

応用物理学会関西支部

平成 26 年度第 2 回講演会

「シミュレーションが先導する
エレクトロニクス・フォトニクス研究
～関西発イノベーションと若手からの発信～」

主 催：応用物理学会関西支部

共 催：神戸大学自然科学系先端融合研究環

スマート物質・材料工学重点研究チーム

日 時：2014 年 11 月 12 日（水）13：00～18：00（懇親会 ～20：00 頃）

場 所：神戸大学瀧川記念学術記念交流会館



The Japan Society of Applied Physics

プログラム

「シミュレーションが先導するエレクトロニクス・フォトニクス研究
～関西発イノベーションと若手からの発信～」

【講演会】

開会（於：神戸大学瀧川記念学術記念交流会館 2階 大会議室）

13:00～13:05 「開会の辞」

応用物理学会関西支部 支部長（京都大学） 斧 高一

13:05～13:10 「神戸大学の紹介」

応用物理学会関西支部 支部幹事（神戸大学） 相馬 聡文

第1部：講演の部（於：神戸大学瀧川記念学術記念交流会館 大会議室）

13:10～13:40 I-1 金属ナノ構造と生体物質複合系の光誘起ダイナミクス

大阪府立大学大学院理学系研究科 飯田 琢也
大阪府立大学ナノ科学・材料 研究センター 床波 志保

13:40～14:10 I-2 FDTD法を用いたフォトリック・ナノ構造の電磁界解析

京都大学大学院工学研究科 田中 良典、浅野 卓、野田 進

14:10～14:40 I-3 第一原理計算によるNi触媒上の水素製造反応機構解析
及び触媒設計

関西学院大学理工学部 小倉 鉄平

14:40～15:10 I-4 第一原理計算を用いたナノデバイスの機能予測

筑波大学計算科学研究センター、さきがけ 小野 倫也

15:10～15:40 I-5 SiCパワーデバイスにおけるデバイスシミュレーション

三菱電機株式会社 先端技術総合研究所 大塚 健一

(15:40～15:50 神戸大学瀧川記念学術記念交流会館 1階ロビーへ移動)

第2部：ポスター発表の部

(於：神戸大学瀧川記念学術記念交流会館 1階ロビー)

15:50～17:50 ポスター発表

関西の本講演会関連分野の若手研究者一同

※ポスター発表者は番号を確認の上、会場内のポスターボードへポスターの貼り付けをお願いします。以下題目には第一著者のみ記しております。

- P-01 多孔質シリコン基板上に析出した ZnS 薄膜の蛍光及びその緩和過程
神戸大学 峯山 裕貴
- P-02 利得媒質層を含むプラズニック多層膜粒子の表面プラズモン増幅特性
神戸大学 大瀬 昌明
- P-03 励起子量子ビートを利用した光変調に対する非線形分極の効果
神戸大学 円山 祐輝
- P-04 フォトニック結晶を用いた小型・広帯域合分波器の設計と
テラヘルツ帯における実現
大阪大学 矢田 将大
- P-05 FDTD 電磁場計測を用いた金属メッシュデバイスにおける Dip 構造の解析
大阪市立大学 江原 宜伸
- P-06 誘電体球を用いた電磁波吸収体の提案
大阪大学 花井 研一郎
- P-07 極微量分子の電気化学検出に向けたナノスケールレドックスサイクリングの
モンテカルロシミュレーション
立命館大学 朱 鵬
- P-08 バイオセンサ集積回路に向けたオンチップ電極アレイの評価
立命館大学 朴 康太
- P-09 強誘電体の相転移付近における電気熱量効果の解析
大阪府立大学 松下 裕司
- P-10 強誘電体トンネル接合素子における抵抗変化モデルの構築
大阪府立大学 後田 敦史
- P-11 Development of distributed parameter model for MEMS piezoelectric
energy harvester
大阪府立大学 Ali M. Eltanany
- P-12 第一原理計算による HfO₂/SiO₂/Si 界面の原子構造と酸素空孔による
影響の解明
大阪大学 松岡 佳史
- P-13 Effect of SiC stacking on the electronic properties of the SiC/SiO₂ interface
大阪大学 Christopher Kirkham
- P-14 フォノンのモンテカルロ法を用いた FinFET の排熱機構の解析
大阪大学 Indra Nur Adisusilo
- P-15 平坦形 2 次元結晶ナノリボン FET の性能比較
大阪大学 クレンデネン 啓示

- P-16 モンテカルロ法を用いた Si ダブルゲート構造 MOSFET の
準バリスティック輸送係数の抽出 神戸大学 石田 良馬
- P-17 絶縁基板上グラフェンの電子輸送シミュレーション
神戸大学 平井 秀樹
- P-18 ディラック電子とシュレディンガー電子をキャリアとする FET の
性能比較シミュレーション 神戸大学 田中 未来
- P-19 歪み誘起疑似磁場を利用したグラフェン FET のスイッチング性能に関する
理論解析 神戸大学 上山 真之
- P-20 AlGa_N/Ga_N HEMT における Si_N/AlGa_N 界面の界面準位の評価と解析
三菱電機株式会社 倉橋 健一郎

