

CRDS-FY2014-WR-15

**科学技術未来戦略ワークショップ報告書**  
**「フォノンエンジニアリング**  
**ー ナノスケール熱制御によるデバイス革新 ー」**

2014年11月14日(金)開催



独立行政法人科学技術振興機構 研究開発戦略センター  
Center for Research and Development Strategy, Japan Science and Technology Agency

## エグゼクティブサマリー

本報告書は、独立行政法人 科学技術振興機構（JST）研究開発戦略センター（CRDS）が平成 26 年 11 月 14 日に開催した科学技術未来戦略ワークショップ（WS）「フォノンエンジニアリング – ナノスケール熱制御によるデバイス革新 –」に関するものである。

近年では電子・電気機器の駆動により必ず生ずる熱を、効率よく逃がすことがエレクトロニクス産業においてクリティカルな課題となりつつある。また、デバイスの微細化に伴い、他に影響を与えないで局所的な加熱・冷却を迅速に行うような要求や、低温の熱をエネルギー源として有効に利用する技術が要望されている。

本ワークショップは、半導体集積回路やパワー半導体、次世代ハードディスク、熱電変換素子などの熱に関する技術的課題や、必要となる科学技術、その開発を促進するための政策などの議論を行い、ナノスケールでの熱の理解に基づく熱の効率的な制御・利用のために有効な研究開発戦略策定の一環となることを目指して開催した。WS では、CRDS からこれまでの調査にもとづく全体像、課題、研究開発戦略の仮説を示し、フォノンエンジニアリングへの期待、応用分野からの期待、ナノ熱計測・シミュレーション、デバイス革新に関する話題提供、総合討論を行った。

CRDS は、ナノスケールの熱制御は今後のデバイスの性能向上にとって重要になるが、電子物性や光物性に比べてマイクロな領域の熱物性の理解が立ち遅れていることから、ナノスケールの熱の理解と制御に関する学理の追求、および応用を目指した材料やデバイス技術への適用が必要であることを示した。また、具体的な研究開発の構造として、「計測」、「材料・構造作製」、「理論・シミュレーション」の研究者が共同して推進すべきであること、ナノスケールの熱伝導に関するデータベースの構築が必要であることを、仮説として示した。

フォノンエンジニアリングへの期待では、ナノスケールの熱伝導はマクロスケールとは異なりフォノンの輸送として考える必要があること、原子レベルからマクロスケールまでをつなぐマルチスケールのフォノンのシミュレーションが必要なことが示された。また、ナノスケールの構造や界面、材料の組み合わせ、フォノンの波動性を利用したバンドエンジニアリングなどによる熱伝導の制御が必要になり、学術領域を越えた技術の融合、学会の連携などの重要性などが指摘された。

応用分野からのこの研究領域への期待としては、次世代の不揮発性メモリである抵抗変化メモリ（ReRAM）、電力制御用のパワー半導体、次世代のハードディスク技術である熱アシスト記録、自動車における熱利用に関して、ナノスケールの熱制御の必要性が示された。ReRAM においては、高速動作や信頼性に熱が関わり、ナノスケールでの熱物性評価やシミュレーション技術が重要になる。パワー半導体では、ヒートシンクに至るまでの絶縁基板、接合剤などの熱抵抗やこれらの界面熱抵抗を減少させること、実装モジュールとして周辺部品の耐熱性や信頼性を向上させることが必要である。熱アシスト記録におい

では、レーザー光による磁性膜の加熱・冷却の高精度の制御が必要であり、ナノスケールの材料の熱物性値の実測とシミュレーションへの反映が重要になっている。自動車の熱利用については、始動時とある程度時間が経過した時の触媒やエンジンの温度を最適に制御するために、熱スイッチや熱ダイオードのような機能が望まれる。

ナノ熱計測・シミュレーションにおいては、サーモリフレクタンス法による多層膜の計測技術、第一原理計算からの格子熱伝導計算の現状、半導体デバイスにおける電子・熱輸送シミュレーション技術が報告された。ここでは、計測技術と理論・シミュレーション技術、材料技術が情報を共有してお互いに参照して不明な点の解析を進めて行く必要があること、異なる研究機関のデータベースとツールの共有が必要であること、第一原理計算は計算結果と実験値は対数スケールでよく一致すること、電子の輸送とフォノンの輸送を同時に扱うモンテカルロ手法を初めて開発したことなどが示された。

デバイス革新においては、熱設計によるデバイス高性能化戦略、熱電変換材料設計、スピントラニオン効果と熱電変換、フォノンバンドエンジニアリングの現状が報告された。ここでは、最近の微細トランジスタは熱が逃げ難い構造になっており、熱を考慮したデバイス構造設計が重要になってくること、熱電変換材料の設計では高性能材料へのナノテク活用や革新的な新原理の探索が必要なこと、スピントラニオン効果を用いた熱電変換では熱伝導と電気伝導が独立して材料設計できること、人工的な周期構造でフォノンの制御を行うフォノンクスが世界的にも関心が高まっており実際にフォノンの抑制効果が確認されていることなどが紹介された。

総合討論では、各発表や質疑を踏まえて、ナノスケール熱制御で重要な研究開発課題、世界をリードするナノスケール熱制御の推進に必要な仕組み、この研究開発の社会的・経済的・科学的な意義、に関連する議論を行った。研究開発課題に関しては、材料創製や熱評価の実験と理論解析の融合の必要性、企業も汎用的に使える測定環境の整備の必要性が指摘された。推進の仕組みに関しては、ヨーロッパで行われているようなナノフォノンクス研究の枠組み作り、データをデジタル情報として使い易い形で保存しておくことの必要性が指摘され、この分野のコミュニティを広げることが重要であることの共通認識が得られた。社会的・経済的・科学的な意義に関しては、このナノ熱制御を学問として成立させていくことが、人材の育成・確保にとっても重要との指摘があった。

ワークショップでの議論を踏まえ、CRDSは、今後国として重点的に推進すべき研究領域、具体的な研究開発課題を検討し、研究開発の推進方法を含めて戦略プロポーザルを策定し、関係府省や関連する産業界・学界等へ提案する予定である。

## 目 次

エグゼクティブサマリー

1. ワークショップの趣旨説明	曾根純一、馬場寿夫 (J S T - C R D S) ……	1
2. フォノンエンジニアリングの展望	塩見淳一郎 (東 京 大 学) ……	7
3. 応用分野からの「ナノスケール熱制御」科学技術への期待	……………	16
3.1 ナノスケール抵抗変化メモリ (ReRAM) における「熱」の役割	島 久 (産業技術総合研究所) ……	16
3.2 次世代パワー半導体の放熱問題	山口 浩 (産業技術総合研究所) ……	24
3.3 熱アシスト磁気記録	喜々津哲 (東 芝) ……	31
3.4 自動車における熱制御	松野孝充 (トヨタ自動車) ……	38
4. ナノ熱計測・シミュレーション	……………	44
4.1 ナノスケールの熱計測・熱解析技術	徐 一斌 (物質・材料研究機構) ……	44
4.2 第一原理からの格子熱伝導計算の現状	東後篤史 (京 都 大 学) ……	52
4.3 半導体における電子・熱輸送シミュレーション	栗野祐二 (慶應義塾大学) ……	58
5. デバイス革新	……………	67
5.1 熱設計によるデバイス高性能化戦略	内田 建 (慶應義塾大学) ……	67
5.2 熱電変換材料設計	森 孝雄 (物質・材料研究機構) ……	72
5.3 スピンゼーベック効果と熱電変換	内田健一 (東 北 大 学) ……	81
5.4 フォノンバンドエンジニアリング	野村政宏 (東 京 大 学) ……	89
6. 総合討論	(コーディネーター：佐藤勝昭) ……	97



# 1. ワークショップの趣旨説明

曾根 純一、馬場 寿夫 (JST-CRDS)

このワークショップは CRDS の「科学技術未来戦略ワークショップ」の 1 つに位置付けられる。集積回路、パワー半導体などいろいろな応用分野で重要になってくる小さな領域の熱の問題をきちんと議論して、これから何をやっていかなければいけないかを明確にしたい。

最先端のエレクトロニクス分野では電子、フォトン、スピンの重要な役割を果たしており、最先端の研究がいろいろな形でなされてきている。全てに共通して重要な役割を果たしているのがフォノンである。しかし、熱をナノスケールで制御するための学理あるいは基盤技術が少し遅れている。フォノンと電子、フォトン、スピンを合体させて、しっかりしたデバイスの設計体系になることを期待する。また、熱を積極的に使う熱電素子や熱アシストのスピントロニクスなど、いろいろな所に熱が主役として現れようとしており、熱を制御して固体素子で冷却するといった新たな技術の創出にもつながっていくことを期待したい。

今回のワークショップは 1 年かけて行っている戦略プロポーザル作成活動の一環であり、議論の内容はプロポーザル作成の参考にさせていただく。CRDS におけるこれまでの調査・分析、仮説をもとに議論し、積極的に発言をお願いしたい。



図 1-1

WS のスコープは、「電子物性や光物性に比べて遅れている熱の概念をナノサイエンスの立場にたって再構築し、熱制御・利用技術を確立することにより、デバイスの革新を図る」ことにある。

図 1-1 はナノテク・材料の中でどんな位置付けになっているかをまとめたものである。上部の応用分野から下部の基礎科学までを示しており、赤で囲ったところはフォノンあるいはナノ熱制御に関わる領域で、非常に広い領域に関わっていることが分かる。

背景、ナノスケールの熱制御の全体像、社会・経済的効果、国内外の動向、提案の方向性について述べる。

背景として、応用分野で非常に重要になっていることの概略を示す。半導体集積回路は高集積化・高性能化が進んでいるが、熱の問題が非常に顕著になっており、さらに高性能化をしていくためには、どうしても放熱を良くしなければならない状況にある。パワー半導体も同様であり、これから新しい材料である SiC、GaN 等が使われるが、そのときには熱の発生が非常に多くなっていくので、どのように熱を制御していくかが非常に重要になってくる。ハードディスクにおいても、今後のハードディスクの進展を考えると、熱をうまく使っていないと、さらなる高密度化の実現が難しくなる。次世代のメモリとして期待される各種の不揮発性メモリ(電源が切れても情報を保持しているメモリ)が提案されているが、いずれも熱の問題を避けては通れない。また、あるものは熱を積極的に利用しようとしているということで、熱の制御が非常に重要になってきている。エネルギー関係として、熱電変換素子が以前から研究されているが、なかなか効率が上がっていかない。いろいろな材料を考へることや、構造を考へていく必要があるが、ここに新しい熱制御の考へ方が必要になってきている。また、新たな熱電変換素子として、スピンゼーベック効果というものが最近注目されている。従来のゼーベック効果を用いたものとは全く違った原理に基づいているので、今後どのように展開していくのか興味深い。

このような応用上のいろいろなところでの熱の制御が必要になってきているが、ナノスケールの熱についての基礎的な理解が進んでいないというのが現状である。マクロスケールでの熱伝導というのは昔からよくやられているが、ミクロな領域になるとデータが無く、またきちんとした測定もできない状況であり、こういった部分が大きな問題になっている。一方、ナノテク・材料技術の進展、あるいは電子や光関係の制御に関しては量子的な制御が非常に進んでおり、これらの知見をナノスケールの熱あるいはフォノンというところを利用して、応用分野での展開を図っていく必要がある。特に、フォノンだけというより、電子、スピン、光といった他の量子と一緒にして考へていくことが非常に重要だと考へている。このような背景から今回のスコープとしてナノスケールの熱の問題を取り上げている。

図 1-2 はナノスケール熱制御の全体像を示すものであるが、上部に応用分野、適用分野を示している。下部は基礎になっており、その間に制御すべき機能、設計、研究課題を示している。研究課題としては、重要と考へられる 4 つを挙げている。材料・構造作製、熱測定、熱輸送の理論とシミュレーション、熱輸送の制御の 4 つであり、ナノ量子熱科学、あるいはナノ熱制御工学といった新しい分野を創っていくと考へている。

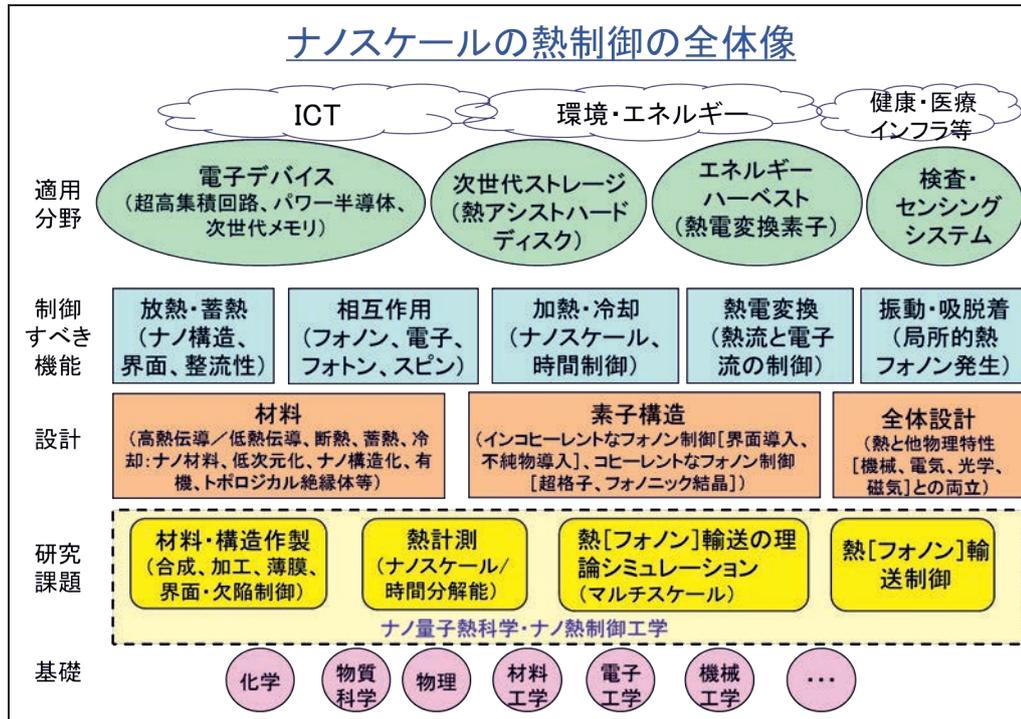


図 1-2

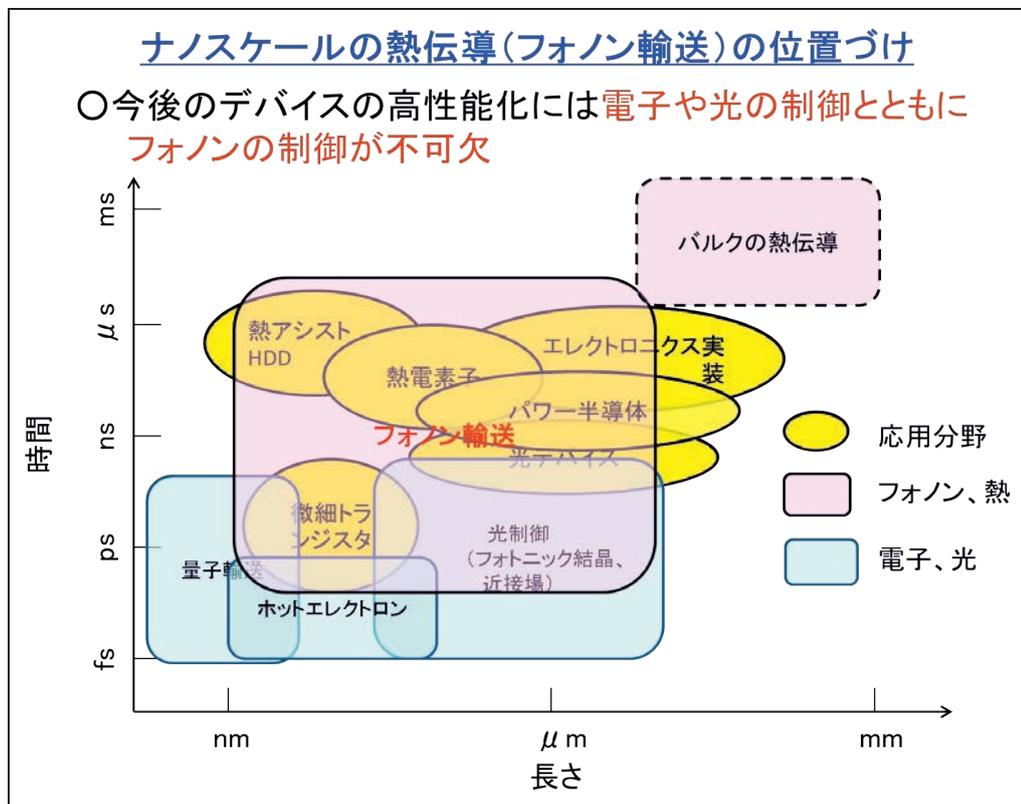


図 1-3

なぜナノスケールの熱制御が重要であることを示すために、デバイスや制御手法を時間スケールと長さスケールでプロットしたのが、図 1-3 である。黄色の楕円で書いてあるのはこれからも重要な応用分野を示している。これらの応用に必要な光や電子に関しては、かなり短い時間スケールや長さのスケールでも、いろいろな制御手法の研究がなされており、ナノスケールでの理解が進んでいる。電子や光のデバイスの高性能化にむけては、こういった学術領域のサポートがある。

ところが熱に関しては、右上のほうのバルクの熱伝導という所からまだ抜け出しておらず、黄色で囲われた応用分野のデバイスのさらなる高性能化には、フォノンの輸送をしっかりと取り扱っていかなければならない。

次に、こういったフォノンの制御あるいはナノ熱制御がうまくできると、どういうインパクトがあるかを簡単に示す。電子機器の高性能化は非常に重要であり、市場規模は 2015 年で 33 兆円程度である。電子機器の課題の全てがこのナノスケールの熱として解決できるわけではないが、かなり広い市場に影響する技術だということは言える。パワー半導体に関しても、2030 年には大体 4 兆円の市場規模が予想されている。ハードディスクに関しても、4 兆円ぐらいの規模が現在もある。エネルギーハーベストについてはなかなか読みづらいところもあるが、2022 年には 5,000 億円ぐらいの規模になっていくというような見積もりもある。このように、ナノスケールの熱制御は経済的にも非常に大きな影響を及ぼす研究領域になると考えられる。

