

ナノスケール熱制御によるデバイス革新の必要性

Necessity of Nano-Scale Thermal Management for Device Innovation

馬場 寿夫、斎藤 広明、佐藤 勝昭、永野 智己、松下 伸広*、的場 正憲、曾根 純一

Toshio Baba, Hiroaki Saito, Katsuaki Sato, Toshiki Nagano, Nobuhiro Matsushita,

Masanori Matoba, Jun'ichi Sone

国立研究開発法人 科学技術振興機構 (JST) 研究開発戦略センター、*東京工業大学

E-mail: t2baba@jst.go.jp Phone: 03-5214-7481

ナノスケールに突入したデバイスが直面する熱問題の克服に向けて、学術的に遅れていたフォノンの理解と制御に基づくナノスケールの熱制御に関する新たな学術分野を構築し、デバイス革新に向けた研究開発を推進することの必要性および期待について、科学技術振興機構 (JST) 研究開発戦略センター (CRDS) でまとめられた戦略提案書¹⁾を基に紹介する。

1. 背景

近年の情報化・ネットワーク社会においては、情報通信デバイスの高性能化によってわれわれの生活の利便性が大きく改善されてきた。一方、新たに生成される情報量は飛躍的に増加しており、2020年には現在の約10倍の40ゼタ (10^{21}) バイトになると予測されている。今後、様々な機器がネットワークでつながる「IoT (Internet of Things)」や、あらゆる場所にセンサ機器が配置される「Trillion sensors」のようなものが広がると、このような傾向はさらに加速すると考えられる。これらから生み出される膨大なデータを処理し保存するためには、今よりも桁違いの性能を持つ集積回路やストレージデバイスが不可欠になる。このため、今後も高性能化・低消費電力化に向けたデバイス技術の革新が無い限り、このような情報爆発への対応は不可能である。

しかし、最近ではデバイスのサイズがナノスケールになり、半導体集積回路ではナノスケールに微細化されたデバイスの発熱・放熱の問題が高性能化を阻害するようになっていく。また、ハードディスクではナノスケールの微小な磁石の熱揺らぎの問題から大容量化の大きな壁に直面している。このため、さらなるデバイスの高性能化に向けては、ナノスケールにおける熱の制御が非常に重要になっている。

また、携帯端末や環境センサ、ドローン (無人飛行体) など外部からの電源供給が困難な機器においては、限られた電力量で長時間使用できるように低消費電力化や、環境に存在するエネルギー (熱、振動、光など) から電力を得るエネルギーハーベストなども重要になってきている。特に、熱エネルギーを電気エネルギーに変換する熱電変換素子はこのようなエネルギーハーベストだけでなく、火力発電所や自動車などで捨てられている熱エネルギーの回収を可能にすることから、多様な用途への応用が期待されている。しかし、このような用途を満足する高効率な熱電変換素子はまだ実現されていない。熱電変換素子 (ゼーベック素子) において、高い変換効率を得るためには、低熱伝導度・高電気伝導度の材料が必要であるが、一般的に両者を独立に制御することは困難であり、材料の組成や不純物、素子構造の工夫などにより、ナノスケールの熱伝導と電気伝導を独立に制御するような手法の開発が必要になっている。

科学的な視点での課題もある。マクロスケールにおける熱の考え方では、固体を連続体

として扱い、熱の拡散というマクロなとらえ方で熱物性を説明してきた。しかし、マイクロメートルからナノメートルのミクروسケールになると、熱を運ぶのは格子振動の波の伝搬であると考えなければ、熱現象を説明できなくなる。さらに、ミクروسケールにおいては、格子振動を量子化したフォノンという熱を運ぶ仮想的な粒子（準粒子）で扱う必要がある。従来のトランジスタなどデバイスのサイズは、フォノンの平均自由行程よりはるかに大きかったため、熱伝導を考えるにあたり、マクロな取り扱いが成り立ち、フォノンを考慮する必要がなかった。しかし、デバイスサイズが微細化した現在では、熱伝導をフォノンのレベルで取り扱わなければ、正確にデバイスの動作を予測することや、所定の性能や信頼性でデバイスを設計することができなくなってきた。このため、今後の高性能なデバイスの開発には、熱伝導をフォノン輸送としてとらえ、ナノスケールでの温度や熱伝導を正確に把握し、フォノン輸送を積極的に制御して、デバイス内部を望みの温度分布に設定できるようにすることが必要とされる。