【懇親会】 18:00～20:00 頃（於：神戸大学瀧川記念学術記念交流会館 食堂）
懇親会にて優秀なポスター発表について表彰します(最優秀賞 1 名、優秀賞 2 名)。

金属ナノ構造と生体物質複合系の光誘起ダイナミクス

Light-induced Dynamics of Complex System of

Metallic-Nanostructures and Biomaterials

大阪府大院理¹, 大阪府大ナノ科学・材料セ² ○飯田 琢也¹, 床波 志保²

Grad Sch. Sci.¹, & N2RC², Osaka Prefecture Univ., °Takuya Iida¹, Shiho Tokonami²

E-mail: t-iida@p.s.osakafu-u.ac.jp

生体中のナノ構造は環境からの「熱揺らぎ」の下でその時空間的対称性を制御して多様な機能を発現している。例えば、生体分子モーターに注目すると ATP 添加による構造変化で 1 次元ポテンシャルの空間的対称性を繰り返し変化させ熱揺らぎの効果を巧みに利用して物質輸送を行っているという報告もある[1]。また、光合成細菌は非偏光の太陽光を効率良く捕集できるよう回転対称性の高い円環状色素分子配列から成る 2 次元の光捕集アンテナを有しており[2]、色素間の相互作用を微調整して生息地で異なる太陽光スペクトルに対し最適な光吸収帯を形成しているとの報告もある。さらに、細胞内に存在するベシクルと呼ばれる球対称なバブル状構造は 3 次元的に表面構造を変化させ生体維持のために必要な物質を蓄積・放出する機能を有している[3]。生体系は多種多様なナノ構造から成るため一括りに議論することは難しいが、物理的・化学的な外部刺激によりポテンシャルの時空間構造を変調してランダムな「熱」のエネルギーをナノ空間での輸送・配列制御・構造変化に利用している上記の系の共通点として挙げられる。我々はこのような生体系が織り成す多彩な現象にならば、従来ナノ物質操作の大敵と考えられてきた「熱」を積極的に利用した逆転の発想に基づく「生体模倣ナノ光エンジニアリング」の開拓を目指した研究を推進している[4-10]。特に、本講演では揺らぎや熱の効果が顕著な常温環境でも光操作可能な金属ナノ粒子を対象とし、その高密度集積化のための指導原理開拓や、高密度の金属ナノ粒子集合体と生体物質の複合系における光学応答・光誘起ダイナミクスの解明を行った最近の理論・実験の共同研究の成果について紹介する。主なトピックスは以下の通りである。

A) 光照射下でのナノ物質集団の運動評価、配列形成評価の理論手法開発(時間領域: 光誘起力ナノ動力学法(LNDM)[4,5]、エネルギー領域: 光誘起力ナノ・メトロポリス法(LNMM)[6,7])

B) 高密度金属ナノ粒子集合系の光学応答理論開発と局在表面プラズモンの協力現象による新規 DNA 検出の原理開拓[8,9]

C) 光誘起力と光発熱効果によるマクロ相転移制御と微量タンパク質検出の原理開拓[10]

[1] M. Iwaki, A. Iwane, T. Shimokawa, R. Cooke and T. Yanagida: Nat. Chem. Biol. **5**, 403 (2009).

[2] S. Bahatyrova, et al., Nature **430**, 1058 (2004).

[3] T. Harada, D. E. Discher, Nature **471**, 172 (2011).

[4] T. Iida, J. Phys. Chem. Lett., **3**, 332 (2012)

[5] M. Tamura, T. Iida, Nano Lett., **12**, 5337 (2012).

[6] S. Ito, T. Iida, S. Tokonami, et al., Sci. Rep. **3**, 3047 (2013).

[7] M. Tamura, S. Ito, S. Tokonami, T. Iida, Res. Chem. Intermed., **40**, 2303 (2014).

[8] S. Tokonami, T. Iida, et al., J. Phys. Chem. C, **117**, 15247 (2013).

[9] S. Tokonami, T. Iida, et al., J. Phys. Chem. C, **118**, 7235 (2014).

[10] Y. Nishimura, S. Tokonami, T. Iida, et al., J. Phys. Chem. C, **118**, 18799 (2014).

FDTD 法を用いたフォトニック・ナノ構造の電磁界解析 Electromagnetic analyses of photonic nanostructure by FDTD methods

京大院工 °田中良典, 浅野卓, 野田進

Kyoto Univ., °Yoshinori Tanaka, Takashi Asano, and Susumu Noda

E-mail: ytanaka@qoe.kuee.kyoto-u.ac.jp

フォトニック結晶¹⁾は、光の波長程度の周期的な屈折率分布を有する光ナノ構造であり、従来にはない新たな光制御を実現可能な構造として注目を集めている。フォトニック結晶では、周期的な屈折率分布により光子に対して自由空間とは大きく異なるフォトニックバンド構造を形成する点に大きな特徴があり、光の伝搬そのものを禁止するフォトニックバンドギャップの形成や、 Γ 点バンド端における大面積共振モードの形成などの興味深い性質を有している。このような性質を利用することで、光波長程度の微小サイズの光ナノ共振器^{2,3)}や、大面積で単一モード発振が可能な面発光レーザー⁴⁾などの光素子の実現、さらには物質からの発光の増強や抑制^{5,6)}などの興味深い物理現象の観測など、様々な機能が得られている。