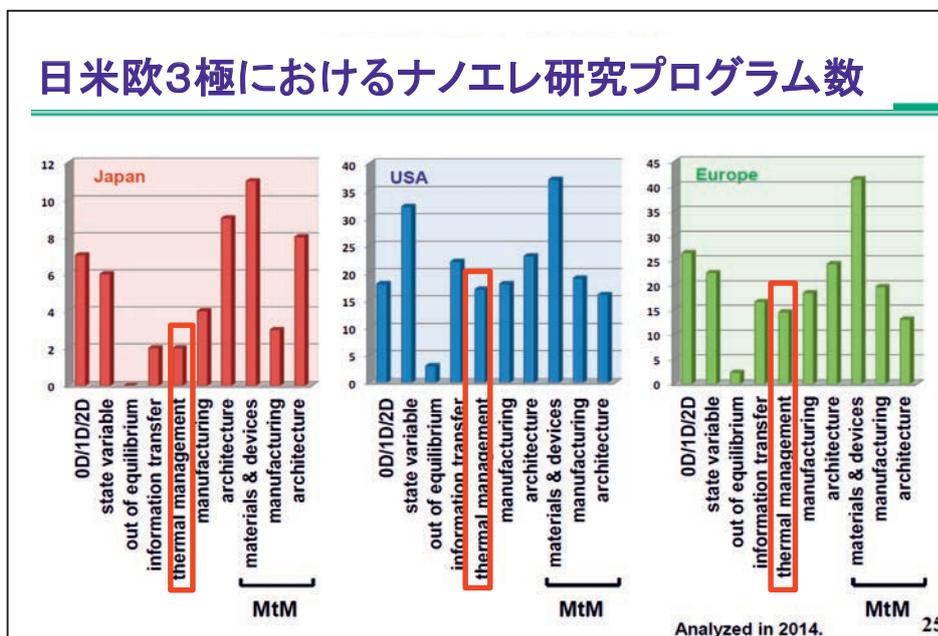


図 1-4

ナノスケールの熱制御に関する国際的な動向を簡単に紹介する。ナノエレクトロニクス関係のナノ熱制御に関しては、米国と欧州がかなり進んでいる。図 1-4 はナノエレクトロニクス関係のプログラムの数をプロットしたものであるが (ナノテクノロジー国際会議 [INC10] の発表資料より)、日本が 1 ~ 2 件に対して、欧米は十数件のプログラムがある。ただし、プログラムの中身を見ると、熱制御そのものというよりも新しいデバイスの開発

の中に熱の問題も含んでいるというものがほとんどであり、ナノスケール熱制御だけを対象とした国家レベルのプログラムは無いと言える。

ハードディスクの分野では、日本とアメリカで熱アシスト記録の検討が進んでいる。熱電材料に関しても、米国では論文数が多く、かなり活発化している状況にある。また、中国や韓国でも熱電素子のプロジェクトが盛んに行われている。このように各国とも熱にはかなり注目しているということが言えるが、ナノスケールの熱制御に関して応用分野を超えて全体を俯瞰しながら戦略的に進めているものは無い。

ナノスケールの熱制御に関係する学問としては、電子工学、機械工学、材料工学、物理学、光学、化学などいろいろあり、また、学会も応用物理学会、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、エレクトロニクス実装学会などあり、様々な学術分野が絡んでくるようなテーマになる。なお、応用物理学会では3月にフォノンエンジニアリングのシンポジウムが計画されている。

## 5. 提案の方向性

### 5.1 熱に関する学理の追求と確立

#### ◆熱物性に関するナノレベルでの現象の理解の加速

- ナノ量子熱科学、ナノ熱制御工学の構築(ナノサイエンス分野に「熱」の概念を導入)
- 極薄膜、低次元系、界面における熱(フォノン)伝導の理解

#### ◆実験と理論両面からのアプローチの実施

- 薄膜、界面やナノスケールにおける熱物性計測技術の開発、それを使ったナノスケールの熱物性データの蓄積、マルチスケールシミュレーション技術開発
- ナノ材料の研究者と物性測定、理論・シミュレーションの研究者との連携

#### ◆新しい物理(スピン流、トポロジカル絶縁体等)の活用や異分野技術融合

- 飛躍的な性能向上への期待

### 5.2 熱輸送の制御技術の確立と材料デバイス革新

#### ◆ナノスケールでの熱輸送の制御技術開発

- ナノ構造・不純物などによるフォノン散乱の制御、界面エンジニアリング
- フォノンバンドエンジニアリング、新概念の創出
- エレクトロン(電子)やフォトン(光)の制御に関わる科学技術知見の利用

#### ◆ナノスケールの熱輸送制御技術を利用した材料・デバイス革新

- 電子、フォトン、スピンとフォノンとの一体的な制御技術開発
- 半導体集積回路、パワー半導体、光デバイス、次世代メモリ、センシングデバイス、熱電変換素子、HDD等の技術・産業への熱制御技術の提供

図 1-5

CRDSにおける事前調査活動では、大よそ30名の方に協力いただき、いろいろな項目に対して情報や助言をいただいた。これらから仮説としてまとめたのが図1-5に示す「提案の方向性」である。この方向性の一つは学理の追求と確立であり、もう一つは実際にそれをデバイスに応用していくというものである。

学理という視点で考えると、まだナノスケールの熱の現象の理解が十分に進んでいないので、現象の理解の加速というのが一つの大きなテーマとして取り上げるべきであろう。また、実験と理論との両面からのアプローチが必要だということもいろいろな方から助言があった。実験だけだとなかなかよく分からないところがあり、理論だけでも実際がよく

分からず、やはり両方から協力しながら進めていく必要がある。特に材料研究者と物性測定、理論・シミュレーションの研究者が密に連携してやるべきということが指摘された。さらに、新しい物理現象も積極的に取り上げるべきであり、スピン流を使った新しい原理なども積極的に取り上げるべきだと考えている。

応用に関しては、熱輸送の制御技術が重要であり、材料的な制御の方法や構造を変える方法、あるいは動的に変えるなど、いろいろなものが考えられる。そして、このような制御技術を実際を使って新しいデバイスを開発することや、従来のデバイスの高性能化を図るような研究テーマも重要と考えている。ここで示したものを提案の核として考えており、さらに具体的なものを提案の中では入れていこうと考えている。

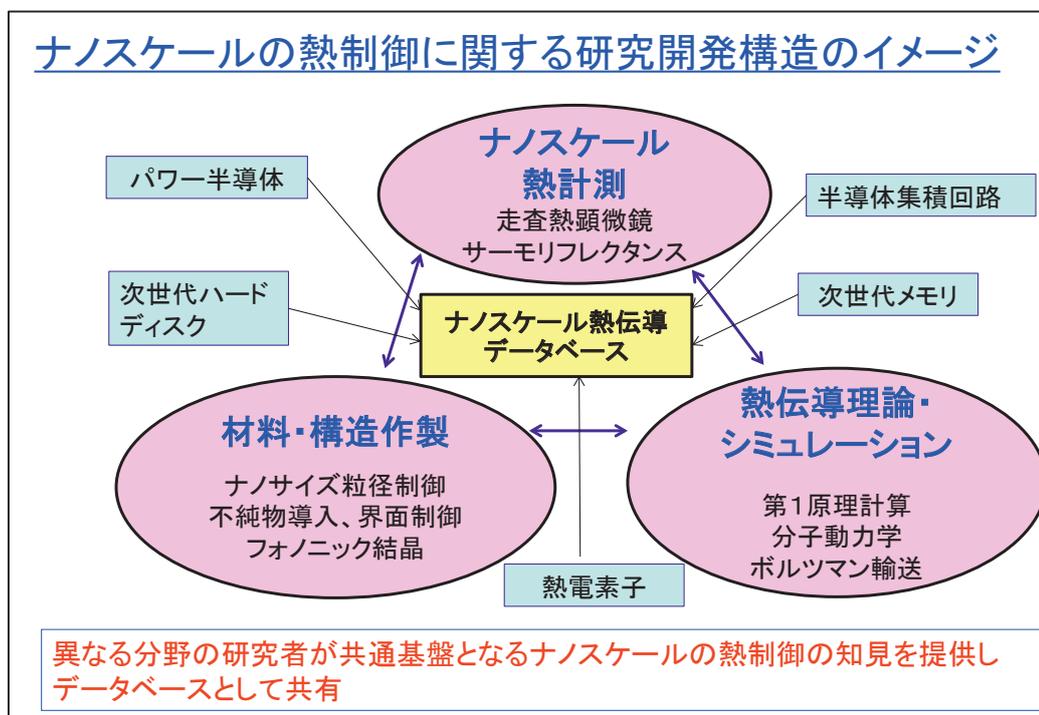


図 1-6

図 1-6 は「計測」、「材料」、「理論・シミュレーション」の研究者が一緒にやるべきということを示している。また、ナノスケールの熱伝導に関するデータベースがないので、これを作って関係者が共有する仕組みを作る必要があることを示している。

## 2. フォノンエンジニアリングの展望

塩見 淳一郎（東京大学）

フォノンエンジニアリングの基本方針は、まず対象のスケールが小さく速くなっていく過程における熱の特殊な輸送を理解し、制御することにある。材料に要求される機能としては、図 2-1 に示す様な超断熱、超熱伝導、熱スイッチ・整流、メモリ、蓄熱、変換等が挙げられ、いずれもナノ構造がキーであり、ナノスケールでの熱輸送の理解が重要である。

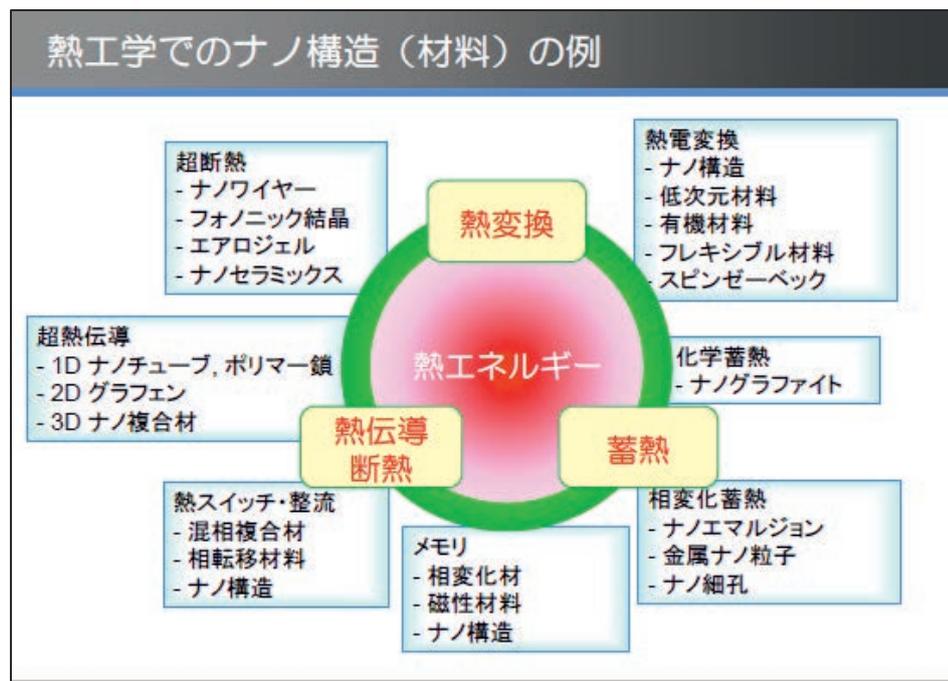


図 2-1

ナノスケールにおいて、(図 2-2 に示す様な様々な構造・機能・効果を用いて) 熱伝導率を下げるまたは上げることが可能であるが、ここでは界面フォノン散乱を例にして説明する。ある厚さのシリコンの薄膜がある場合に、横軸に厚さ、縦軸を熱伝導率としてプロットすると、薄くなるに従って見かけの熱伝導率がどんどん減少する。つまり、ナノスケールでの熱伝導はフーリエの法則に従わない。仮に実効的にフーリエの法則を使って熱伝導率を定義すれば、その熱伝導率はバルクの場合と大きく異なることになる。

これは図 2-3 の様にフォノンの持つ平均自由行程と界面の距離に相当する粒径の大小関係で説明が可能である。フォノンの平均自由行程と界面間の距離の比をクヌッセン数とすると、粒径がフォノンの平均自由行程よりも十分大きい場合、すなわちクヌッセン数が小さい場合はフォノン間の散乱が主となる拡散熱輸送の状態となり、バルクの熱輸送形態はあまり変わらない。一方、粒径がナノスケールに小さい場合、すなわちクヌッセン数が大きい場合はフォノン間での散乱よりも界面散乱が主となる弾道熱輸送の状態となり、熱伝導率が下がる。

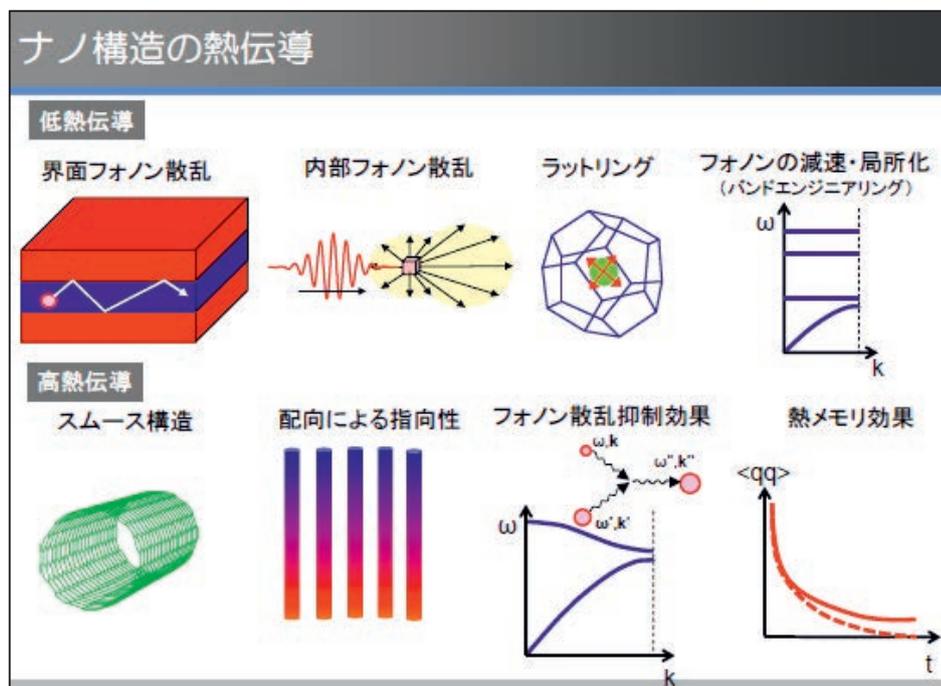


図 2-2

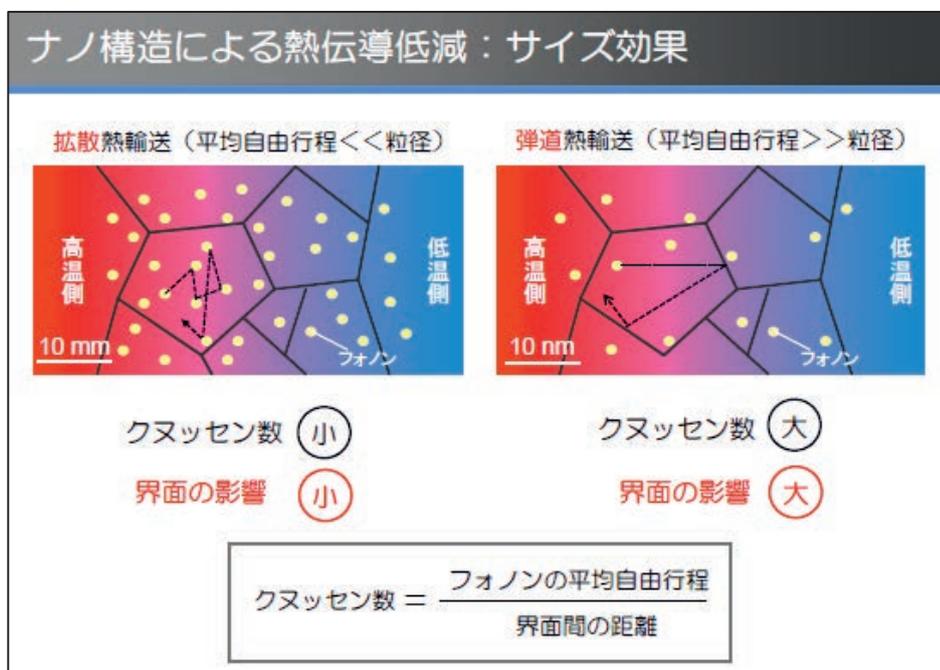


図 2-3

実際の材料では、フォノンは非常に様々な周波数を持ち、平均自由行程が大幅に異なる。シリコンを例にとると 5 桁や 6 桁も違うこともあり得る。このため非常に小さいスケールであっても拡散熱輸送にも弾道熱輸送にもなり得るので、実際はこれらが混ざった準弾道熱輸送となるが、いずれにしてもナノスケールになると見かけの熱伝導率は減少する。

実例としてシリコンナノ粒子を焼結したナノ多結晶材料を挙げる。シリコンの粒界をフォノンの平均自由行程よりも小さくすると、熱伝導率は単結晶の  $100 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$  からナノの  $5 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$  まで 20 分の 1 ほど低減するので、シリコンの様なユビキタス材料でも熱電変換性能指数が 0.5 まで上げられる。

ただし、フォノンエンジニアリングの取るべき戦略としては、これらの成果を偶発的に得るのではなく、物性評価、材料合成、理論・数値解析を三位一体で進めて行く中で、確立した原理原則に基づいて計算で予測を立てて、材料を合成し、さらに物性を評価していくことにあると考える。この際に巨視的に素子の作製、熱伝導率評価、そして熱伝導率の計算という課程を追いかけて行くのではなく、微視的な視点を持って、フォノンそれぞれの平均自由行程を計算した上で計測を行い、界面を対象にその熱抵抗を検証することが重要になる。

まずはナノ構造の作製と機能発現についてであるが、図 2-4 に示す様にアメリカと日本を対比して紹介したい。まずはアメリカではナノ細孔や超格子あるいはナノワイヤーを形成し、その形状的な特長を生かして熱伝導率を劇的に減少させる試みや、逆に一般的には熱伝導率が悪いポリマーを伸長することで金属並みの熱伝導率まで増加させる研究が行われている。また傾斜材料により熱ダイオード機能を発生させるという画期的な試みも進められている。一方、日本では二次元の層状構造やカゴ状化合物によるラットリング機能などで伝導率を大幅に下げる研究や、フォノンニック結晶、スピンゼーベック効果の様に新しい機構やシステムを提案する研究が活発な進展を見せている。