しかし、現状ではナノスケールの熱伝導現象あるいはフォノンの輸送現象の理解および制御はほとんど進んでおらず、科学技術的にも未開拓の領域となっている。例えば、細線構造における基本的なパラメータである熱伝導率は、使う材料や線幅によって大きく変化するが、熱伝導率のデータは大きな構造における値が存在するだけで、線幅の変化や含まれる不純物の種類や量に対応するデータは無い。代表的な半導体材料であるシリコン（Si）でさえも、細線構造がナノスケールになる（ナノワイヤ）とその熱伝導率は 1/100 程度になるという報告があるが、きちんとしたデータの蓄積は無い。また、デバイスのサイズや形の変化でどのように熱伝導率が変化していくかという、デバイス設計に必要なデータや理論的な取り扱い、シミュレーションツールもできていない。

一方、電子の伝導や光の伝播に関わるナノスケールでの現象の理解やその制御技術は、これまでに飛躍的な進歩を遂げている。例えば、電子においてはナノスケールになると電子が散乱を受けず弾道的に走行できるバリスティック輸送現象、電子が波として干渉する電子波干渉現象が観測され理論的にも理解されている。光の伝播についても同様であり、光導波路やフォトニック結晶中での光の伝播モード、波長以下のサイズの孔から光が漏れ出す近接場光などについては、これらの現象の理解と、それを積極的に制御する技術が大きく進展している。このように、量子力学的には同じように扱うことができる電子、フォトン、フォノンであるが、学術的・技術的には、大きな差があり、ナノスケールの熱物性は電子物性や光物性の分野に対して大きく遅れていると言える。ナノスケールでのデバイス開発がますます重要になってくることを考えると、このナノスケールの熱伝導に関する科学技術を早急に電子・光に並ぶレベルまで高める必要がある。最近になって、図1に示すようにフォノンクス、フォノン結晶などの研究が注目され論文数も増加傾向にあるが、この分野の研究開発を活発化させ進展させることが重要である。