フォトニック結晶中における現象を理解する、あるいはフォトニック結晶を設計するためには、シミュレーションによる解析が不可欠である。我々は主に、光を含む電磁波に対する基礎方程式である Maxwell 方程式を、時間・空間領域で数値的に解く手法である時間領域差分法(FDTD 法)⁷⁾を用いた計算を行っている。本手法は、計算量は多くなるものの、任意の形状のフォトニック結晶構造に対しての解析を、比較的容易に行うことが可能であるという点に大きな特長がある。

フォトニック結晶に対する FDTD 解析の例を以下に示す。図 1 は、フォトニック結晶を利用した光ナノ共振器の解析結果である⁸⁾。同図に、フォトニック結晶中の光の電磁界分布を示しているが、光の波長程度の微小な領域に局在されていることが分かる。本構造に対する光閉じ込めの強さを計算したところ、 Q 値にして 2,000 万、格子寿命換算で 16 ナノ秒という、極めて高い光閉じ込めの性能を有することが明らかになった。図 2 は、フォトニック結晶を導入した、薄膜微結晶 Si 太陽電池の解析結果⁹⁾である。図 2(a)に示すような断面形状を有する太陽電池構造に対する光吸収スペクトルを計算したところ、図 2(b)に示すような結果が得られた。標準太陽光に対する短絡電流密度を計算すると、Si 層の厚さが 500 nm 程度と非常に薄いにもかかわらず、25 mA/cm² を超える電流が得られることが分かった。当日は、これらの計算結果に対応する実験結果についても合わせて報告する。

[文献] 1) 野田進, 応用物理, **74**, 147-159 (2005). 2) Y. Akahane, *et al.*, *Nature*, **425**, 944-947 (2003). 3) B. S. Song, *et al.*, *Nature materials*, **4**, pp. 207-210 (2005). 4) M. Imada, *et al.*, *Appl. Phys. Lett.*, **75**, 316-318 (1999). 5) S. Ogawa, *et al.*, *Science*, **305**, 227-229 (2004). 6) M. Fujita, *et al.*, *Science*, **308**, 1296-1298 (2005). 7) K. S. Yee, *IEEE Trans. Antennas & Propagat.*, **AP-14**, 302-307 (1966). 8) Y. Takahashi, *et al.*, *Optics Express*, **15**, 17206-17213 (2007). 9) 田中他, 2014年春応物18p-E16-4.

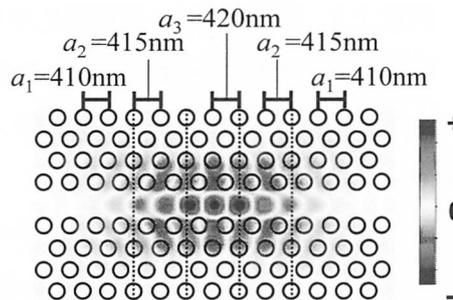


図 1: フォトニック結晶ナノ共振器の解析例:共振器中に閉じ込められる光の電界分布を示す。本共振器の理論 Q 値は 2,000 万、格子寿命換算で 16 ナノ秒という高い性能が得られた。

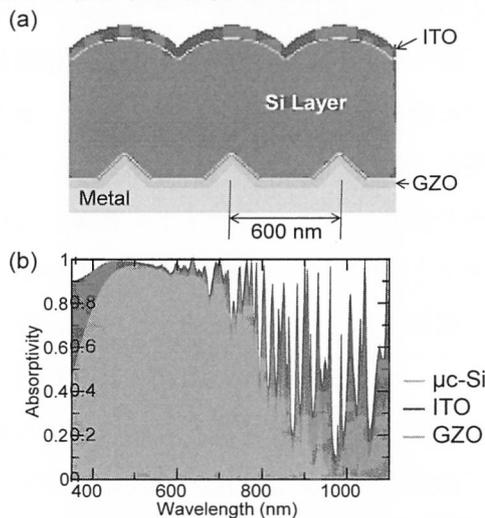


図 2: フォトニック結晶を導入した太陽電池構造の解析例: (a)に示すような断面をもつ構造に対して、各層の光吸収スペクトルを計算した結果を(b)に示す。光電変換に寄与する Si 層の吸収スペクトルから電流値を見積もると 25 mA/cm² を超える値が得られた。

第一原理計算による Ni 触媒上の水素製造反応機構解析及び触媒設計

Reaction Mechanism Analysis and Catalyst Design for Hydrogen Production on Ni

Catalysts based on First-Principles Calculations

関学大理工 小倉 鉄平

Kwansei Gakuin Univ., Teppei Ogura

E-mail: t-ogura@kwansei.ac.jp

メタン水蒸気改質 (SMR) は水素生成の主方法の一つであるが、現行の Ni 触媒では炭素析出による触媒活性の低下が問題となっている。近年、他の金属を微量混入し触媒表面の活性を変化させる試みが行われているが、その際、炭素析出耐性を高くすると同時に改質活性は維持しなくてはならない。探索を効率よく行うためには、まず始めに改質反応での律速過程や炭素析出の前駆体の同定など、Ni 表面での改質反応機構そのものを詳細に理解する必要がある。そこで、我々は第一原理計算を用いて SMR 表面反応機構を理論的に構築し、詳細な反応解析を行った。