図 2-4

一方、関連する計算技術にも大きな進歩がみられる。分子シミュレーションをメゾスコピックのシミュレーションにつなげることで非常に複雑なシステムやスケールアップした

ような大規模計算ができるようになってきている。さらに近年では第一原理に基づく計算アプローチによる結晶材料の計算での精度が非常に上がり、単結晶や合金そして精度は若干落ちるがナノワイヤー、ナノ構造体での計算がある程度の精度で可能になってきた。これらの結果を抽出し、得られた材料設計指針を試すべきレベルまで計算科学が進展しており、今後ナノデバイス全てについてフォノンの非平衡性を取り入れた上で設計することに取り組んでいきたい。図2-5で実際に行っているマルチスケール・フォノンシミュレーションについて説明する。第一原理をもとにして分子動力学計算、格子動力学計算を併用しながら単結晶または合金結晶のフォノン輸送物性を導出した上で、これらをモンテカルロ計算に入れることによって、複雑なナノ構造の計算ができる。

こういったシミュレーションツールで得られている成果の代表例の一つとして、累積熱伝導率がある。フォノンは1つの材料を取ってみてもいろいろな平均自由行程を取り得て、それぞれ違う熱伝導能すなわち熱伝導率への寄与を持っている。このため、横軸に平均自由行程、縦軸に熱伝導率への寄与というプロットが成立する。平均自由行程が短いほうから累積する形で熱伝導率への寄与が記述可能で、それぞれのフォノンがどのぐらいの熱を運んでいるかを指標としてプロットする。

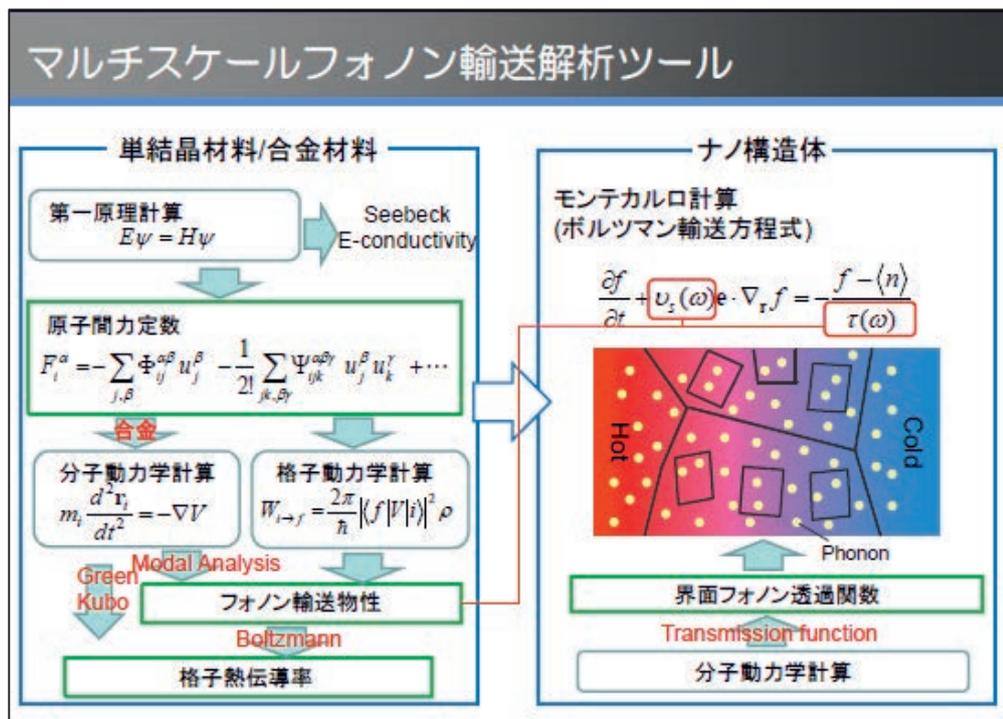


図 2-5

実際に計算結果から設計を行い、ナノ構造を形成して最適化が可能であるという1例を図2-6に示す。熱電変換材料でp型ハーフホイスラー化合物というのがあり、基本的には3元素から構成されている。その組成調整により、変換特性の最適化を測る際に、まず電子状態計算によってどの置換元素をどのぐらい置換すると熱伝導率が最低となるかを同定し、その得られた最適組成で材料を作製する。その結果として、p型ハーフホイスラーと

して変換効率世界一のチャンピオンデータを得ることができた。現状でこういった成功例はまだ限定されているが、シミュレーションツールの成熟によって今後どんどん増えて行くと予想される。

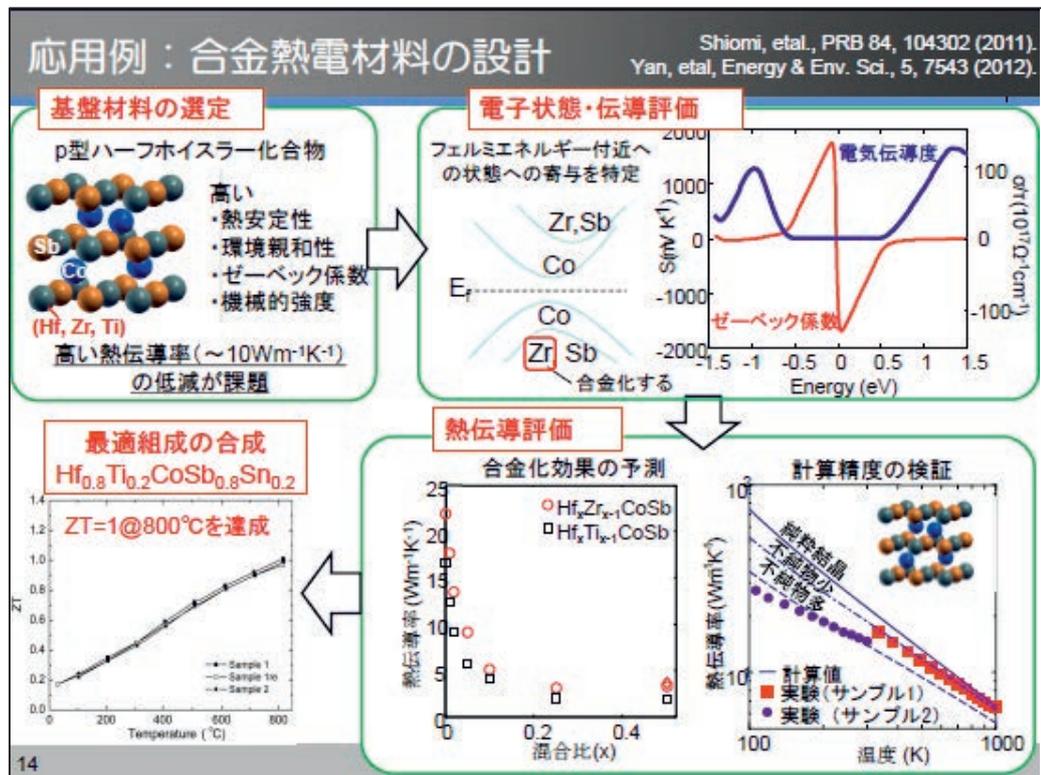


図 2-6

最後に計測に関しては、様々な計測技術がここ 10 年ぐらいで飛躍的に発展してきた。ここではサーモフレクタンス法を例にとりて説明する。表面をフェムト秒のパルスレーザーで加熱し、表面温度の過渡的な緩和履歴をピコ秒オーダーで計測する。これを熱伝導方程式により合わせ込むことで、極めて局所的な微小空間の熱伝導率または界面熱抵抗が算出可能になる。この手法を用いて熱伝導スペクトルを予測する研究が進んでいる。対象材料をレーザースポットで加熱する。レーザースポット径がフォノンの平均自由行程より短い場合は、フォノンのサイズ効果と同様に熱伝導率はこのレーザー加熱領域に依存することになる。レーザー径を変えることによって得るスペクトルにより、横軸に平均自由行程、縦軸に熱伝導率の寄与という情報が得られる。ただし、レーザーは回折限界があることから、10 nm オーダーの直径のみを過熱するのは容易ではない。そのため我々はプラズモン吸収によって表面に堆積した金ナノ粒子のみを加熱する方法に取り組んでいる。これにより加熱領域が 30nm ~ 100 nm の範囲のナノレベルで局所化することが可能になり、それぞれからのフォノンの平均自由行程をある程度同定することができる。もう 1 つサーモフレクタンス法の利点として、界面の熱コンダクタンスの直接測定が可能という点があげられる。シリコンとシリコンにサンドイッチされた 2.4 nm の酸化膜の熱コンダクタンスが実測できるようになり、それらのデータは実際にデバイス構築する際に役立つ。例えば、パッケージ

ングを行う際に表面活性化接合と言われるアルゴンビームで材料表面を照射した上で接合する技術が使われるが、接合界面には薄くアモルファスのシリコン層が存在する。このアモルファスシリコン層による熱抵抗の測定が可能になることに加えて、アニール処理により再結晶化することで熱抵抗が劇的に減少する様子の計測や定量化が可能になる。工学的な視点からはこれを踏まえた界面でのナノ構造形成による熱伝導性の制御が期待される。シリコン界面に様々なサイズの酸化物析出層を析出させると、この方法でそれ自体の熱抵抗が計測できる。つまり、どの様な構造になると熱抵抗がどの程度になるかが分かるので、そのデータをシミュレーション結果と組み合わせることで、どんな界面でどんな析出構造があると、材料全体として熱伝導率がどうなるかが分かり、こういった実験と計算との組み合わせの蓄積により、より大きなスケールでの設計指針が得られるようになる。

上記を踏まえて、フォノンエンジニアリングの展望または戦略という視点で図 2-7 にまとめる。まずは界面原子構造による熱流制御がキーとなり、内部の構造によるフォノン散乱を利用する技術の確立が必要となる。例えば超断熱材料では非晶質（アモルファス）が重要になり、アモルファス同士の界面設計が重要なポイントになるとも考えられる。熱伝導率を上げるには、低次元材料によってフォノン散乱を抑制する効果が議論されており、二次元材料、一次元材料を使って熱伝導率を上げていくことが考えられる。ただし、最終的に複合材料となった場合のトータル設計が重要であり、いくらナノ材料それぞれが熱伝導率を上げても駄目なので、システム全体が物理的につながりだけでなく、熱的につながった熱的パーコレーションが確立されていることが大事になってくるであろう。また、フォノンを粒子としてだけでなく、波動的な特性も考えたバンドエンジニアリング設計を考えていく必要が出てくる。こういったナノ構造をそれぞれ単独で使うのではなく、組み合わせることで熱伝導スペクトルの制御が可能になるとともに、電子やスピン、マグノン、光、他の準粒子との変換またはそれらとの相関の制御の確立にもつながっていく。また、実効的な応用においては熱伝導率の温度依存性の制御を考慮する必要がある。熱伝導率の温度依存性は単結晶だと大体分かるが、それを踏まえて複合化により、高温ほど熱伝導率が上がる材料の作製が可能になる。さらには複合の材料化で構造をダイナミクスに変えることによって、スイッチング素子の形成を可能にするというのも重要な点であり、こういう革新的な展開が期待されている。

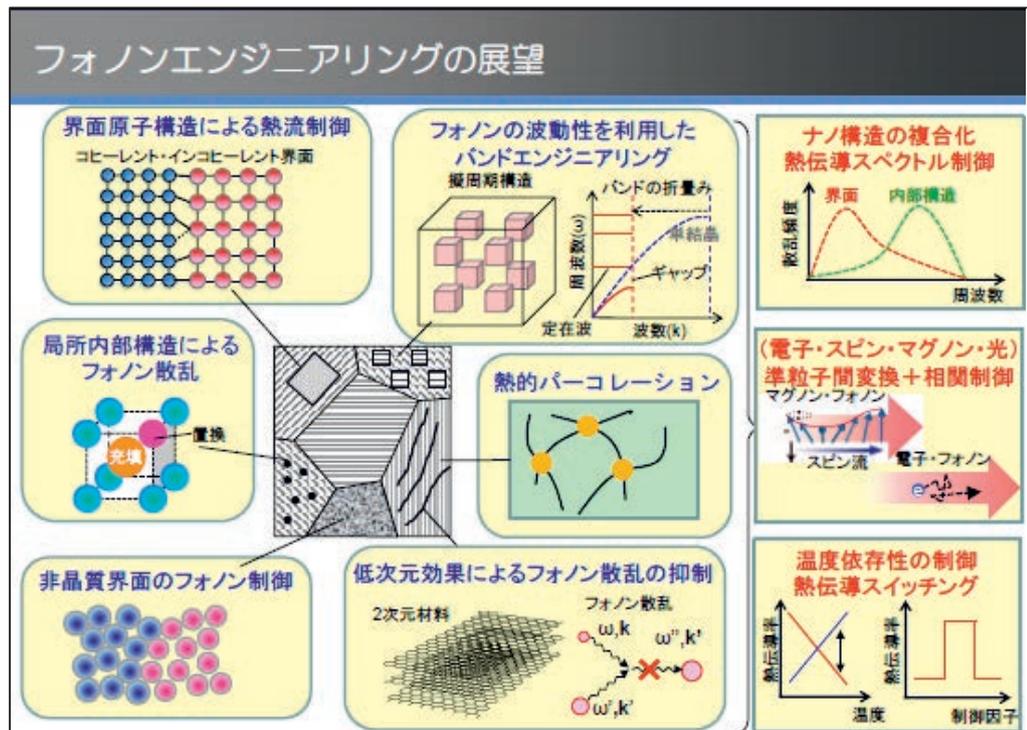


図 2-7

フォノンエンジニアリングはホームグラウンドが特定の分野に限定されないテーマであることから、各学会で一流の研究をしているだけでもダメであり、それらの境界領域の真ん中にある富士山の頂上には、各学会で行われていた努力を融合することで到達しようとする。近年、合成・計測計算技術が著しい発展を見せ、フォノン散乱、波動干渉、量子効果、低次元異常輸送、熱的パーコレーションなどによる熱制御性が格段に伸びている状況にある。機能としては、熱伝導スペクトル制御、多準粒子系変換、相関制御、あるいは熱伝導の温度依存性制御やスイッチングが今後期待される。単一材料や同系統材料などのシンプルな系はもちろんのこと、無機・有機の複合系材料を含めて複数材料が複雑化された系への展開が課題となる。また、結晶材料や非晶質材料等の複合化は実際のデバイスでの適用を検討する必要もある。フォノンエンジニアリング研究は、アメリカでかなり活発に行われ、有力なコミュニティが育ってきた。これに対して日本では、個々の技術は全く負けておらず、テーマによっては勝っているものの、これまではそれぞれ個々に努力してきたという背景があり、今こそこれらを融合するようなプロジェクトが必要であり、基礎技術の積み上げが重要ではあるものの、応用展開、産業ニーズを踏まえた上で複合機能としての適用を念頭に置いた研究開発が必須となっている。

【質疑応答】

Q：基本的にはフォノン散乱が少ない方が熱伝導が高いということか。

A：フォノンの数は決まっており、フォノン間の散乱は同じ頻度で起こる。フォノンの周りの密度は変わらず、フォノンの平均自由行程も変わらない。ただし、フォノン間で散乱する前に界面散乱が生じる。界面との散乱頻度が総じて上がることによって熱伝

2. フォノンエンジニアリングの展望

導率が下がると理解していただきたい。

Q : 量子効果とは具体的にはどういうものか。熱伝導の量子化とも関係してくるのか。

A : 熱伝導の量子化、比熱の量子化ということもあるが、状態密度そのものが変わってきてしまう。ある程度大きなスケールの材料では中側はバルク材と変わらない状態であり、それに界面を足したと考えられるが、対象をどんどん小さくしていくと内側と界面の状態が切り分けられなくなり、状態密度そのものが変わってしまう。

コメント : 物性、理論、合成の3つに分類してあるが、構造をもっと強調すべきではないか。実際は理論が独立した1個の柱ではなくて、物性評価にも構造評価にも材料合成にも理論は関わるはずである。理論は物性評価、材料合成、構造解析の3つの真ん中にあり、それら3つ全部を賄っている形で考えるべき。

Q : 日米の比較の中で米国では熱ダイオードの研究が行われているという話があった。PN接合がベースになってトランジスタが出来上がるが、正孔と電子と全く違ったキャラクターが2つあって初めて整流作用ができる。熱の場合はどういう原理でダイオードを作るのか、また何で整流性をスイッチさせるのかを教えてください。

A : この研究を行ったグループは Science 誌で、実験により6%程度(の整流作用)を得ていると主張している。フォノンの非平衡性を使っている点がポイントで、小さいスケールで構造が作製できれば、フォノンの分布関数を曲げることも可能になるはずであると言われているが、原理的に起こりうるかどうかも含めてまだまだ議論がある研究だと考えている。

Q : アモルファスと結晶の界面を使い分けて、熱伝導率をコントロールするのは大変分かり易いが、先ほどはアモルファス同志の界面を利用すると面白いことがあるかもしれないとの説明があったが、どういう意味か。

A : 物理的にどう突き詰めれば何が得られるという話にはまだなっていない。そもそもアモルファスのフォノンの取り扱いすら分かっていないので、その解明からスタートする必要があると考える。実際の断熱材等においてアモルファスとアモルファスの接合が行われるが、界面においても熱伝導を抑制する必要があることから、低熱伝導のバインダー等を入れることが多いと聞いている。どういうものを界面に入れれば元々低熱伝導のアモルファス材料の特性が最大限に生かせるかを調べる必要がある。ただし、ここではもっと基礎的なアモルファス中でのフォノンの伝播の取り扱いのあり方からスタートする。

Q : 本日の御講演は無機材料、無機結晶を前提にされていると感じたが、フォノンエンジニアリングの中に有機材料の機能や効果を活用するという視点があっても良いはずで、有機・無機材料による界面の利用という考え方もあるのではないか。

A : 有機・無機界面というのはこれまであまり考えたことがなかったが、有機材料はコストやスケールアップ可能という点からも非常に重要だと思う。先ほどの計算の進歩について述べたグラフでも有機材料に関する仕事がたくさんあり、PEDOTの熱伝導もあり、有機材料の中にナノチューブが入ったもののシミュレーションも含めて沢山研究が行われている。アモルファスの話と同様にどの様な理論的フレームワークで考えていけば良いかを検討するのが急務である。有機材料を伸長することにより熱伝導率が100倍になるという研究もあるが、そういった基礎原理を解明し、それらの制御性、