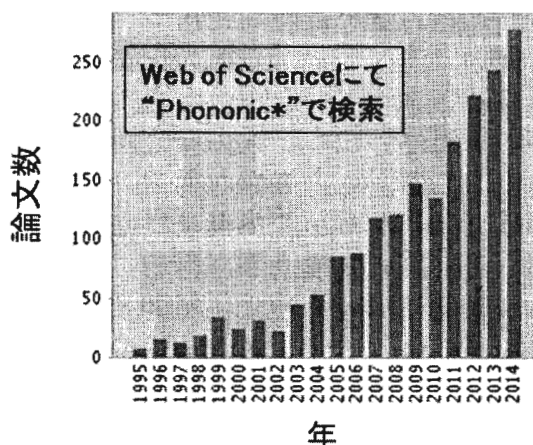
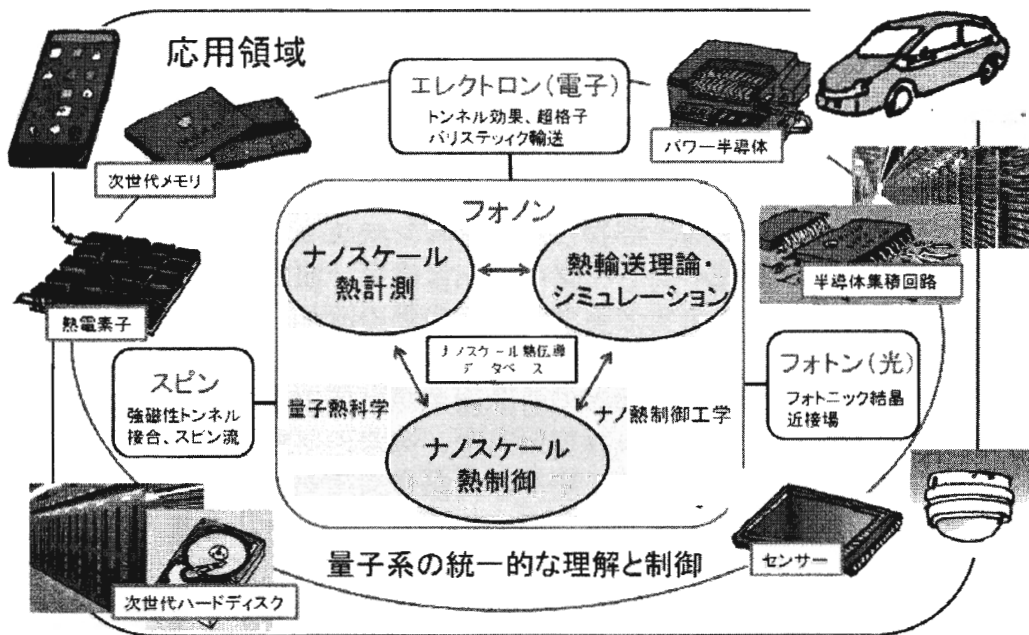


図1 フォノン結晶の年代別論文数

2. 重要な研究開発課題

ナノスケールの熱物性の理解と熱制御に向けた具体的な研究開発課題を図2に示す。この図はナノスケールの熱計測、熱輸送の理論・シミュレーション、ナノスケールの熱制御、デバイス革新の4つの研究開発課題の関係を示したものである。この4つの研究開発課題を密に連携させて進めるとともに、その結果出てくるナノスケールの熱伝導に関わる各種のデータを「ナノスケール熱伝導データベース」として集約し、活用できるような体系にすることを示している。これらにより、ナノ量子熱科学、ナノ熱制御工学と呼ぶべき新たな学術分野を構築していく必要がある。また、フォノンと電子、フォトン、スピンなどの量子系を統一的に理解し、これらが複雑に絡みあうナノスケールの物理現象を制御することが求められる。以下、4つの研究開発課題について説明する。



- ◆ナノスケールの熱伝導に関する新たな学術分野の構築
- ◆熱計測、理論・シミュレーション、熱制御研究の一体的取り組み
- ◆ナノスケールの熱伝導の知見を集めたデータベースの共有と活用
- ◆デバイス高性能化へのフォノンと電子、フォトン、スピンの統一的な理解と制御

図2 ナノスケール熱制御とデバイス革新の研究開発課題

2.1 ナノスケール熱計測

ナノスケールの熱伝導やフォノン輸送を正確に把握し理解するためには、ナノスケールの局所的な温度測定や熱伝導の計測技術および解析・評価技術が不可欠である。また、実際のデバイスの動作を考えると、定常的な状態だけでなく、動的・過渡的な温度変化、熱伝導率の変化についても把握する必要がある、これに対応できる計測・解析・評価技術についても研究開発する必要がある。

材料の熱物性計測を行う代表的な計測手法が、材料の光の反射率が温度によって変わることを利用するサーモフレクタンス法であり、これまでも周波数領域法や時間領域法などいくつかの技術が開発され、バルク的な材料だけでなく、薄膜における熱物性の解析も行えるようになってきている。ナノスケールの熱物性の計測においては、このサーモフレクタンス法の測定精度の向上や測定範囲（時間、空間、多層構造など）を拡大すること、シミュレーションとの連動で、測定に伴う擾乱まで考慮することで正確な熱物性値を得る方法などが求められる。また、加熱源やプローブ光を通常のレーザーではなく、近接場光など光の波長以下の局所領域にも使えるような新たな手法の研究開発も必要になる。