エネルギー計算には平面波基底関数系-擬ポテンシャル法に基づいた密度汎関数法(DFT)計算ソフト DACAPO 及び CASTEP を用いた。交換相互作用は RPBE もしくは PBE を用いて見積もり、3 層 (下 2 層は固定)、2x2 のスラブに周期境界条件を課したモデルを使用した。Ni(111), (100), (211) 各表面における主な CH_n と OH_m の表面化学種及びそれらの反応の遷移状態構造を決定し、有限差分法を用いて振動解析を行うことで実条件 (800°C、10bar) における熱力学データを算出した。遷移状態に関しては nudged elastic band 法で求めた構造を初期構造として更に最適化を行っている。さらに遷移状態理論を用いて全ての速度定数を算出し、SMR 表面反応機構を構築した。逆反応の速度定数は熱力学データにより求めた平衡定数から計算した。

得られた反応機構を用いて連続槽型反応器モデルによる反応シミュレーションを行い、いくつかの既往の実験結果と比較した所、総じて良い一致が得られた。そこで、反応流れ解析により主要な SMR 反応経路を明らかにすると共に、感度解析により SMR 反応の律速過程の特定を行った。その結果、ステップサイトを模擬している(211)面において、メタンが炭素原子にまで分解し酸素原子と反応して一酸化炭素となるのが主要反応経路である事が分かった。一方で(100)面での反応も無視できる割合ではなく、高温になると(100)面は更に重要性を増す事も明らかにした。律速過程の一つは実験的によく知られているメタンのステップサイトでの解離吸着反応であったが、炭素原子と酸素系吸着種との結合反応も同様に律速過程である事が示され、SMR は実験条件によって律速過程が異なる複雑な反応機構である事が分かった。

最後に第一原理計算による触媒設計の一例として、Ag を 25%表面添加した Ag/Ni 表面についても検討を行った。上の解析で明らかになった律速反応の反応エネルギーや活性化エネルギーの合金化による変化を算出し、合金表面の特性変化との関連付けを行った。その結果、SMR 活性や炭素析出耐性を予測するには、 d バンドセンターの変化だけでなく添加金属の立体障害の大きさも見積もる必要があることを明らかにした。

第一原理計算を用いたナノデバイスの機能予測

First-Principles Study on Functionality of Nanodevices

筑波大計算科学, さきがけ 小野 倫也

Center for Computational Sciences, Univ. of Tsukuba, JST-PRESTO, Tomoya Ono

E-mail: ono@ccs.tsukuba.ac.jp

将来の IT 産業を支える半導体デバイスや光通信デバイス製造産業では、デバイスの微細化や高機能化にともない、原子・分子サイズの細線を利用したデバイスの開発が必要とされている。次世代のナノデバイスの候補として、フラーレンやナノチューブを用いた分子デバイス、現在の Si 系トランジスタをさらに微細化したデバイスや Ge 系の半導体を用いたデバイス、電子に加えてスピンも制御するスピントロニクスデバイスが注目されており、デバイスの高性能化にはこれらの開発が重要であることは言うまでもない。このようなサイズの素子を持ったデバイスを作製するには、原子・分子の一つひとつの性質から、組織化されたナノ構造体の性質までを明らかにし、得られた知見をもとにしてデバイスの設計を行わなければならない。ところが、原子・分子レベルの物理・化学現象は実験方法や実験条件に左右されることが多いため、正確な物理・化学現象解明のためには、実験による解析に加えて理論計算による解析も必要である。

このような背景から、これまでにナノ構造の電子状態や電気伝導特性を量子力学の第一原理に基づいて計算する方法が数々提案されてきた。我々のグループでは、独自に実空間差分法に基づく第一原理電子状態計算法、そして実空間差分法を伝導特性計算に応用した Overbridging boundary-matching 法[1]を開発した。実空間差分法は、京コンピュータのような超並列計算機での実行に適したアルゴリズムになっている。そのため、将来、大規模なモデルを用いて分子デバイス、半導体デバイスやスピントロニクスデバイスなどの機能解析・予測シミュレーションを実現する可能性を秘めている。我々のグループでは、これらの方法に基づく計算コードを作成し、RSPACE と名付けている。

本講演では、RSPACE を用いて半導体基板の熱酸化過程を調べた例[2]や、MOS 界面の界面欠陥がリーク電流に与える影響を調べた例[3]など、エレクトロニクスデバイス開発に関連するシミュレーションを紹介する。

- [1] K. Hirose, T. Ono, Y. Fujimoto, and S. Tsukamoto, First-Principles Calculations in Real-Space Formalism, Electronic Configurations and Transport Properties of Nanostructures (Imperial College, London, 2005).
- [2] S. Saito, T. Hosoi, H. Watanabe, and T. Ono: Appl. Phys. Lett. **95**, 011908 (2009).
- [3] T. Ono: Phys. Rev. B **79** 195326 (2009).