スケールアップ性を確保することも非常に重要な課題である。

Q：ナノデバイスにおける熱の発生について、コメントをお願いしたい。

A：理想的にはエレクトロン-フォノンカップリングの関係を解いて、どこでホットスポットができて、それがどう消散していくかを全て追い求めて追跡することが重要だが、シミュレーションでやると非常に難しく、計測でもイメージングの解像度が課題になってくる。このため、いずれも全部やるよりは何段階に分けて別箇にやっていくしかないと考える。ただしそれぞれの技術は発展してきており、これからはそれらの融合により費用効率も含めて、どう上手くやっていくかを検討する段階になってきたという見解である。

### 3. 応用分野からの「ナノスケール熱制御」への期待

#### 3.1 ナノスケール抵抗変化メモリ (ReRAM) における「熱」の役割

島 久 (産業技術総合研究所)

ナノスケール抵抗変化メモリ (ReRAM) 技術の紹介と、この技術がナノスケール熱制御に期待することを述べる。

抵抗変化メモリ (ReRAM) は、図 3-1-1 に示すように電極間に酸化物が積層された非常にシンプルなメモリ素子構造を持つ。この電極間に電圧を印加すると、抵抗値が不揮発的に変化する。素子作製直後の初期抵抗状態から低抵抗状態へスイッチングし、さらに電圧を印加すると再び抵抗が増加して高抵抗状態となる。この2つの状態の間のスイッチングは可逆的であり、不揮発的に抵抗値が保持される。ここで、低抵抗状態から高抵抗状態をリセット、逆のスイッチングをセットと呼び、最初の動作だけフォーミングと呼ぶ。

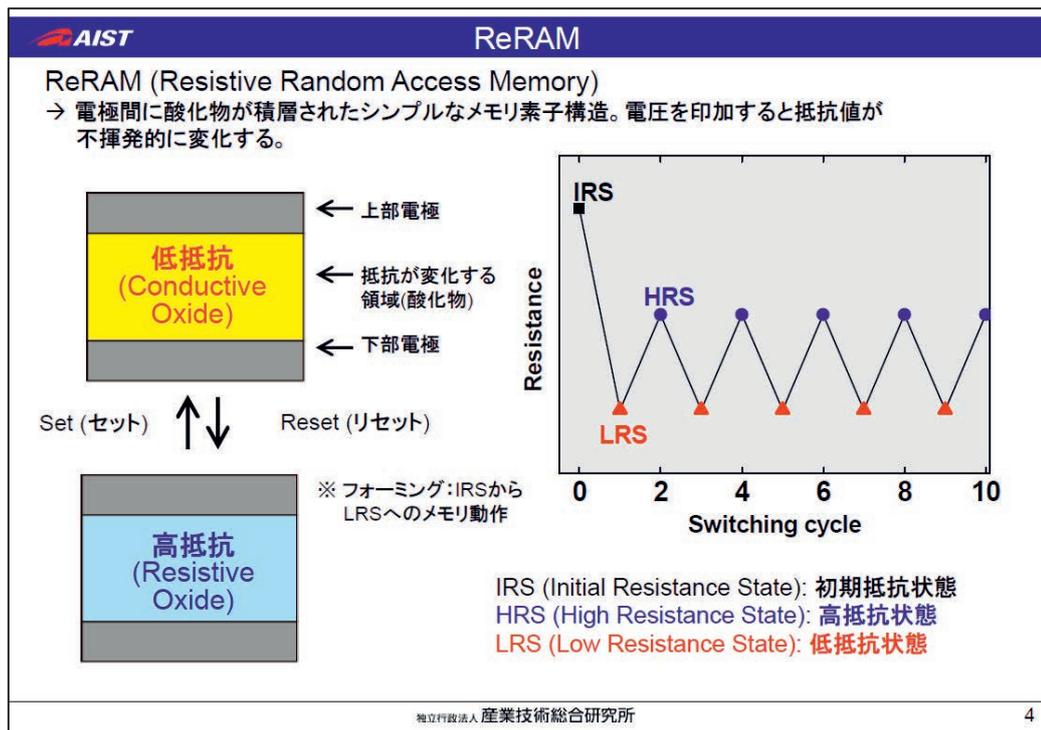


図 3-1-1

このメモリの長所を述べる。10 nm 以下の非常に微細素子でメモリ動作が実証されており高集積化に適していることや動作電流や電圧、速度といった観点から省エネルギー性に優れていること、現行の半導体微細加工プロセスに用いられている材料を使って作ることができるのでプロセス親和性が非常に高いことなどがあげられる。このメモリの場合、電極間に電圧を印加すると抵抗値に応じて電流が流れるので、ジュール発熱によって素子の温度が上がる。一方で、ReRAM の動作原理上、動作速度やリテンション (情報保持時間)

といった特性は熱の影響を受ける。したがって、熱制御が動作の性能に深く関わってくる。

動作原理について図 3-1-2 に示す。このメモリは酸化・還元反応がメモリ動作を担っているということが分かっている。フォーミングを行うと、メモリ素子中にメモリ動作する領域が形成される。このときに酸化物中から酸素が引き抜かれ、低抵抗化する。リセットの動作では図の黄色い領域を酸化し、逆にセットの動作では再び還元し酸素を引き抜くことによって抵抗が変化する。このように酸素が移動して酸化・還元反応が起こることによって、抵抗値が不揮発的に変化する。酸化・還元反応の例として、例えば酸化物が酸化チタンの場合、抵抗の高い相から金属イオンの価数が低い相へ変化することによって抵抗値が減少する。あるいはタンタルやハフニウムの酸化物の場合、膜中に酸素欠損が生成されることによって抵抗値が減少するということが分かっている。

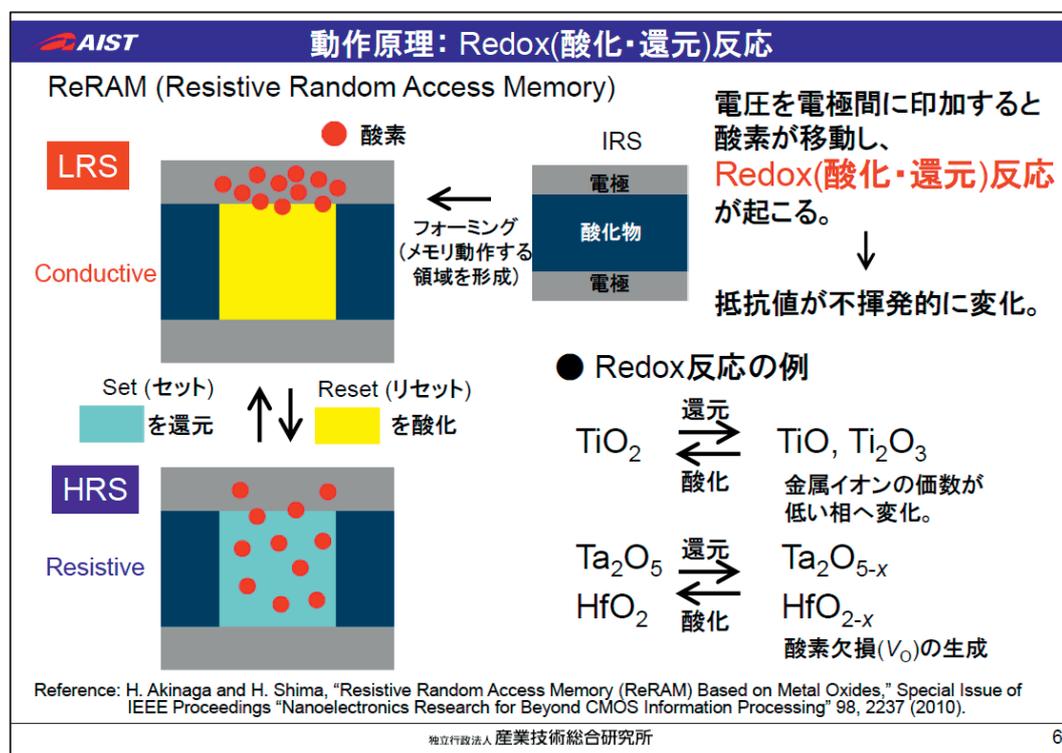


図 3-1-2

一般に拡散の係数は温度に依存するが、酸素についてももちろん例外ではない。図 3-1-3 の右図はハフニウム酸化物中の酸素の拡散係数を計算した文献値で、その値を基に 1 nm の距離を酸素が移動するのに必要な時間を見積もった (図 3-1-3 左図)。ここでは一次元のランダムウォークを仮定して時間を計算している。例えば温度が 700 K 程度の場合には 1 nm の距離を酸素が移動するのに数十 ns かかるが、1000 K 程度の温度になると数 ns と高速な時間で移動できることが分かる。このように温度が高いほど酸化物中を酸素が高速移動できるので、スイッチングのために電圧を印加した時に生じる電流による発熱は、メモリの高速動作に利用することができる。

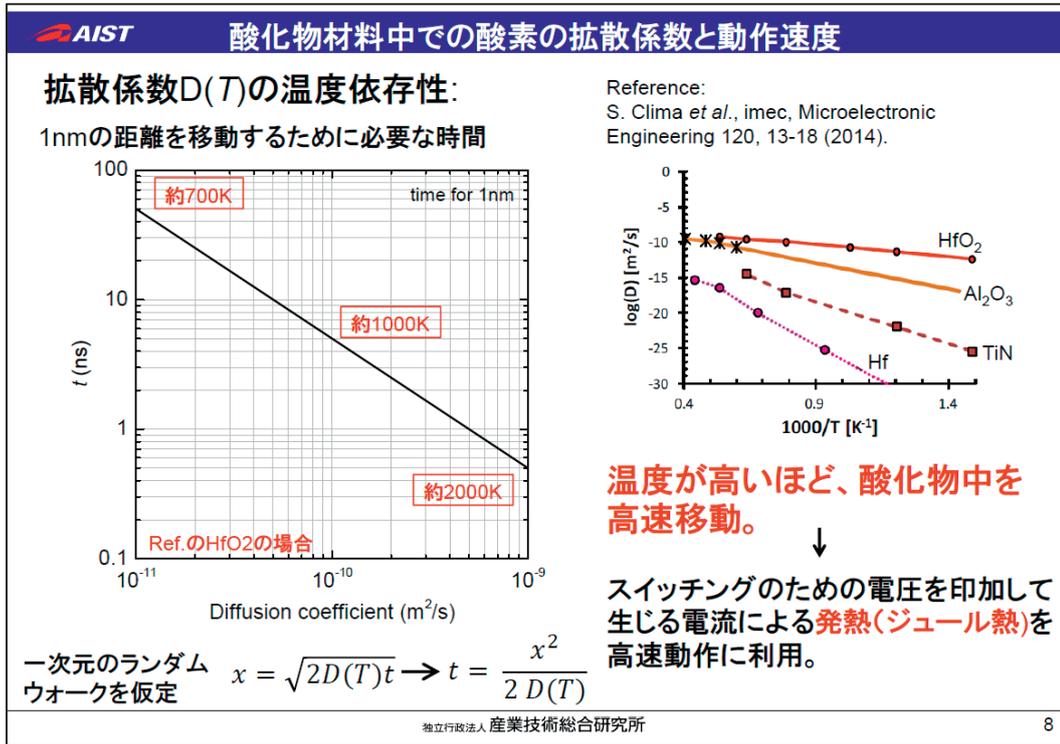


図 3-1-3

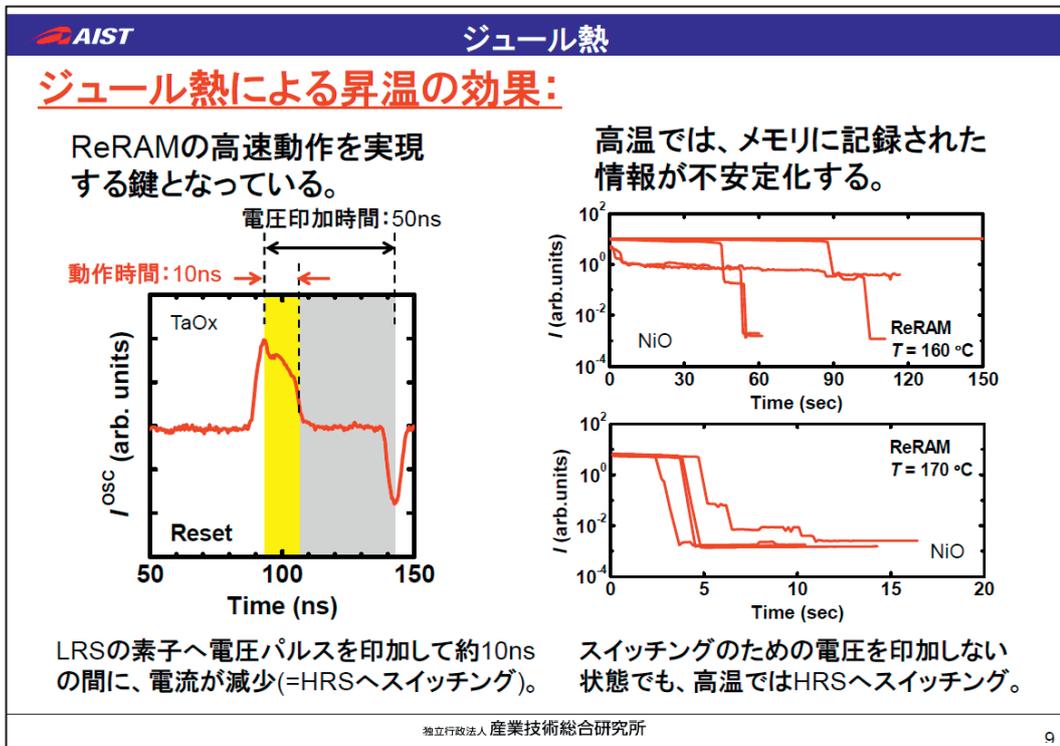


図 3-1-4

実際、図 3-1-4 の左図に示すように低抵抗状態の素子に幅 50 ns の電圧パルスを印加すると、電圧印加後 10 ns 程度の非常に短時間で電流が減少し、高抵抗状態へスイッチングすることが分かる。一方で熱エネルギーというのは別の要素を持っており、高温ではメモリに記録された情報が不安定になってしまう現象が起こる。図 3-1-4 の右図はメモリ素子をそれぞれ 160°Cあるいは 170°Cに昇温して、非常に弱い電圧で抵抗値を読み出したものだが、スイッチングに必要な電圧を印加しない状態でも抵抗値が増大し、高抵抗状態へのスイッチングが起こる。つまり ReRAM にとって熱は高速動作に必要なものである一方で、信頼性にも関係する因子となる。したがって、省エネルギー性と高信頼性を両立させたメモリの開発にはナノスケールの熱制御が必要不可欠であるということがいえる。その実現に向けて ReRAM の開発の側からは、メモリ素子に用いる薄膜材料の熱物性評価とメモリ動作時の温度分布シミュレーション技術に大きな期待を寄せている。

メモリ用薄膜材料の熱物性評価について説明する。われわれが ReRAM の薄膜の熱物性の測定で特に注目しているのが、図 3-1-5 に示すパルス光加熱のサーモリフレクタンス法である。この技術は産業総合技術研究所の計測標準研究部門によって開発されたもので、この測定では金属の反射率が温度依存性を持っている“サーモリフレクタンス”という性質を利用している。透明なクォーツ基板の裏面から加熱光を入射して薄膜を加熱し、表面の温度変化に伴う反射率の過渡的な変化を測定することで、薄膜あるいはこの膜の中に界面がある場合には界面の熱抵抗を評価することができる。われわれは実際にメモリ素子に用いているさまざまな酸素濃度あるいは材料の酸化物薄膜を用い、この上下の金属膜に実際にメモリ素子の電極の候補となっている材料を使って、実際の素子に近い形での熱物性の評価を試みている。

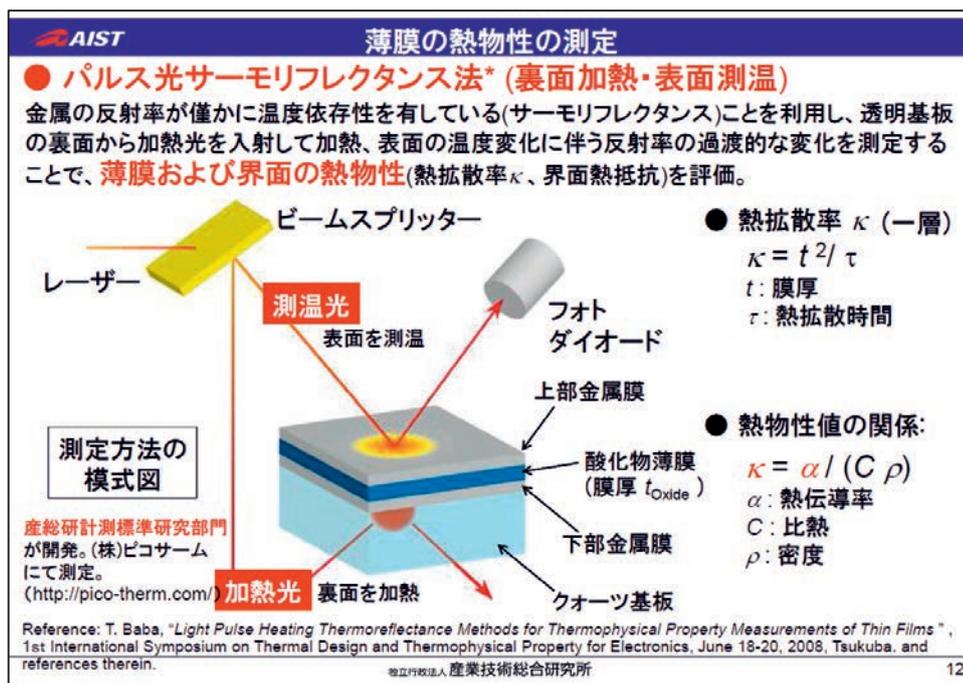


図 3-1-5

その評価結果を図 3-1-6 に示す。ここでは金属薄膜にはプラチナ、酸化物には非常に良好なメモリ特性が得られているタンタルの酸化物を用いた。左図がサーモリフレクタンス信号の時間変化で、飽和する時間が膜厚に依存していることが分かる。右図の黄色の領域の面積熱拡散時間から熱拡散率を評価することができ、また膜厚依存性を調べることで界面の熱抵抗も決定できる。