また、ナノスケールあるいは原子スケールの測定に用いられるプローブ顕微鏡を熱計測

に適用することも重要である。非常に小さな熱電対をプローブ顕微鏡の探針に形成したものの、熱変形を利用するもの、近接場光の散乱を利用したものなどの走査型熱顕微鏡が研究されているが、探針自体が熱計測に影響を与えることや、空間分解能などの問題を克服する必要があり、さらなる高性能化を目指した研究開発が必要である。この他にも、サーモリフレクタンスや走査型熱顕微鏡の利点を合わせ持ち、不均一材料の深さ方向の熱特性や、異種材料間の界面熱抵抗を高精度に計測できる手法の研究開発も望まれる。

2.2 熱輸送理論・シミュレーション

材料の表面／界面／不純物／構造欠陥などを考慮したナノスケールでの熱伝導の理論の構築およびシミュレーション手法の開発も求められる。ここでは、単にサイズがナノスケールというだけでなく、二次元物質のような極薄膜や、一次元の極微細線のような低次元系の構造・材料、材料表面、異種材料界面におけるフォノン輸送についても扱う必要がある。このようなナノスケールの多様な構造中におけるフォノン輸送現象は、準粒子的な描像と波の描像とが重なり合ったものと考えられるので、両方の視点で理解し、理論体系を作っていくことが重要である。

シミュレーションにおいては、扱うスケールによって、適切なシミュレーション手法が使えるようにしておく必要がある。熱物性のシミュレーションにとって最も基本となり重要な原子・分子レベルの熱物性パラメータの導出には第一原理計算が必要である。また、この熱物性パラメータを用いて、ナノスケールでの熱の流れを計算する分子動力学計算、フォノンの輸送過程をボルツマン輸送方程式にのっとして散乱の種類や時間間隔を確率的に求めて計算するモンテカルロ手法などの研究開発が必要である。これらのシミュレーション手法の基本的なものはすでに作られているが、実際の材料やデバイスにおける実験結果と整合するように、その精度を高めていくことが必要である。また、これらの異なるスケールでのシミュレーション手法を連携して広範囲なスケールに適用できるマルチスケールシミュレーション手法の研究開発が重要である。特に、最適なナノ構造を求めて材料設計に活かすことや、デバイス設計に役立つように、全体を統合化してツール化することが望まれる。

一方、フォノン輸送のシミュレーションだけではなく、デバイス構造における電子やフォトン、スピンとの相互作用も同時に扱うことのできる統合シミュレーション手法についても研究開発する必要がある。例えば、実際のトランジスタでは、電子の走行によって格子との相互作用によりフォノンが吸収されたり発生したりする。この発生したフォノンにより局所的な加熱が起り、温度上昇する結果、電子の速度を低下させ電流が減少するような現象もある。したがって、電子とフォノンを同時にシミュレーションすることは、今後のナノスケールのデバイスの特性予測に欠かせなくなると考えられる。

2.3 ナノスケール熱制御

ナノスケールの熱伝導を制御するためには、フォノンの特徴をうまく利用した制御手法を開発するとともに、これを活かした材料設計、デバイス設計について研究開発を行っていく必要がある。また、実際に新規デバイスを作製するための基盤的な微細構造作製技術を高度化しておく必要もある。

ナノスケールの熱伝導を制御する方法としては、2つの視点で考えることができる。一つはフォノンの輸送を粒子的な描像としてとらえるものであり、もう一つは波の伝播としてとらえるもの（波動的描像）である。フォノン輸送の粒子的描像においては、フォノンの散乱を抑制あるいは増加させる構造の積極的な導入により、フォノンの平均自由行程（散乱なしに動ける距離）を変化させ、所望の熱伝導特性を実現する。このようなフォノンの制御手法としては、不純物の制御（不純物の種類、濃度、分布）、同位体元素の制御（濃度、分布）、結晶の制御（多結晶化、アモルファス化、微粒子化、結晶粒界、相転移）、表面お