SiC パワーデバイスにおけるデバイスシミュレーション

Device Simulation in SiC Power Devices

三菱電機(株) 先端技術総合研究所 大塚 健一

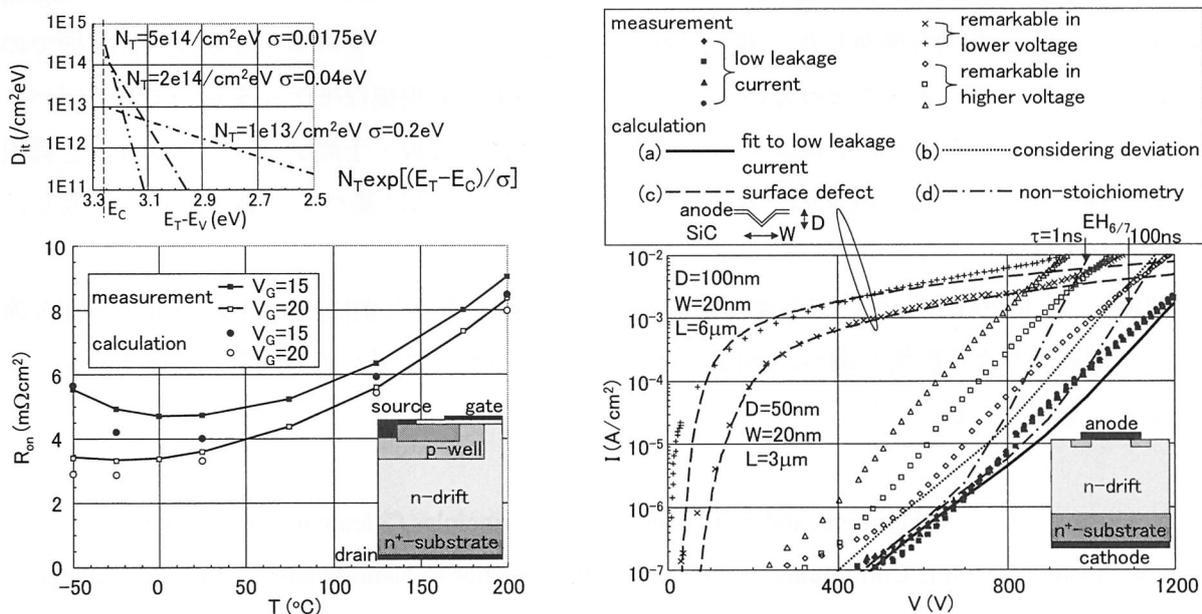
Advanced Technology R&D Center, Mitsubishi Electric Corporation, Ken-ichi Ohtsuka

E-mail: Otsuka.Kenichi@dn.MitsubishiElectric.co.jp

デバイスシミュレーションは素子設計・評価や要素技術構築の目標設定において重要である。市販の TCAD は Si-LSI をメインターゲットとしている場合が多いため、低損失パワーデバイスとして注目される SiC 半導体¹⁾へ適用するには、物理モデルや物性定数について未知の部分があることや真性濃度が小さいことによる計算の収束不良など、考慮を要する部分が多い。本講演では、素子中の電界分布やスイッチング波形の検討に加えて、測定結果との対比においては考慮せざるを得ない界面準位や市販エピ結晶中の欠陥の影響についての検討結果を報告する。

MOSFET のゲート絶縁膜は熱酸化と窒化により形成されるが、界面特性は十分には把握されていない。縦型 MOSFET のオン抵抗 R_{on} の温度変化に関して、同じチャネル構造を有する横型 TEG の I_D - V_G 特性における 3 つのゲート電圧領域の傾きから伝導帯下の界面準位成分 D_{it} (左図上)を算出し、得られた D_{it} 成分を足し合わせて特性計算を行うことで、左図下に示すように測定結果と対応させることができた²⁾。

右図はショットキ障壁ダイオードのリーク電流に関する結果である。drift 層のドーピング・厚のウエハ面内分布を考慮した場合(b)よりも大きなリーク電流を示す素子が存在するが、温度依存性が小さく、低電圧側から顕著で高電圧側では飽和する電流成分は(c)で示すように表面欠陥の考慮によって、高電圧側で顕著となる電流成分は(d)で示すように non-stoichiometry 起因の欠陥の考慮によって説明できることがわかった³⁾。また、pin ダイオードの順方向の温度依存性に関して、積層欠陥を微傾斜極薄歪量子井戸として drift 層中に記述することで測定結果と対応したことについても報告する⁴⁾。



- 1) K. Ohtsuka, Extended Abstracts of 32nd Electronic Materials Symposium, Moriyama, 2013, p. 279.
- 2) K. Ohtsuka, S. Hino, A. Nagae, R. Tanaka, Y. Kagawa, N. Miura, S. Nakata, Mater. Sci. Forum 778-780 (2014) 993.
- 3) K. Ohtsuka, T. Nakatani, A. Nagae, H. Watanabe, Y. Nakaki, Y. Fujii, K. Fujihira, S. Nakata, N. Yutani, Mater. Sci. Forum 725 (2012) 53.
- 4) K. Ohtsuka, A. Furukawa, R. Tanaka, S. Yamamoto, S. Nakata, Phys. Status Solidi C 10 (2013) 1409.