成膜時の酸素量を調整したさまざまなタンタルの酸化物について、従来は電気抵抗率のような電氣的な量の評価を主に行ってきた。今回この手法を用いることで、電氣的特性に加えて熱伝導率のような熱物性値もあわせて評価することが可能となる。これらの物性値を用いてメモリ動作の温度分布シミュレーション等へ活用することができると考えている。また界面の熱抵抗も併せて評価することができる手法なので、例えば実際のデバイス内部の界面、あるいはデバイスとその周辺領域との材料の界面を想定し、それを構成する積層構造を評価することで実際の素子に極めて近い構造の界面の熱抵抗を調べることができる。ReRAM の開発にとって非常に強力な評価手法であると考えている。

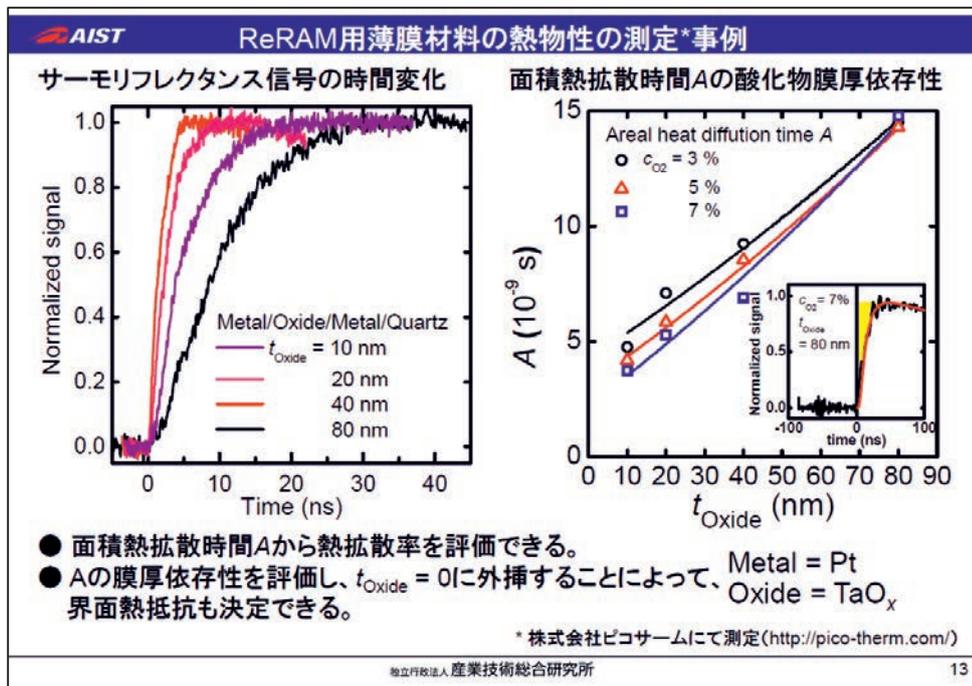


図 3-1-6

このサーモリフレクタンス法で測定した熱物性値を用いて素子中の温度分布のシミュレーションを行った。図 3-1-7 に示した構造および材料を用いた低抵抗状態の素子を仮定し、リセット動作時の温度分布について計算を行った。低抵抗領域の熱物性値は、導電性のあるタンタル酸化膜をスパッタで作製して評価した実測値を用いた。また、絶縁体的な Ta<sub>2</sub>O<sub>5</sub> や白金層についてもサーモリフレクタンス法による熱物性値の実測値を用いてシミュレーションを行った。計算結果を図 3-1-8 に示す。印加した電圧パルスは実際のスイッチングと同程度の電圧を印加している。この結果より、メモリ素子中では酸素の高速な拡散が可能な 1000 K 程度の温度域までジュール加熱されていることが推察される。また、右図は温度の時間変化だが、温度上昇も極めて高速に起こるという結果が得られた。ただ

し今回のシミュレーションでは、各物性値の温度依存性等は考慮されていない。また界面の熱抵抗を考慮することまではできていない。

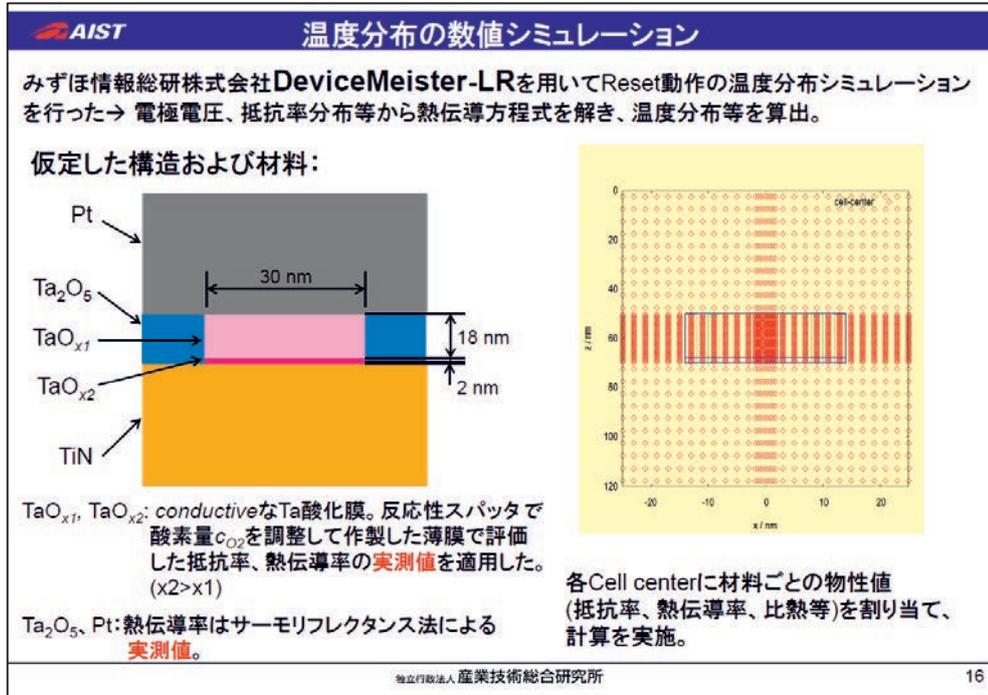


図 3-1-7

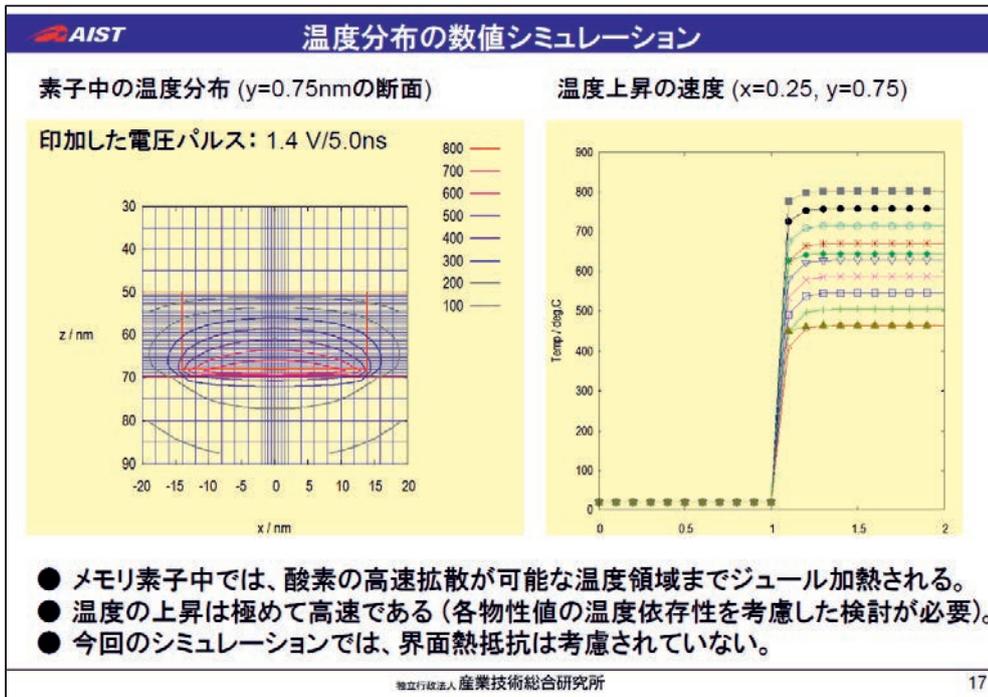


図 3-1-8

このようなシミュレーション結果は、メモリの構造や動作条件、信頼性評価などの研究開発にフィードバックができる。例えば、効率的な加熱を行うためにはどんな金属材料や酸化物材料の組み合わせが必要か、あるいはメモリ動作領域の中の抵抗値がどの程度であることが重要なのか、あるいはメモリ動作領域外への熱伝導とリテンションの関係についてなどの知見がシミュレーションによって得られると期待している。

以上をまとめる。ReRAMのメモリ動作の起源が酸素の拡散であり、熱が非常に高速動作をもたらす一方で、信頼性にも関わる因子となっている。したがって、実デバイスと同じ材料や積層構造を持った薄膜の熱物性評価やその物性値を用いたシミュレーションが、このメモリ技術のさらなる革新に向けて有効である。実測した熱物性値に基づいて界面の熱抵抗を含む系のシミュレーションを行い、さらにデバイスの構造にフィードバックするというような研究開発プロセスや手法の確立が、このメモリ開発を今後進めていく上で重要であると考えている。

#### 【質疑・応答】

- Q：「現状の ReRAM の特長として、（口頭説明にはなかったが）エンデュランス（書き換え耐性）が  $10^{12}$  回であり、10 nm 以下の微細化も可能である」、とされた。しかし以前実施された NEDO の高速不揮発メモリ開発事業の終了時報告においては、書き換え耐性は  $10^6$  回が限界であるということや、10 nm 以下だと縦型 MOS 構造にしなくてはならないが干渉効果があるため微細化は難しいとの報告結果であった。その当時はアルミナやハフニアという材料を使っていたが、今回のタンタルやチタンナイトライドなどの材料にしたことが、書き換え耐性向上や微細化につながったのか。
- A：今回紹介した特長は、ReRAM の研究開発の世界的な状況をいろいろ調査した結果であり、トップデータを集めたものである。素子サイズについては、ハフニアやアルミナの系でも微小な素子サイズで動作が実証されているケースはある。しかし、動作実証ができていることと、メモリアレイレベルで全てのレイ中の素子で十分な性能が得られることは違うものではないかと考えている。また書き換え耐性についても、 $10^{12}$  回というのはトップデータであり、例えばウェハ内の全ての素子の典型的なデータを測定すれば、もう少し減ってくるのではないかと考えている。また、書き換え耐性向上の取り組みはいろいろな機関で行われている。例えば界面の平坦性を改善するとか、材料を変えずに構造やプロセス上の改善で書き換え耐性が上がることも分かっている。
- Q：シミュレーションについて。界面の熱抵抗は入っていないとのことだったが、三層構造の各層のバルクの熱抵抗を組み合わせるのか、それともフォノンの分散も考慮しているのか。
- A：このシミュレーションで使用するソフトウェアでは、それぞれの Cell center と呼ばれるポイントごとに、まず材料ごとに割り当てた電気抵抗率から電圧印加したときの電流値を求め、さらにこれらを用いて発熱量  $Q$  を計算し、それを基に熱伝導に関する非定常状態の方程式を計算して温度分布等を求めている。ただしここで用いた物性値は、実際にメモリ素子を作製しているプロセスと全く同じプロセスを基に薄膜を形成

し、この薄膜に対して測定した電気抵抗率や熱物性、熱伝導率等を用いている。

- Q：酸素の移動とは酸素イオンのことだと理解しているが、材料によって酸素イオンの拡散係数の温度依存性が違うというのは、活性化エネルギーが違って、どこかトラップサイトへ行くということか。そのトランスポートはどうなっているのか。
- A：活性化エネルギーのデータを今回は示してないが、その可能性は一つある。また図3-1-3で示したハフニウムオキサイドやアルミナなどの拡散係数は、結晶性の材料を仮定した第一原理計算で求めた理論計算の値である。薄膜中の比較的低い温度での酸素の拡散係数の実測は技術的に難しい測定であるため、今回は計算値を用いた。
- Q：計算値ということは、実態とはかなり違っている可能性はある。実際の薄膜だと酸素イオンもいろいろな所で引っ掛かるのではないか。
- A：その通り。実際に成膜した薄膜では結晶化しているような薄膜も見られるし、その場合アモルファスの膜と結晶粒界を持っているような膜では、薄膜中の拡散の状況が非常に異なることは十分に考えられる。したがって、このメモリの動作が酸素の移動であるということと関連し、ナノスケール領域で酸素の移動自体を検出できる計測・分析技術が非常に重要になると考えている。
- Q：電場をかけたときの電位分布は均一に考えてられているが、界面で電位が落ちることなどは考えていないのか。
- A：われわれが扱っている材料は、動作している場所でショットキータイプの界面というよりはオーミックな界面を作るような材料を中心に扱っているので、どちらかといえ、薄膜のバルク領域に電界がかかっている状態を想定している。

### 3.2 次世代パワー半導体の放熱問題

山口 浩（産業技術総合研究所）

シリコンカーバイド（SiC）およびガリウムナイトライド（GaN）の活用に向けて、熱の話題を紹介する。

パワーエレクトロニクスとは、情報の“ビット”を扱うのではなく、電力の“ワット”を扱う技術領域である。小さい所は数ワットの世界から、電力系統などの大きな所はギガワットの単位まで、非常に幅の広いエネルギーの領域を扱う。図 3-2-1 に示すように電力流通の過程には、発電から送配電、電気を貯める蓄電、最後に電力を使う消費までの一連の流れがある。それぞれの段階における電気エネルギーの流れ、あるいは電圧や電流、周波数、位相などをきちんとコントロールするための道具立てが必要である。スマートグリッドなどでこれを実現する際、電力の制御ツールとなる電力変換器が不可欠である。現在主力のシリコン（Si）のパワー半導体では比較的低電圧や低速動作を扱う領域は十分にカバーできるが、より高い電圧や高速動作を扱う領域になると Si ではカバーができなくなるため、SiC や GaN のような新しい半導体材料が着目されている。

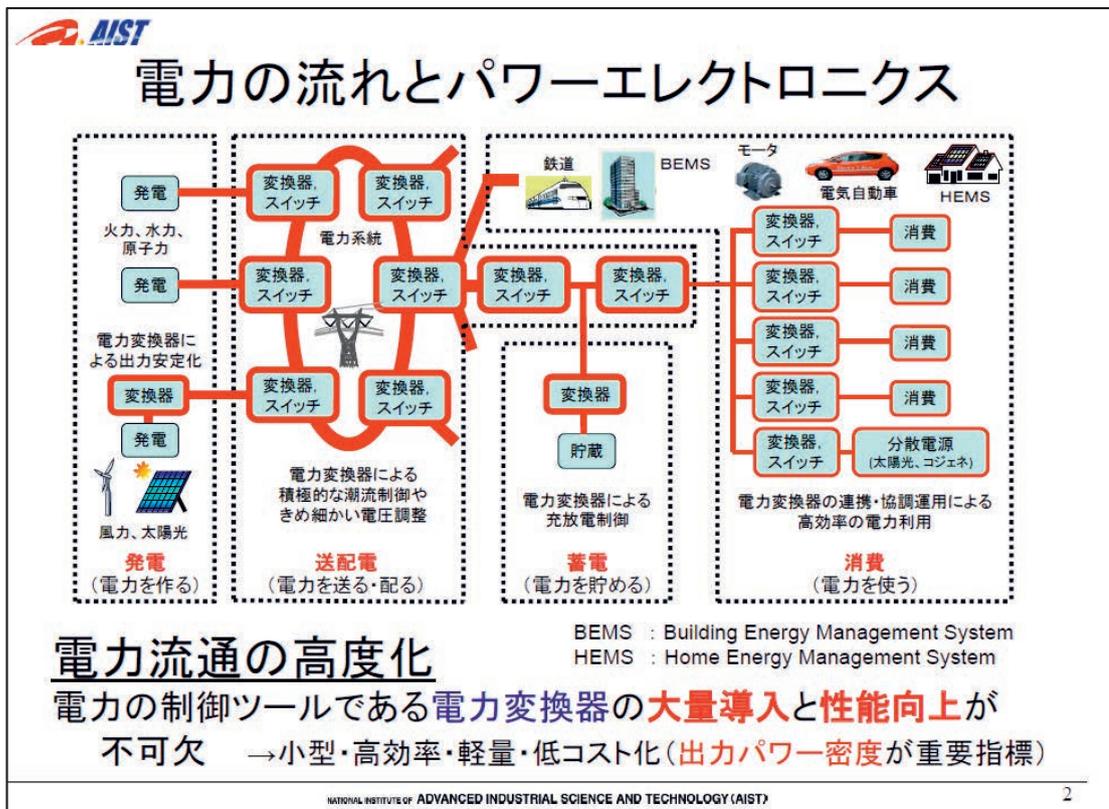


図 3-2-1

特徴を材料物性面から整理する。際立って特徴的なことは、Si に比べて SiC や GaN の破壊電界強度が極めて大きいことである。これは同じ厚さであれば Si よりも高耐圧の半導体素子ができることを意味する。あるいは同じ電圧ならば Si と比べて薄くできるので、

低損失な素子にできる。特に SiC は非常に熱伝導率が良いので、大きな電力を扱う場合にこの特徴が非常に魅力的となる。

われわれの研究機関では、現段階において、大電力の用途に関しては SiC、小容量だが高速動作の用途に関しては GaN のパワー半導体が適していると考えている。現在の Si のパワー半導体では下は数十 V から上は数 kV までの電圧領域を扱っている。それに対し、SiC のパワー半導体は数百 V から数 kV 超の電圧領域、GaN ではそれよりも一段階下の電圧領域で使っていこうとしている。特に電力応用の分野で SiC が期待されているのは、現在の Si では対応ができない数 kV 以上の領域のパワー半導体である。ただし、現在は半導体素子開発が中心であり、回路の検討は今後進めていく必要がある。