よび異種材料界面の制御、低次元構造（フォノン散乱の抑制）、複合材による熱的パーコレーションの促進、などが考えられる。これらの手法がフォノン輸送に与える効果については、平均自由行程だけでなく、制御すべきフォノンの波長にも依存するため、これらの手法を組み合わせるなどの複合的な構造設計も重要になる。

もう一つの波動的描像は、フォノンの平均自由行程が十分に長く、ほとんど散乱されることが無い状況での取り扱いであり、散乱による波の位相情報が失われないため、波動の位相が重要な役割を演じ、周期的構造によるフォノンのバンド構造の形成が起こる。これは、光におけるフォトニック結晶構造によるフォトニックバンドの形成との類似性が高い。周期的構造を有するフォノン結晶構造の作製により、特定の周波数のフォノンが透過できないようなフォノンバンドギャップの形成や、伝搬速度（厳密には群速度）の低下を起こすことができる。フォノンバンドギャップの形成は特定の周波数のフォノンの輸送を抑制することには有効であるが、フォノンの周波数はテラヘルツ（THz）領域で広く分布しているため、低温以外では熱伝導を抑制する効果はそれほど大きくはない。一方、群速度の低下は、広い範囲の周波数領域までおよぶため、熱伝導の低減効果は大きい。どのように周期的構造を設計するかは、使用する材料のフォノンの分散関係、フォノンの平均自由行程、主に熱伝導に寄与するフォノンなどを十分に把握した上で行う必要がある。

以上述べてきたナノスケールの熱の制御は、これまで考えられてきた熱制御の手法をフォノンのレベルで科学的に理解し、高度な熱制御の技術を構築するものであるが、異分野の知見や全く新しい物理現象を利用することも積極的に進める必要がある。例えば、磁性体におけるスピン流によるスピンゼーベック効果を熱電変換素子の新たな動作原理とし、その詳細な動作解明、高性能化の指針の導出、デバイス作製などを行っていくことが考えられる。また、中身は絶縁体であるが、表面は良好な導電体となるようなトポロジカル絶縁体は、ゼーベック素子の高性能化を図れる可能性を持っており、理論と実験からの詳細な研究開発が望まれる。

2.4 デバイス革新

ナノスケールの熱制御の基盤技術を活用して実際の各種デバイスの革新に向けた研究開発を行うことも重要である。特に、ナノスケールの熱輸送が性能・機能の面でボトルネックとなっている半導体集積回路、パワー半導体、次世代ハードディスク、熱電素子などのブレークスルー技術の開発や、ナノスケールの熱制御を活用したメモリやセンサなどの新規デバイス創出への展開が望まれる。

例えば、半導体集積回路においては、微細トランジスタからの発熱の抑制や効果的な放熱のために、微細構造になっても高い熱伝導率を持つチャンネル材料や、効率的に熱を逃がす絶縁材料や金属配線材料、界面抵抗の少ない材料の組み合わせなどの開発が必要である。また、電子の伝導とフォノン伝導とを同時に取り扱って、最適な構造を求めるシミュレーションツールの開発も重要である。さらには、固体素子による局所的な冷却技術の開発も望まれる。熱電変換素子においては、電子輸送を損なわないようにして、フォノン散乱を増大したり特定のフォノンの伝播の抑制あるいはフォノンの伝播速度を低下させたりする材料構造設計が必須である。

新規なデバイスの創出に関しては、ナノスケールの熱制御をうまく利用することで、これまでではできなかったような機能の発現や、簡単な構造や桁違いの低消費電力で従来と同じかそれ以上の機能を実現することなどが期待される。例えば、次世代メモリにおいては、低消費電力で高速な書き込み・消去を高い再現性・信頼性で行うことが必須であり、電気伝導と熱伝導、イオン伝導などを考慮して、メモリ材料とその周辺の絶縁膜、電極との組み合わせを選択・設計することが重要である。また、MEMS/NEMSのような構造で、超音波領域のフォノン発生・検出を行い、フォノン結晶により特定の波長のフォノンを増