ポスター発表要旨

P-01 多孔質シリコン基板上に析出した ZnS 薄膜の蛍光及びその緩和過程

峯山 裕貴、牧 秀志、水畑 穰

神戸大学大学院工学研究科

ZnS は青色の蛍光を示し、Si と高い格子接合性を有することから安価な新規青色 LED 材料として期待される。発光の高強度化には高次元構造基板への蛍光体薄膜の形成による励起断面積の大面積化が有効であると考えられ、多孔質シリコン基板の細孔内へ析出した ZnS 薄膜はシリコンウエハ基板上に析出した場合と比較して蛍光強度が著しく増大することを見出した。本発表では ZnS 薄膜の蛍光強度における基板形状依存性について報告する。

P-02 利得媒質層を含むプラズニック多層膜粒子の表面プラズモン増幅特性

大瀬 昌明、今北 健二、藤井 稔

神戸大学大学院工学研究科

利得媒質中の金属微粒子では、プラズモンエネルギーの損失が利得媒質により補償され、表面プラズモンの増幅(SPASER)が起こることが知られている。光の回折限界よりも微小な領域で光を増幅することが可能であり、バイオイメージング等への応用が期待されている。本研究では、Mie 散乱理論を用いて金属と利得媒質を交互に積層した多層膜粒子の光学特性を計算し、コアシェル間のプラズモンモードの相互作用により増幅閾値が下がることを見出した。

P-03 励起子量子ビートを利用した光変調に対する非線形分極の効果

円山 祐輝、小島 磨、喜多 隆

神戸大学大学院工学研究科電気電子工学専攻

超高速コヒーレント振動現象である励起子量子ビートは、二準位を同時に励起することで発生する。振動数は二準位間のエネルギー差で決定されるため、ナノ構造半導体では容易に制御可能である。このことを利用して、この量子ビートを超高速光スイッチへと応用するところを、我々は提案しており[1]、超低消費電力な素子の実現の可能性を報告している[2]。この発表では、非線形分極の観点から光変調について議論する。

[1]O. Kojima et al., JPSJ 77, 044701 (2008). [2]O. Kojima et al., J. Phys. D 47, 105101 (2014).

P-04 フォトニック結晶を用いた小型・広帯域合分波器の設計とテラヘルツ帯における実現

矢田 将大、富士田 誠之、永妻 忠夫

大阪大学基礎工学研究科

微細構造フォトニック結晶を用いた光デバイスの小型・集積化が期待されている。本研究では、テラヘルツ波帯通信など広帯域動作が要求される応用へ向けた、小型合分波器の設計を行った。電磁界シミュレーションを用いた検討の結果、波長程度の微小な大きさを保ったまま、比帯域で約 2% という、先行研究の約 7 倍の動作帯域が得られた。その構造を 0.3 THz 帯で作製し、小型・広帯域フォトニック結晶合分波器の動作の実証と通信実験に成功した。

P-05 FDTD 電磁場計測を用いた金属メッシュデバイスにおける Dip 構造の解析

江原 宜伸¹⁾、藤村 拓矢¹⁾、堤 太志¹⁾、菜嶋 茂喜¹⁾、細田 誠¹⁾、
近藤 孝志²⁾、神波 誠治²⁾、鈴木 哲仁³⁾、小川 雄一³⁾
¹⁾大市大院工、²⁾村田製作所、³⁾京大院農

近年バイオセンシングへの応用が期待されている金属メッシュデバイスの Dip 構造に対し、我々はその発生に関係する表面波の存在と発生機構を調べている。本研究では FDTD 電磁界シミュレーションを用いることで、様々な構造パラメータにおける Dip 発生周波数を調べた。発表では、各構造パラメータの影響についての考察結果を報告する。

P-06 誘電体球を用いた電磁波吸収体の提案

花井 研一郎¹⁾、高野 恵介¹⁾、宮丸 文章²⁾、中嶋 誠¹⁾、
萩行 正憲¹⁾、Riad Yahiaoui³⁾
¹⁾阪大レーザー研、²⁾信州大学理学部、³⁾リモージュ大学

近年、金属共振器を代表とするメタマテリアルを用いた薄膜型の電磁波吸収体が提案されている。一方、誘電体球の Mie 共鳴も共振器配列として用いることができる。作製も容易でかつ等方的な構造をもつことが金属共振器に対する優位性として挙げられる。今回はテラヘルツ領域で 100 以上の誘電率を持つ TiO₂ を試料とし、テラヘルツ時間領域分光法による反射率測定と、電磁界シミュレーションを用いて吸収効率について考察を行った。

P-07 極微量分子の電気化学検出に向けたナノスケールレドックスサイクリングのモンテカルロシミュレーション

朱 鵬¹⁾、中里 和郎²⁾、宇野 重康¹⁾

¹⁾立命館大学理工学研究科、²⁾名古屋大学工学研究科

レドックスサイクリングを用い、高感度、高速応答、微量サンプル計測可能な電気化学センサが注目されている。そして、拡散方程式が電気化学分析でよく使われている。しかし、検出対象濃度が極めて薄い場合、濃度分布が拡散方程式で扱うことが適切かどうかはまた証明されていない。本研究では、検出対象を粒子として扱い、各粒子が溶液中にブラウン運動で動かして、それら粒子のポジションや電荷量変化から定常電流を計算する。そして、この定常電流値と拡散方程式で解いた電流値を比較した。