現在の開発状況を説明する。半導体ウェハの開発、半導体素子の開発、そしてアプリケーションへの展開、それぞれの項目において少しずつフェーズが違う作業が同時進行している。第 1 世代と呼ばれる耐圧 1 kV 級の素子を目指した開発のフロントラインは、アプリケーションの開発の所である。第 2 世代と呼ばれる 3 kV から 5 kV 級の素子のフロントラインは、半導体素子の開発からアプリケーションに動き始めたぐらいの所である。そして、第 3 世代と呼ばれる耐圧 10 kV を超えるクラスの素子のフロントラインは、まだ素子開発の入り口に入った所である。10 kV を超える素子の動作検証ができた段階であり、これから性能向上に足を踏み込んでいく状況である。今までに多くのプロジェクトが行われてきたが、内閣府の SIP（戦略的イノベーション創造プログラム）のプロジェクトでも検討されていく。

SiC でどのくらいの効果があるかという分かりやすい例を図 3-2-2 に示す。Si のパワー半導体素子を使用した太陽光発電の系統連系用インバータ（太陽電池パネルから出力される直流を家庭用の交流に変換するインバータ）と産業用途でモーターを回すときに使われ

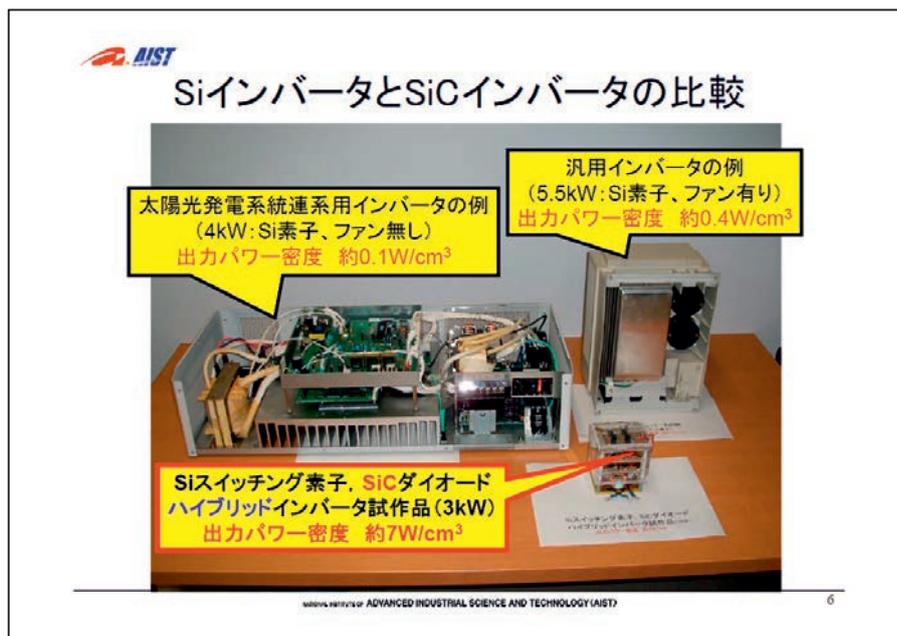


図 3-2-2

る汎用インバータを示す。いずれも出力パワー密度は  $0.1 \sim 0.4 \text{ W/cm}^3$  程度と小さい。これに対してダイオードだけを SiC に替えたインバータの試作品では、出力パワー密度は約  $7 \text{ W/cm}^3$  と 1 桁以上も上がり、小型化が可能となる。

次に熱の話に移る。一層の小型軽量化を進めようとした過去の検討では、図 3-2-3 に示すように、なるべくオン抵抗の小さい素子を使い、ジャンクション温度 ( $T_j$ ) を上げることで、変換器の体積を小さくできることが分かった。例えば先ほどのインバータの出力パワー密度は  $7 \text{ W/cm}^3$  だったが、それをさらに引き上げたい場合には、低オン抵抗の素子を高温で使うということが有効であるといえる。

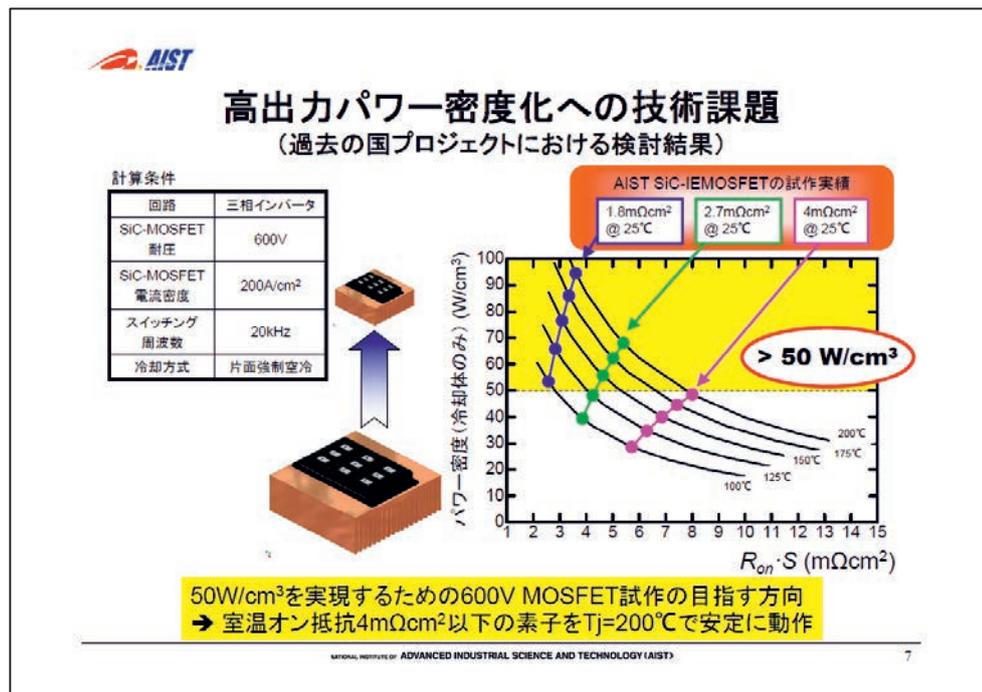


図 3-2-3

図 3-2-4 は 1.2 kV クラスの素子での計算例であり、横軸が接合温度、縦軸が出力パワー密度と損失を示す。温度が上がると、半導体なので当然損失は増える。それに対して変換器の出力パワー密度を計算すると、低音から温度が上がるにしたがい、途中までは温度が上がることによる放熱効率向上の効果が支配的であり、端的に言えば高い温度で使う方が冷却部品が小さくなる。ところがある程度以上の温度を過ぎると、今度は素子の損失が大きくなり過ぎて、熱を抜くのが大変になってくるため、大きな冷却部品が必要となる。この例では 200°C 近辺というのが最適な所といえる。ただしこれは素子の設計によって違うので、SiC だから必ずこの温度が最適というわけでは無いことに留意が必要である。

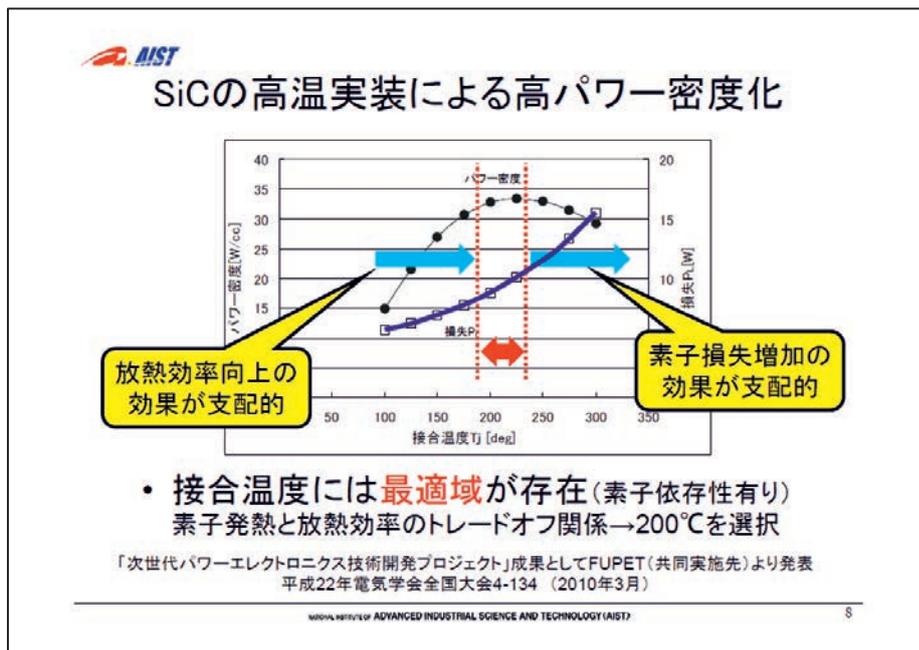


図 3-2-4

トランジスタとダイオードの両方の半導体素子を SiC にしたモジュールを利用して、インバータを実際に作製している。2010年に作製したインバータでは、出力パワー密度が 20 W/cm<sup>3</sup>であった。大きさは掌の上に乗る程度であった。さらに図 3-2-5 に示す 2013年に作製したインバータでは、70 W/cm<sup>3</sup>まで向上した。2010年のものよりも大きさは一回り小さいにも関わらず、扱えるエネルギーは大きくなっている。小型軽量化が大きく進んでいる状況である。



図 3-2-5

現在の高温実装モジュールの概略を図 3-2-6 に示す。SiC 素子に電気を流すため、はんだに代表される接合材 1 を介して配線パターン上の銅に接合する。この銅は絶縁を取るためのセラミック基板に貼り付けられており、セラミック回路基板を構成している。セラミック回路基板の反対側は接合材 2 を介してヒートシンクに接合される。通常、この接合材 2 の部分はシリコングリスなどが使われるが、熱抵抗を下げないと高温実装に耐えられないので、ここでははんだ接合を使っている。現在のモジュールは全熱抵抗 1.6 K/W を達成しており、225°C で SiC を動かしている。しかし、より一層の小形化に向け、SiC 素子の電流密度をさらに 3 ~ 4 倍上げたいという要望がある。この要望に対応しようとする、今後の素子性能向上を考慮に入れても発熱密度は 2 kW/cm<sup>2</sup> まで高くなる。この状況は、ホットスポット的に熱が出てくることを意味する。このハンドリングは非常に大変であり、特に素子に近い部分では、狭い所から出てくる熱をなるべく広い範囲に分散させないと、ヒートシンクからの抜熱に苦勞する。それを耐久性と両立させることは非常に大変である。それから、モジュールの抜熱設計になかなか反映できていないのが界面の熱抵抗である。図 3-2-6 は一番シンプルなモデルだが、あちこちに接合界面が存在する。この界面の熱抵抗が解るようで解らない。計算にはなかなか乗らず、物をつくった際にも設計ができていないかという必ずしもできているわけではない。この辺りが今一番要求されている技術課題といえる。

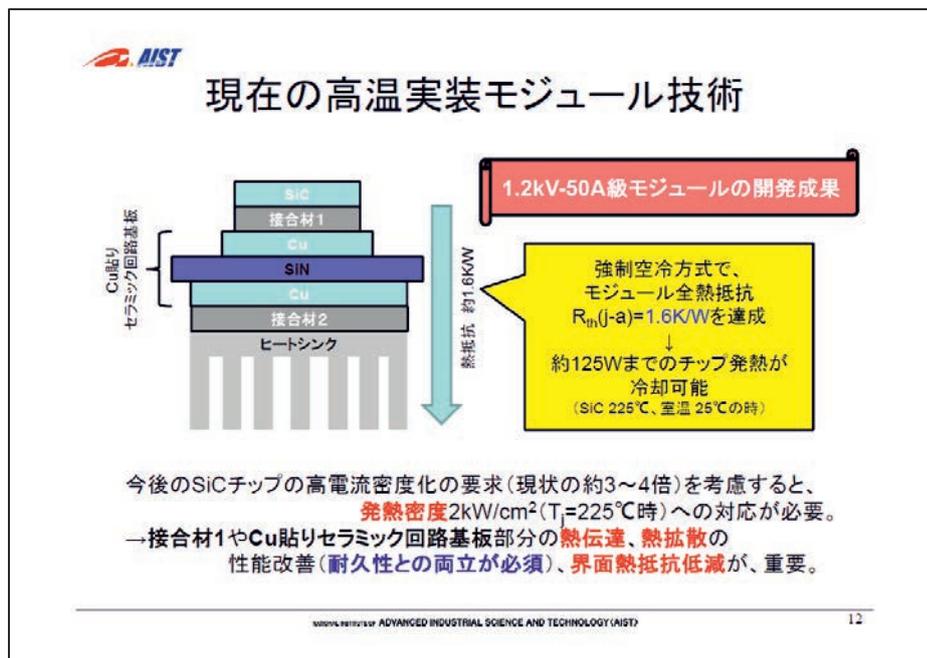


図 3-2-6

最後に高温実装を取り巻く状況についてまとめる。高温実装導入の利点としては、まず小型化があげられる。次に高温環境下でのインバータ利用に展開していくことがあげられる。今まで Si 素子を用いた変換器が置けなかった場所に置けるようになるなど、使い方を想定し、アプリケーション展開を計っている所である。一方で、高温実装における課題として、モジュール等の信頼性や周辺部品の耐熱性があげられる。特に大きなエネルギーを扱う場合、非常に高い信頼性が要求される。現在は要素技術に目処がついた段階だが、

耐久性を見ながら進めているのが今の高温実装パワエレの開発状況である。

【質疑応答】

Q：製作したオール SiC インバータの価格は。

A：これは技術検証のために製作したもので、価格を付けるのは難しい。現在の製作状況からの推定では、Si 素子を使用した変換器よりも少し高い価格になると考えている。サイズだけでも十分競争できると思うが、価格も下げたいという産業界の要望がある。それに対しては、現在別のプロジェクトとして進行している。我々の目標としては、サイズでも Si 素子の変換器に勝ち、コストでも勝つことを狙っている。小型化すると部品が小さくできるとか部品数を削減できる効果も大きく、それによるコストダウンも可能である。SiC 素子の価格は残念ながら高いが、インバータ全体でコストメリットが出ることを想定している。

Q：ジャンクション温度が上がると放熱効果が上がるということは、周囲との温度差が大きくなるためか。

A：その通り。一番効果が大きいのは、ヒートシンクと空気との間の熱交換がどれだけうまくいくかということである。現状の例では、素子を 225℃で動かすとヒートシンクでは 200℃近くになる。

Q：SiC の物性が優れていることはよく分かるが、システムを組むためにはパッケージ樹脂やキャパシタなどいろいろな部品を組み込む必要がある。システムを組む際に、他の部品では何が一番問題になっているのか。

A：全部が問題になっている。現在マーケットに出ているいろいろな部品や材料は、Si 半導体を対象に開発されている。SiC は Si との性能差が大き過ぎていろいろな指標が異なるため、現在の材料や部品ではことごとく対応できない。このためわれわれは、接合材やセラミック回路基板などを市販のものではなく特別に作製して対応している。

Q：熱伝達や熱拡散の性能改善と耐久性との両立が必須であるとのことだったが、耐久性は何が律速になっているのか。

A：1 つは、高温で使うのでそもそも材料の劣化が進行しやすいという条件がある。それから世の中に出ている材料は、“単独で評価して OK だが、複合系にして使った場合には NG” という材料が非常に多い。具体的には、室温から 225℃まで温度が上がったり下がったりすると、線膨張係数がそれぞれの材料で異なるので機械的疲労による劣化などの問題が発生する。それから界面の所では、いろいろな異種材料が接合しているので思わぬ化学反応や冶金工学的反応が進行する場合がある。これをわれわれは「相性」と呼んでいるが、組み合わせ相性が悪いケースが非常に多い。界面がきちんと初期状態を保っていられるかが重要である。そのため、高温環境に長時間放置したり、温度サイクルをかけたりにして、組み合わせ相性の評価を行っている。

Q：線膨張係数の問題とは、界面の応力が大きくなって破断するということか。

A：その通り。接着力との関係もあるが、応力がある程度以上大きくなるとクラックが発生するのが典型的な例である。

Q：図 3-2-6 において、接合材を 2 カ所に使ったり銅を入れたり、何層にもなっているか

ら界面の問題が発生するのではないか。例えば絶縁性を保ちながら熱伝導性の良い材料があれば、この問題も解決するのではないか。

- A：接合材 1 の部分は素子に電気を流さなければいけないので電気伝導性が必要である。素子とヒートシンクの間は絶縁を取る必要があるため、必ず絶縁材料を入れたい。絶縁材料には、“絶縁性能が高く、熱伝達が良い”という、材料屋に言わせると“無理を言うな”と言われるニーズがある。また“ヒートシンクと接合する側の銅は無くても良いのでは”との指摘を受けるが、これはこのセラミック基板を製作する際の 1 つの問題なのだが、片面だけ銅貼りした基板は製作できない。これはセラミックに銅を貼り付ける際にかかなり高い温度をかけるため、片面だけ銅が付けていると反ってしまうためである。そのため両面銅貼りになっている。また、ヒートシンクと接合する際には銅があると有利な側面もあり、このような構造を採用している。

### 3.3 熱アシスト磁気記録

喜々津 哲（東芝）

「熱アシスト磁気記録」は、ハードディスクに熱を使って記録密度を向上させる新しい技術であるが、それに関するいろいろな問題点の紹介をしたい。

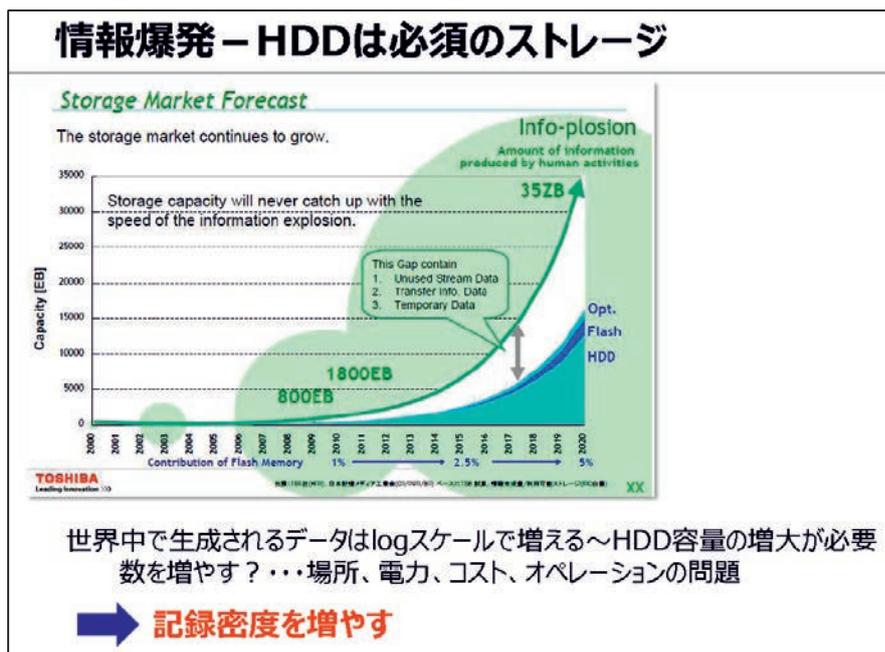


図 3-3-1

HDD そのものを目に触れる機会は最近どんどん減ってきているが、実はこれから先どんどん使われていく。図 3-3-1 はデータストレージのある調査会社の示した展望である。横軸が年代、縦軸は世界中で使われているデータ量である。世界中を飛び回るデータ量は今後も指数関数的にもものすごく増えてくる。それを全部保存する必要はないが、その何割かは必ずどこかに保管しないと行かない。保管する先も同じように指数関数的に増えていかなければいけないと言われている。

