaaki) (20537427)	名古屋大学・未来材料・システム研究所・助教 (13901)	
研究分担者	松下 雄一郎 (Matsushita Yu-ichiro) (90762336)	東京工業大学・物質・情報卓越教育院・特任准教授 (12608)	

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
---------	---------