P-08 バイオセンサ集積回路に向けたオンチップ電極アレイの評価

朴 康太、宇野 重康

立命館大学理工学研究科

CMOS 集積回路を用いたバイオセンシング技術は大型装置を用いて行われているバイオセンシングを携帯可能なサイズの装置で実現する可能性を持っている。CMOS チップ上に電極を配列し、多点で同時に生体分子を測定する研究が盛んに行われている。中でも電流検出型バイオセンサではレドックスサイクリングを用いることで感度の向上されることが報告されている。本研究ではチップ上の電極の電流検出に最適な構造についてシミュレーションを用いて評価と考察を行った。

P-09 強誘電体の相転移付近における電気熱量効果の解析

松下 裕司、吉村 武、藤村 紀文

大阪府立大学大学院工学研究科

電気双極子を有する物質においては、その整列状態を変化させるとエントロピーの変化とそれに伴う温度変化が生じる。これは電気熱量効果と呼ばれ、固体冷却素子としての応用が期待されている。本研究では、キュリー温度付近で大きな電気熱量効果が得られる強誘電体に注目した。現象論モデルおよび擬スピンを想定した Ising model を用いて、相転移の次数と電気熱量効果の大きさの関係について議論する。

P-10 強誘電体トンネル接合素子における抵抗変化モデルの構築

後田 敦史、山田 裕明、吉村 武、藤村 紀文

大阪府立大学大学院 工学研究科 電子物理工学分野

強誘電体トンネル接合 (FTJ) 素子は、自発分極の方向によってトンネル電流の変調が可能であり不揮発性メモリへの応用が期待されている。本研究では、金属/強誘電体/金属構造に比べ大きな ON/OFF 比が得られている金属/強誘電体/半導体構造を有する FTJ に着目した。自発分極による半導体の表面電位の変化を組み込んだトンネル電流の計算から、この素子の抵抗変化モデルについて議論する。

P-11 Development of distributed parameter model for MEMS piezoelectric energy harvesters

Ali M. Eltanany^{1), 2)}, T. Yoshimura¹⁾, and N. Fujimura¹⁾

¹⁾ Graduate School of Engineering, Osaka Prefecture University, Japan

²⁾ Department of Physics, Faculty of Science, Minia University, Egypt

Piezoelectric energy harvesting gains much attention recently as an alternative source to power small electronic components. Here, the theoretical distributed parameter model of MEMS cantilever beam with attached mass is discussed. In almost of previous studies that use single degree of freedom (SDOF) model, there is an overestimation and underestimation of the electrical parameter. In this study, distributed parameter model is developed, which will give accurate results and has ability of modeling any structure under random vibrations considering its nonlinearity.

According to the dimensional consideration of device and using the bead model, it is suggested that the beam mass system has high mechanical quality factor. An acceptable theoretical normalized voltage and power amplitudes calculated at the matching resistance.

P-12 第一原理計算による HfO₂/SiO₂/Si 界面の原子構造と酸素空孔による影響の解明

松岡 佳史¹⁾、小野 倫也²⁾

¹⁾大阪大学大学院工学研究科、²⁾筑波大学計算科学研究センター

DFT に基づく第一原理計算を用いて、HfO₂/SiO₂/Si 界面の全エネルギーと電子構造を調べ、SiO₂ 薄膜層の結晶構造の違いや HfO₂/SiO₂ 界面構造の違いが界面原子構造の安定性に大きく寄与することを発見した。また、HfO₂/SiO₂/Si 界面構造の、HfO₂/SiO₂ 界面付近の酸素空孔欠陥の形成エネルギーを求めたところ、酸素空孔は HfO₂/SiO₂ 界面に最も形成しやすく、その欠陥準位は Si 基板のバンドギャップ付近に現れることが判明した。

P-13 Effect of SiC stacking on the electronic properties of the SiC/SiO₂ interface

Christopher Kirkham¹⁾、Tomoya Ono²⁾

¹⁾Grad. Schl. Eng., Osaka Univ.、²⁾CCS, Univ. Tsukuba

Silicon Carbide is a wide band-gap semiconductor material that can be used for high temperature and power electronic devices. However, its use in practical devices has been hampered by the low channel mobility of the SiC/SiO₂ interface. This has been attributed to a variety of defects in the interfacial region.

In this work we performed electronic structure calculations using the RSPACE code to investigate the effect of SiC stacking on the electronic properties of this interface, both in the presence and absence of defects. These defects included excess C and O atoms, as examined in prior studies.

P-14 フォノンのモンテカルロ法を用いた FinFET の排熱機構の解析

Indra Nur Adisusilo、久木田 健太郎、鎌倉 良成
大阪大学工学研究科

熱輸送特性はナノスケールデバイスの信頼性と性能を決定する重要な要因である。我々は以前、フォノンのボルツマン輸送方程式をモンテカルロ法で解くシミュレータを開発したが、今回これを用いて FinFET の排熱機構を解析した。その結果、熱伝導特性にフォノン準弾道輸送効果が大きく影響していることが分かった。従来から用いられてきた熱伝導方程式や等価熱回路モデルとの比較を示しながら、機構について議論を行う。