最近では、フラッシュメモリを使った SSD にだいぶ大量のデータを保存できるようになってきたが、実は Google や Amazon がバックグラウンドで持っているストレージにはもっと大量のデータが必要で、そこには、そのほとんどを HDD が占めるという状況がある。今後もこの比率はあまり変わらないので、HDD もどんどん容量を増やさないと行かないと言われている。その場合に、「HDD の台数を毎年倍々で買う」などというのは商売上あり得ない話だ。仮に買えたとしても、それを置く場所を倍々で増やすことは物理的にできないし、工場でも生産できないし、使う電気量も賄い切れない。そうすると、密度を増やす、つまり、大きさも消費電力もあまり変わらず、密度だけ倍々で増えることで初めてこの要求に応じることができる。このため、HDD の生命線は毎年密度が増えていくということになる。今回紹介するのは、その HDD の基本構成と高密度化技術ということになる。

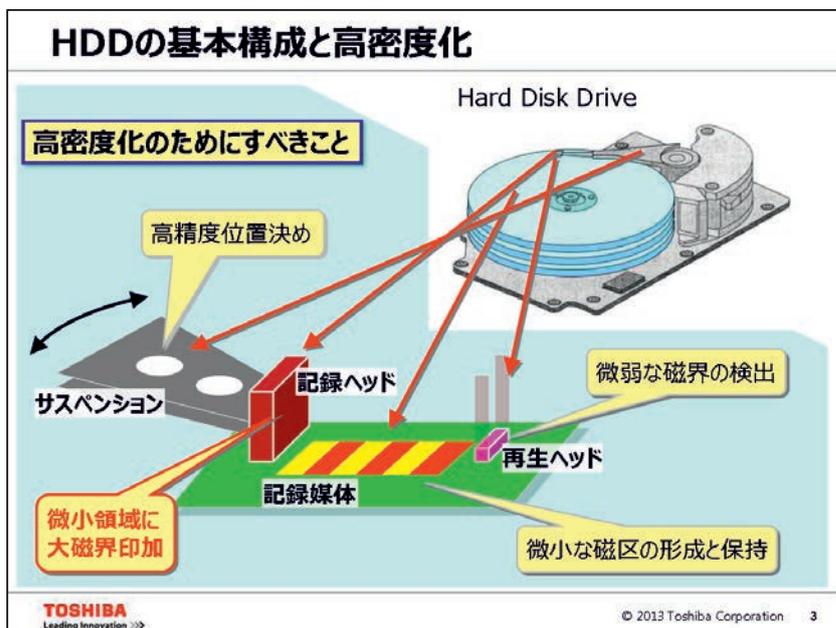


図 3-3-2

HDD のふたを開けると、図 3-3-2 に模式的に示すように、情報を記録する皿（ディスク）と、そこに記録したり再生したりするヘッドがある。これを高密度にするには、単純にはディスク上に記録されている小さい磁性体の塊（磁区）がそれぞれビットの「0101」に対応するが、これをどれだけ小さく作るかということになる。

このマークを書くための構成部品としては、ヘッドを支えているサスペンションとか記録のヘッド、それから情報を担う媒体、それから情報を読み取るヘッドと、これだけ基本的なものがある。それぞれが大変な技術であるが、今回の話は「どれだけ小さい領域に記録できるか」という技術の話である。

理解のために、今の HDD の構造を説明する。現在、全ての HDD は東北大の岩崎先生が発明された垂直磁気記録という方式を使っている。これは磁性薄膜の面に垂直の方向に N 極、S 極を持っている磁性体を使っていて、記録ヘッドから出た磁束によって、磁気媒体の磁化を上向きか下向きに反転する。磁気回路を構成しないと磁束を効率的に使えないので、出ていった磁束は必ず戻るといった還流構造を構成している。その後ろに再生ヘッドが付いている。この記録ヘッドが媒体の上を走って記録を行うが、ヘッドと媒体との隙間は現在は 1nm ~ 2nm ぐらいである。そこを 10m/sec ぐらいの速度でヘッドが飛びながら微細な領域に強い磁界を印加しかつ熱を加える必要があり、これが、後述するように、大きな議論になってくる。

高密度化のためにはなるべく密に記録磁区を作る必要がある。記録媒体は小さい磁性粒子の集合体でできていて、ここに「1010」と記録をすると、0 と 1 との境界は、微粒子ごとに上向き磁化と下向き磁化が混ざった、最低でも粒子の大きさの程度でギザギザしたものとなる。これを再生すると、再生信号はギザギザの幅程度の遷移領域をもって変化する

る緩やかな曲線になる。高密度化のためにはこの遷移領域を狭くする必要がある。高密度化の本質は、記録するマークを小さくするというよりも、境界をいかにシャープにするかに帰結される。

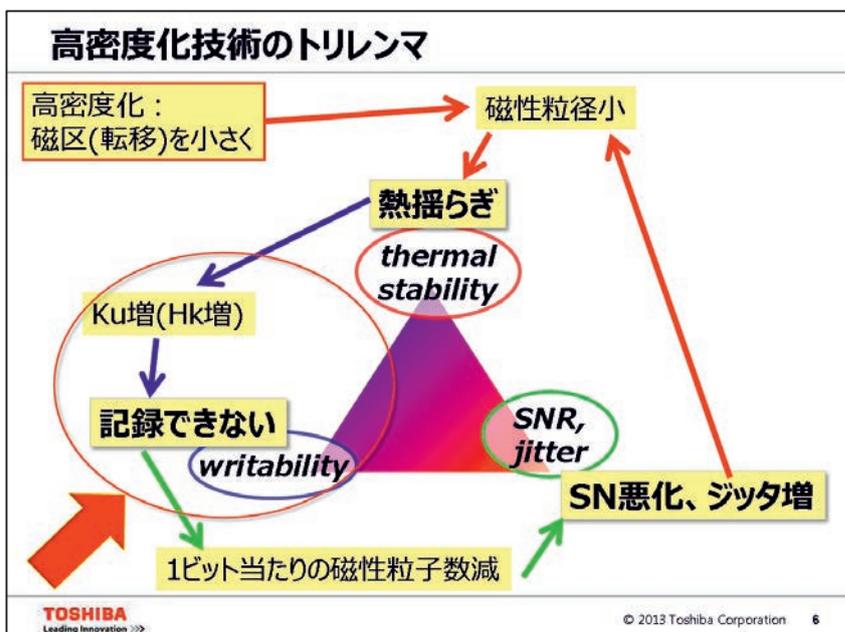


図 3-3-3

ここで、磁気記録の業界で「トリレンマ」と呼ばれている問題が出てくる。密度を上げるために、小さい遷移領域を作ることが必要で、そのために粒子を小さくすると、熱揺らぎの問題が出てくる。磁性粒子の磁化を保存するエネルギーが室温の熱揺らぎエネルギーに近いために、粒子を小さくすると熱揺らぎが起こってしまい、せっかく書いた情報が1年後に消えていると状況になりかねない。

熱揺らぎを避けるには、熱揺らぎに勝つだけの磁石のエネルギー（磁気異方性エネルギー、 $K_u$ ）を上げればよい。ところが、そうすると磁化反転しにくくなり、記録できなくなる。つまり、今度は現在の記録用磁気ヘッドの磁界では記録できなくなる。記録ヘッドの磁性材料は、ほとんど理論限界に近い飽和磁束密度のものを使っているため、材料を工夫しても記録磁界をこれ以上強めることはほとんど不可能である。ということで、熱揺らぎには強いが、記録ができないという問題が起こる。それならば、磁性粒子の大きさや材料はそのまま1ビット当たりの粒子の数を減らしてビットを詰める方策があるが、今度は信号雑音比（SN比）がどんどん悪くなってしまい、システム側で強力な信号処理を行っても情報の再生ができなくなる。ということで、高密度化の大きな障害要因である、熱安定性と書きやすさとSN比が三すくみ（トリレンマ）の状態にあって、これからどうしても抜け出せないという状態になっている。

この状態は磁気記録だけではなくて、同じ磁気メモリのMRAM、それからフラッシュメモリ、それ以外のものでも微細素子で何かやるときには必ず出てくるユニバーサルなも

のだと思っている。ともかく、物理限界で決まる三すくみを脱出する方策として、「記録できない」ところを何とかしようというのが「熱アシスト磁気記録」のアプローチということになる。その概要を以下に示す。

媒体の磁気特性は、温度を上げていくとキュリー温度  $T_c$  に近づいていき磁化が減少するが、このとき、図 3-3-4 の左のグラフに示すように、保磁力  $H_c$  という反転しにくさを表すパラメータもどんどん小さくなる特性がある。そこで、記録する時だけ温度を上げて反転しやすくして、そのあとすぐに室温に冷して安定性を保つというのが、熱アシスト記録の基本的なアイデアである。このための加熱源としては、短時間で高エネルギーを照射できるレーザーが適している。

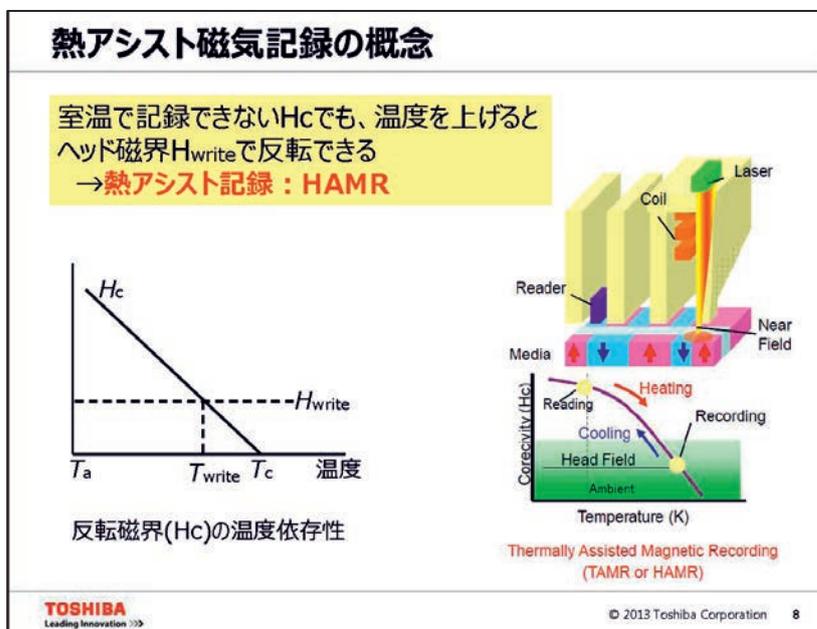


図 3-3-4

高密度化に向けて狭い磁化遷移領域を作るためには、数十 nm よりも小さい領域で加熱できてほしい。さらには 10nm が展望できるような加熱手段が必要である。また、せっかく記録してもその後に熱揺らぎが起こると元の木阿弥なので、短時間（数 ns、できれば 1ns 以下）で室温まで冷めてほしい。加熱すべき温度は最大でキュリー温度ぐらいなので数百℃ぐらい。記録磁界が印加された場所を加熱しないといけないので、加熱源は磁極の 10nm ぐらいそばにある必要がある。これをやろうとすると、レンズで光のスポットを絞る、ブルーレイや DVD の方式は使えない。

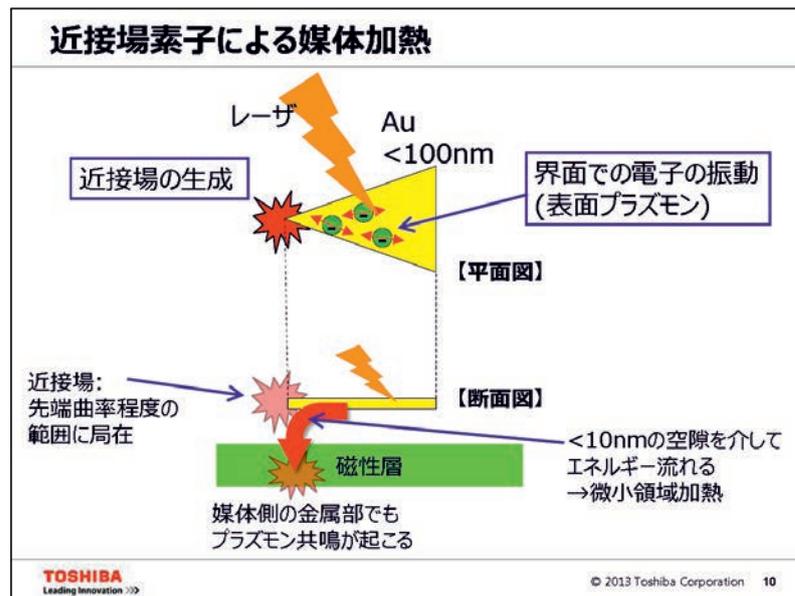


図 3-3-5

光には波長で決まる回折限界というのがあり、可視光では 500nm から 300nm ぐらいまでしか絞ることができない。そこで、10nm の領域の加熱手段として近接場光を使うことが考慮されている。記録ヘッドのすぐ横に導波路を置いて、導波路の先に近接場を発生する素子を置き、ヘッドの上にレーザを置くというのが基本的な構成になる。

近接場素子は、典型的には、図 3-3-5 に示すように、金で作られた全体の大きさが 100nm を切るような三角形をしたものである。ここにある条件で光が当てられると、表面の電子が共鳴を起こし、表面プラズモンポラリトンと呼ばれるものを形成し、そのプラズモン量子が振動し始める。そうすると、先端部にプラズモンが集中し、電界集中と同じ要領で、ここに非常に強度の高い近接場が発生する。ただ、これは近接場であって、伝搬する光ではなく、この構造体の大きさ程度の距離の領域に局在している。しかし、HDD では、先ほど述べたようにヘッドと媒体の距離がたかだか数 nm なので、局在領域に記録媒体が存在し、発生した近接場を通して磁性層にプラズモンがカップリングし、それで磁性層が加熱されることになる。つまり、レーザが当たってプラズモンになって、プラズモンが近接場の形で磁性層に入っていくって、そこで磁性層のフォノンなり電子とカップリングして、そこで初めて熱が発生して温度が上がるということになる。

以上のことを踏まえ、熱アシスト磁気記録の課題をいくつか紹介する。第 1 は、潤滑層とかカーボン保護層が磁性層の上に付いているが、加熱によって ns オーダーで何が起きているか知りたい。潤滑層は油なので、高温下では油が燃える反応が起きる。カーボンも燃える。バルクのデータはあるが、ナノスケールで、しかも ns で何がこのようなことが起こるのかはわからない。例えば 1ns で起こる過程を  $10^9$  回繰り返したのと、1秒で起こる現象は同じであれば実験はできるが、本当にそうなのか全然分からない状態である。分子動力学シミュレーションで活性化エネルギーぐらいは見積もれるが、それを実験で確認のしようがない。

第2にレーザのカップリング効率があまり良くないという問題がある。実は現在、レーザ光を光導波路に100入れたとしても近接場光として出てくるエネルギーは5程度しかなく、残り95は全部まわりの構造体に熱となって流れてしまっていて、相当な高温になっている。これを何とかしないといけない。

第3に、近接場素子そのものの問題である。プラズモンというのは電子なので、電子が振動しながら動くときジュール加熱される。それに加え、照射レーザによる加熱、加熱された媒体からのバックヒーティングなどもある。場合によっては近接場素子が融けて蒸発するぐらい温度が上がってしまうこともある。

第4に、先ほど加熱/冷却速度が1ns以下と言ったが、それを実現する熱設計にも問題がある。記録媒体は鉄白金という磁性材料を主に使うが、この下地層が必ず必要であり、またその下に銅などのヒートシンク層がある。これらの多層膜の温度が1ns以下の時間領域でどうなっているのか計算はできるが、どうやって調べれば良いか、どう設計したら良いか不明である。

第5に、加熱のスポットサイズや加熱源のサイズは分かるが、それにより温まる領域のサイズを見積もるのは難しい。熱伝導率も考える必要があり、どう設計するのかもよくわからない。熱の状況を確認したいが、よくわからない状況になっている。熱伝導率に異方性があることも想定している。磁性層は柱状構造をしており、膜厚方向に熱がよく流れて膜面内方向には流れないはずなのであるが、確認できない。

このように設計も難しいが、その設計の確認ができない、熱伝導率がよく分からない、という状態なので、この辺を含めてプロジェクトでソリューションが見つかっていけば、産業に対しても非常に役に立つと思っている。情報爆発を支えるために頑張っているが、熱に関してこのように多くの本質的な問題があって困っているので、ぜひ助けて欲しい。

#### 【質疑応答】

Q：非常に小さい所で温度が上がったり下がったりして膨張と収縮を繰り返し、それを繰り返すことによってだんだんと劣化するのではないかと直感的に思うが、実際はどうなっているのか。

A：ヘッドの熱膨張によって浮上量の変動して、信号強度が変わることは観測データとして得られている。また、浮上量1nmを機械的な浮上だけでやるのは非常に難しいので、5nmで浮かしておいて、温めて熱膨張で4nm膨らませて1nmにするという技術を今は使っている。その浮上量のモニターをヘッドに付けることも現在開発中である。膨張までは何とかシミュレーションとバルクの熱定数を用いて計算で出し、あとはブラックボックスとして、出てくる信号強度を観測して、何とか設計できている状態である。

Q：繰り返しにより材料にダメージが入るのではないか。

A：ダメージはある。いろいろな部品からできている構造体なので、弱い所から剥がれ落ちるとかそういう問題は出てくるが、まだ、そこを押さえるところまで開発は進んでいない。