強したり目的の方向に照射したりできるデバイスの実現も望まれる。これが可能になれば、超音波診断による画像がより鮮明になると考えられる。極低消費電力のガスセンサも期待されるデバイスの一つである。半導体ガスセンサをナノスケールのヒータ構造にすることで、消費電力を従来の1/1000程度に減らすことも可能になり、電池や環境発電でも動作可能になると考えられる。さらに、熱を一方向にだけ伝えるような熱ダイオードや、熱の伝導をオン・オフできる熱スイッチの実現に向けた研究開発が重要と考えられる。自動車の排ガス用の触媒の効果的な利用などへの応用が期待される。

3. 推進方法について

研究開発の推進にあたっては、これまで見過ごされてきたナノスケールの熱制御は困難な命題であるため、学術分野や応用分野の垣根を越えて、ナノスケールの熱伝導に関わる産官学の研究者・技術者・開発者がコミュニティを形成し、研究開発の目標を共有しながら発展させていくことが必要である。関係する学会としては、応用物理学会、日本機械学会、日本熱電学会、日本伝熱学会、日本熱物性学会、日本物理学会、日本化学会、エレクトロニクス実装学会などがあり、各学会の研究者・技術者が集まって議論をする場と、常に密な情報交換が可能なネットワーク環境が必要となる。

また、研究開発者が広く活用できるような、熱物性に関する知識基盤の整備・運用が求められる。ナノスケールの材料・デバイスに関する熱物性は、いまだ体系的に整理された知識がなく、学術領域としても確立していないことから、研究者が新たに参入する際の障壁となっている。ナノスケールの熱物性に関する詳細なデータベースを構築し、関係者が自由にアクセスして利用できる利用環境・ツールの整備が重要であり、研究開発そのものと同時並行して進めることが必須である。その際、CRDS がすでに発行している戦略プロポーザル「データ科学との連携・融合による新世代物質・材料設計研究の促進（マテリアルズ・インフォマティクス）」²⁾ に示すような、データ基盤整備の基本的考え方を導入することが肝要である。

以上のような研究開発やデータベースの構築は、公的資金によっておこなうべき段階にあり、関連する機関としては内閣府、文部科学省、経済産業省、JST、NEDO 等が想定される。7～10 年程度の期間集中的に実施することで、本領域における国際的な優位性を確たるものとするのが望ましい。

4. おわりに

フォノンの発見が 20 世紀初頭であったのにも関わらず、電子や光子と異なり長期間に亘り真正面からの取り組みを避けてきたのは、物理学にとっても大きな損失と思われる。電子や光子などの学術領域は数十年に亘る継続的で精力的な研究が進められた結果、今日の優れた学術・技術体系を作ってきた。フォノンについてはまだ技術革新への大きな可能性が残されていると考えられるため、フォノンの重要性を再認識・再発見した今こそ、新たな学術領域として広い分野から人を糾合し、長期的な視点で学問の大きな流れを作っていく必要がある。これにはこの科学技術分野に一番近く産業界との接点も多い応用物理学会の主導的な活動に期待したい。

参考資料

- 1) 戦略プロポーザル「ナノスケール熱制御によるデバイス革新 ―フォノンエンジニアリング―」(CRDS-FY2014-SP-04) :
<http://www.jst.go.jp/crds/pdf/2014/SP/CRDS-FY2014-SP-04.pdf>
- 2) 戦略プロポーザル「データ科学との連携・融合による新世代物質・材料設計研究の促進（マテリアルズ・インフォマティクス）」(CRDS-FY2013-SP-01) :
<http://www.jst.go.jp/crds/pdf/2013/SP/CRDS-FY2013-SP-01.pdf>