P-15 平坦形 2 次元結晶ナノリボン FET の性能比較

クレンデネン 啓示¹⁾、森 伸也^{1),3)}、土屋 英昭^{2),3)}

¹⁾大阪大学工学研究科、²⁾神戸大学工学研究科、³⁾JST CREST

本研究では、非平衡グリーン関数法を用いた理論計算に基づき、グラフェンナノリボン(GNR)、シリセンナノリボン(SiNR)、ゲルマネンナノリボン(GeNR)をチャンネルに用いた電界効果型トランジスタ(FET)の性能比較を行った。ゲート長が 5nm から 15nm の FET の電流電圧特性を比較した結果、有効質量の軽い GNR-FET のオン電流が最大となることが分かった。一方、GNR-FET は、トンネル効果のため、他のチャンネル材料に比べて、サブスレッショルド特性が劣化することも分かった。

P-16 モンテカルロ法を用いた Si ダブルゲート構造 MOSFET の準バリスティック輸送係数の抽出

石田 良馬¹⁾、木場 隼介¹⁾、土屋 英昭^{1),2)}、鎌倉 良成^{2),3)}、
森 伸也^{2),3)}、宇野 重康^{2),4)}、小川 真人¹⁾

¹⁾神戸大学大学院工学研究科、²⁾JST CREST、

³⁾大阪大学大学院工学研究科、⁴⁾立命館大学理工学部

本発表では、モンテカルロシミュレーションを用いて Si ダブルゲート構造 MOSFET の準バリスティック輸送係数を抽出し、物理的極限にまで微細化された Si MOSFET のデバイス特性を議論する。特に、チャンネル長が 10 nm 以下になると、チャンネルの薄層化によってチャンネル膜厚ゆらぎ散乱が増大し、MOSFET のバリスティック効率、すなわちオン電流が急激に低下することを明らかにする。また、準バリスティック輸送係数のゲート及びドレイン電圧依存性についても検討を行う。

P-17 絶縁基板上グラフェンの電子輸送シミュレーション

平井 秀樹¹⁾, 土屋 英昭^{1), 3)}, 鎌倉 良成^{2), 3)}, 森 伸也^{2), 3)}, 小川 真人¹⁾

¹⁾神戸大工, ²⁾阪大工, ³⁾JST CREST

グラフェンは室温で高い電子移動度を持つため電子デバイスへの応用が期待される。グラフェンデバイスの実用化にはグラフェンと相性の良い基板が必要だが、SiO₂ 基板上のグラフェンは電子移動度が 25,000 cm²/Vs 程度に制限される。移動度が制限される理由として、基板表面の荷電不純物による散乱や基板の極性光学フォノンによる散乱などが指摘されている。そのような中で最近、hexagonal BN 基板を用いることで、電荷中性点付近で 140,000 cm²/Vs という高い電子移動度が得られることが報告され注目を集めている。本稿では、絶縁基板上グラフェンの電子移動度の低下を引き起こす散乱機構の解明を試みた。

P-18 ディラック電子とシュレディンガー電子をキャリアとする FET の性能比較シミュレーション

田中 未来、笹岡 健二、小川 真人、相馬 聡文
神戸大学大学院工学研究科電気電子工学専攻

近年、グラフェンが FET のチャネル材料として注目されている。グラフェンは高電子移動度という利点の一方で、バンドギャップが存在せずスイッチング特性が劣化するという難題を抱える。本研究では、窒化ホウ素等との組み合わせにより実現しうる有限ギャップグラフェン状物質をチャネル材料に用いた場合の FET の特性について理論計算を行う。グラフェン状物質はフェルミエネルギー近傍においてディラック電子としての振る舞いが期待されている。そこで有効方程式がディラック方程式に従う場合とシュレディンガー方程式に従う場合についての性能比較を行う。

P-19 歪み誘起疑似磁場を利用したグラフェン FET のスイッチング性能に関する理論解析

上山 真之、笹岡 健二、小川 真人、相馬 聡文
神戸大学大学院工学研究科電気電子工学専攻

従来のシリコン FET では、微細化による消費電力の増大が、更なる高性能化を妨げる大きな要因となっている。本研究では、チャネル材料にグラフェンを用い、歪みによって誘起される疑似磁場効果を利用した電流制御に焦点を当てる。歪み印加チャネル領域において波数空間でフェルミ円が電流と垂直方向にシフトする効果（疑似磁場効果）により、無ギャップ状態にも係わらずバンド間トンネル FET に類似した急峻なスイッチング機構が可能になり、それによる消費電力の低減が期待出来る事を報告する。

賛助会員

応用物理学会関西支部の本事業活動に関し、下記賛助会員各位よりご支援を頂いております。ここに社名を記載させて頂き、感謝の意を表します。

(株) アドバンテスト
エア・ウォーター(株)
(株)SDI
(株) 大阪真空機器製作所 堺工場
京セラ(株)
(株) 神戸製鋼所 技術開発本部
(株) 島津製作所
シャープ(株) 研究開発本部
新日鐵住金(株) 技術開発本部 尼崎研究開発センター
住友電気工業(株)
大陽日酸(株)
東京エレクトロン(株)
東京応化工業(株)
ネオアーク(株)
パナソニック(株) R&D 本部 技術政策室 技術外交チーム
(株)日立ハイテクノロジーズ
(株)フジキン
三菱電機(株) 先端技術総合研究所
(株)村田製作所
(株) リガク
ローム(株)

(2014年11月1日現在、50音順)