Q：プラズモン側の応答速度は特に問題にならないか。

A：今のところは問題にならないと考えている。

- Q：加熱する体積は大体どれぐらいか。
- A：数字は持ってないが、このヘッド構造体は0.5mm角ぐらいのセラミックのスライダと呼ばれる基体の端っこのほうにnmオーダーで付いているので、非常に局所的な加熱で局所的な膨張しか起こっていないと考えている。
- Q：磁化反転させる部分の体積と熱容量から、nsオーダーで熱が浸透したり拡散したりすることが考えられると思うが、どのぐらいの熱か。
- A：その辺の熱伝導計算もやっているが、なかなか冷却速度を上げるのが難しい。冷却しやすいということは加熱しにくいと同じなので、なかなか難しいが、媒体の構造設計でいろいろやっている。しかし、nmの描像における熱の伝導のし方がよく分からない。今のところ、サーモリフレクタンス法などで測った薄膜の熱伝導率と、それから求めた界面の熱抵抗を入れた解析まではやっている。界面熱抵抗は一体何なのか、どこから来るのかはよく分かっていない。例えば、界面といってもいろいろな界面があり、凹凸があってそこに原子が混じっている場合とか、界面の中にバルク的な実体があって界面の界面があるなど、いろいろある。実際はどうなのだというところまで取り込まないと、きちんとしたシミュレーションはできない。実は、そこも何とかしてもらいたい。
- Q：競合技術、例えばマイクロ波アシストなどでブレイクスルーする可能性はあるか。
- A：可能性はある。この基本は、三すくみ状態にもう1本エネルギーという軸を入れてやるということで、そのエネルギーとしてマイクロ波を当てて磁性体に歳差運動を起こして、反転しやすくするというアプローチはやっている。しかし、熱アシスト記録はデモンストレーションでちゃんと設計したとおりになることが確認されているが、マイクロ波アシストは微細な領域に1kOe（キロエルステッド）、10GHzぐらいの高周波をかけるという話なので、測定ができないので本当に磁界がかかっているのか確認できていない。
- Q：マイクロ波のナノというのはイメージがつかめない。
- A：MRAMに使われている磁気トンネル接合に電流を流すと磁性層が発振するが（スピントルク発振）、この発振周波数がちょうどマイクロ波アシストの周波数に近い。発振する磁性層のすぐ横で高周波で磁界が出ている。
- Q：磁気トンネル接合だと電力が出ないから、面直通電型巨大磁気抵抗（CPP-GMR）を使うのではないか。
- A：そう。実際にはトンネル接合ではないGMR素子を使っている。

### 3.4 自動車における熱制御

松野 孝充（トヨタ自動車）

自動車の熱マネジメント上での課題を紹介し、熱制御材への期待について述べる。

自動車の CO<sub>2</sub> 排出量規制は世界各国で年々と厳しくなっているが、一番ハードルが高いのはヨーロッパで、2020 年には 95 g/km に規制される。これは今の車だと小型のハイブリッド車 (HV) ぐらいしかクリアできない。また、先進国だけではなくインドや中国でも 2010 年頃から CO<sub>2</sub> 排出量規制が始まっている。最近ではサウジアラビアのような産油国までもが燃費規制を始めようとしている。そういう世界になってきている。

したがって、自動車の電動化は避けて通れない。プラグインハイブリッド車 (PHV) や電気自動車 (EV)、燃料電池自動車 (FCV) などいろいろな動力源を持つ必要がある。しかしながら 2020 年においては、それでもディーゼルやガソリンなどのコンベンショナルな動力源の自動車が 7 割程度は残ると予測されている。ゆえに、内燃機関車両とモーターインバータ系を使った複雑な車両の開発を両方やり続けなければならない。

エンジン技術の方向性を図 3-4-1 に示す。一つはいろいろな燃料が使えるようにしてエネルギー多様化に対応するということと、もう一つは効率を上げて CO<sub>2</sub> 削減に貢献することの二つがある。効率向上のためには、熱マネジメントや断熱、排気熱回収、超断熱など、熱的な所に期待する部分もかなり多い。

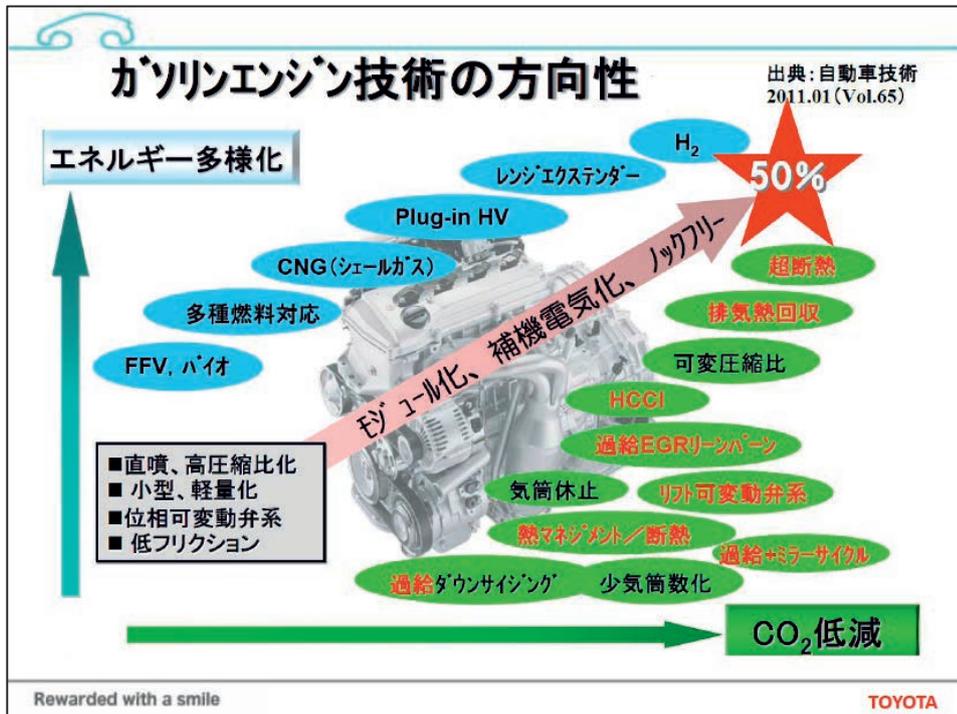


図 3-4-1

燃費規制は定められた環境の 25°Cでの走行モードで定められているが、実際の世界（リアルワールド）での CO<sub>2</sub> 排出量を減らさないといけない。日本の「e燃費」というウェブサイトで、ユーザーがガソリンを入れたら「何キロ走って何L入れました」と自分で入力し、そのデータを集めて公開されている。そのデータを見ればトヨタの車だけではなく日本中の車の平均燃費が分かる。地域別でみると、大都市圏等は渋滞などで平均車速が低く、燃費が悪いことが分かる。また比較的排気量の大きい車が多い傾向も影響している。また季節の影響を見ると、エアコンを使用する夏季だけでなく暖機が必要な冬季がさらに燃費が悪いことが分かる。端的な例として北海道の場合を見ると明確で、春から秋は燃費が良いが冬になると極端に燃費が悪くなることが分かる。これは寒い時期になかなかエンジンが暖まらない問題が大きく、特にこの問題はHVになると厳しくなる。

定められた環境での燃費規制だけではリアルワールドでの燃費向上につながらないということもあり、ヨーロッパでは決められたテストでは効果が表れない技術の評価し、認められれば特別にクレジット（エコイノベーションクレジット）を付与している。例えばLEDヘッドライトやソーラー充電、エンジンの保温や蓄熱などの技術も申請すれば認めるという時代になってきている。アメリカも同様にクレジット（オフサイクル技術クレジット）を付与しようとしている。例えばエンジン排熱回収やトランスミッション暖機、エンジン暖機、夏のエアコンによる燃料消費を抑えるためのソーラーコントロール（日射熱抑制）など、様々なアイテムを採用させて、リアルワールドの燃費を良くしようとしている。

燃費を良くすることはこれまでは主にパワートレインの仕事であったが、今では車全体の仕事になりつつある。図3-4-2に示すように車両の熱マネジメントを行う場合、車両の熱バランスを制御して時間・空間的に熱を使いこなすことになるため、熱源を確保し、運んで利用することを合理的に行う必要がある。以下では、その中で特に困っていることを4つ紹介する。

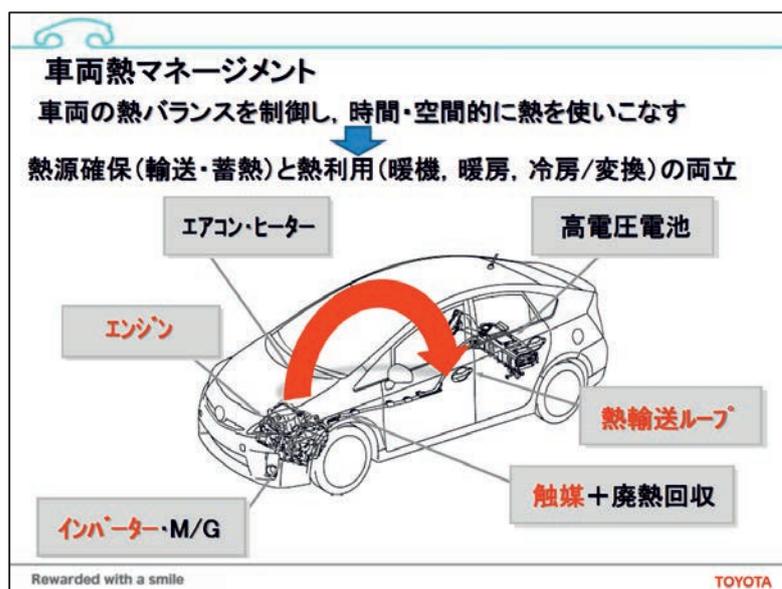


図 3-4-2

1つめのインバータの温度制御についてである。HVのインバータは80℃から100℃ぐらゐの環境になるエンジンのコンパートメントの中に搭載するので、熱的に大変厳しい。ヒートシンクにはエンジンの冷却水に比べて低温（65℃）のインバータ専用冷却系を設定し温度コントロールしているが、一世代前のプリウスのインバータは多層構造で熱抵抗が大きい（図3-4-3）。そのためヒートシンクはかなり大きいものとなっていた。現在発売しているプリウスでは、緩衝材の層で熱膨張差を吸収させることでシリコングリスやヒートスプレッタを無くし、全体の熱抵抗を33%下げた。その結果、一世代前のものから体格は63%小型化、重量は80%の軽量化ができた。しかしその一方で、相対的に絶縁基板の熱伝導性の影響が大きくなった。

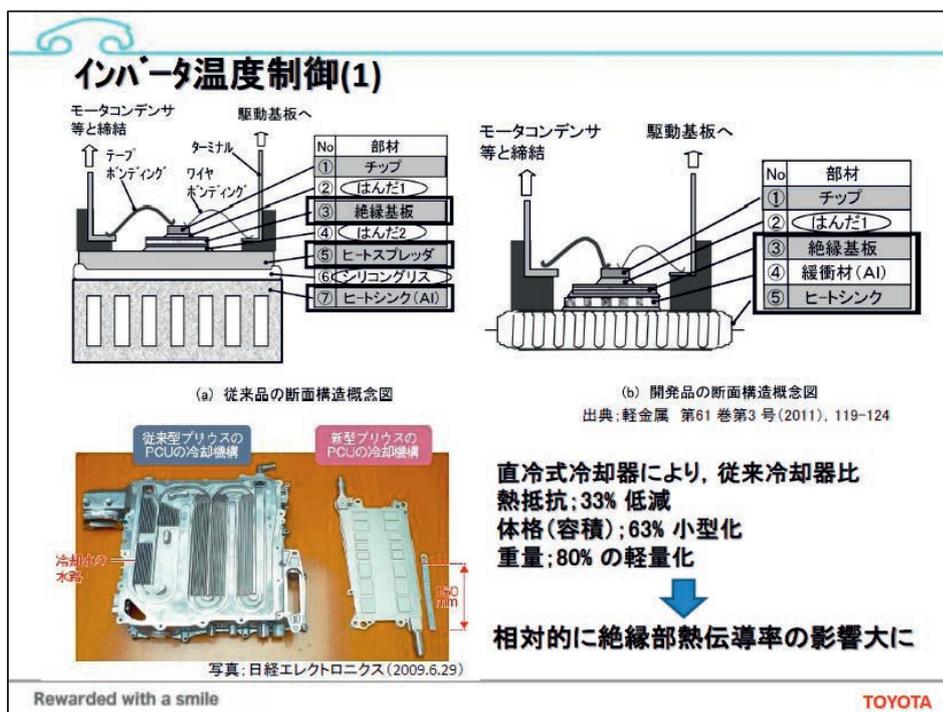


図 3-4-3

また、プリウスは排気量1.8LクラスのHVであるが、3.5Lクラスの大きなエンジンのHVになると高出力のインバータを冷却しなければならない。この場合は両面から冷やすモジュール構造にし、チップの両側を冷却板で挟み込んでいる。今まで片側にしか伝わらなかった熱を両側に伝えてやるということでもかなり合理化した。しかしその結果、セラミックインシュレータ（絶縁層）がほとんどの熱抵抗を支配することになり、これ以上小型化を目指す場合には絶縁層を何とかしないと厳しい。したがって熱伝導度と電気伝導度を独立に制御できる材料ができれば、将来の小型化も見込むことが可能となる。また、専用の65℃の冷却水を回すウォーターポンプとラジエーター（熱交換器）を持つのは大変なので、エンジンの冷却水が流せるようになれば、随分合理化が可能となる。

2つめは触媒温度制御についてである。ハイブリッド化による燃費向上とともに排気ガス温度も下がっており、始動直後の触媒の温度がなかなか上がらない課題がある。排気ガス温を早く上げるため、少し燃費を犠牲にして点火時期を遅角させることがやられている。

エンジン出口になるべく近い所に触媒を持つてくることで、従来に比べて触媒の昇温時間をかなり短くし、燃費も良くなっている。

実際の自動車の使い方として、例えば買い物に行くように、ちょっと走って短時間停車し、もう一回エンジンをかけるといった使い方が大変多い。その場合には一度温まった触媒がまた冷めてしまう。図 3-4-4 に示すように触媒を囲う断熱層の厚みを従来の 2 倍にすると、再始動初期の触媒温度が約 50°C 上がり、このケースでは燃費が 5% 程度良くなった。

以上のように始動初期の触媒を早く温めるということが必要な一方で、フルスロットル等でエンジン回転・負荷が上がっていくと、触媒の温度はどんどん上がっていつてしまう。触媒をエンジンに近づけたり、保温したりすることの背反となっている。その対応として、排気ガスを再循環して燃焼温度を下げて何とかクリアしているが、熱スイッチ的な材料があれば設計上においてずいぶんと楽になる。

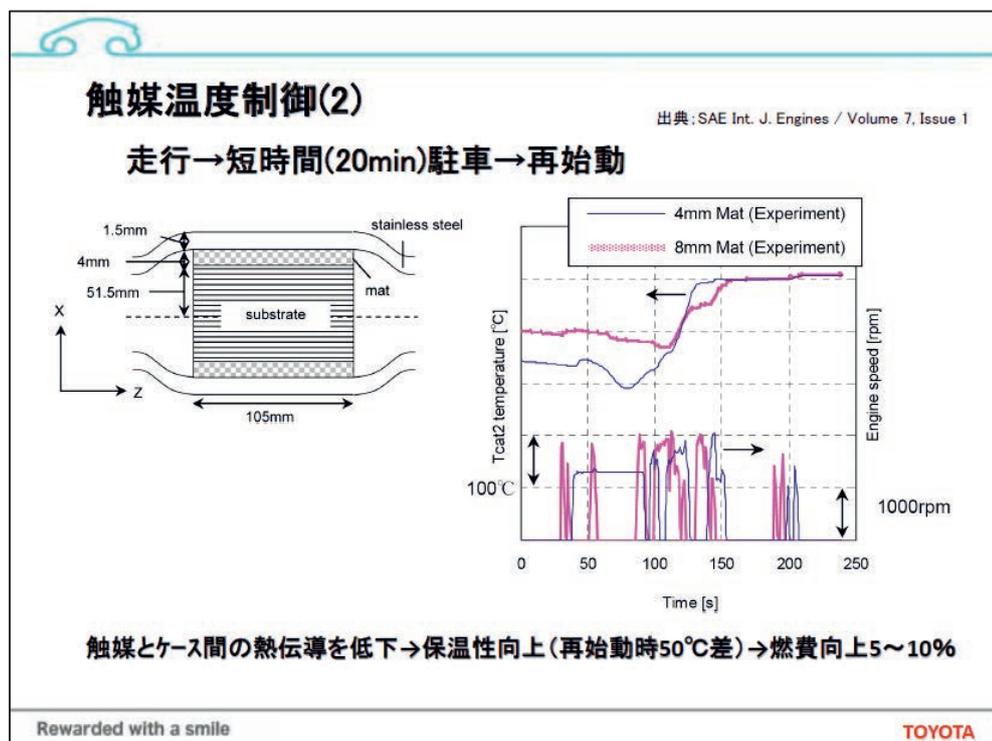


図 3-4-4

3 つめはエンジン本体の暖機制御についてである。図 3-4-5 に示すように、現在のエンジンでは暖機時に燃焼熱を拡散させないためにクランクシャフトからウォーターポンプを切り離し、電動化することで冷却水の流量をコントロールしている。その技術 (EWP) によって暖機時間が早くなり、燃費が 10% くらい向上する。それでもプリウスの場合には不十分なため、排気ガスの熱を水に回収してそれを暖機に使う技術 (EHR) を組み合わせ、約 2 割の燃費の向上を実現している。

エンジンの水温制御では、クーラントのサーモスタットを電氣的にコントロールし、エンジン回転数とトルクの関係においてノックが起こりえない領域では 100°C とか 105°C にコントロールして摩擦損失を低減し、最高出力付近では 85°C ぐらいまで下げることがやられている。暖機制御では非常に複雑な電動バルブを使ってヘッドやブロックなど部分別、

タイミング別にコントロールしている。それで暖機を早めることを実現している車両も出てきている。

もしエンジンのウォータージャケットの壁面に熱伝導率が変わるような材料を使うことができれば、先ほどのような流量制御や複雑なバルブ制御などをせずに自律的に温度制御でき、だいぶ構造が変わるのではと思われる。

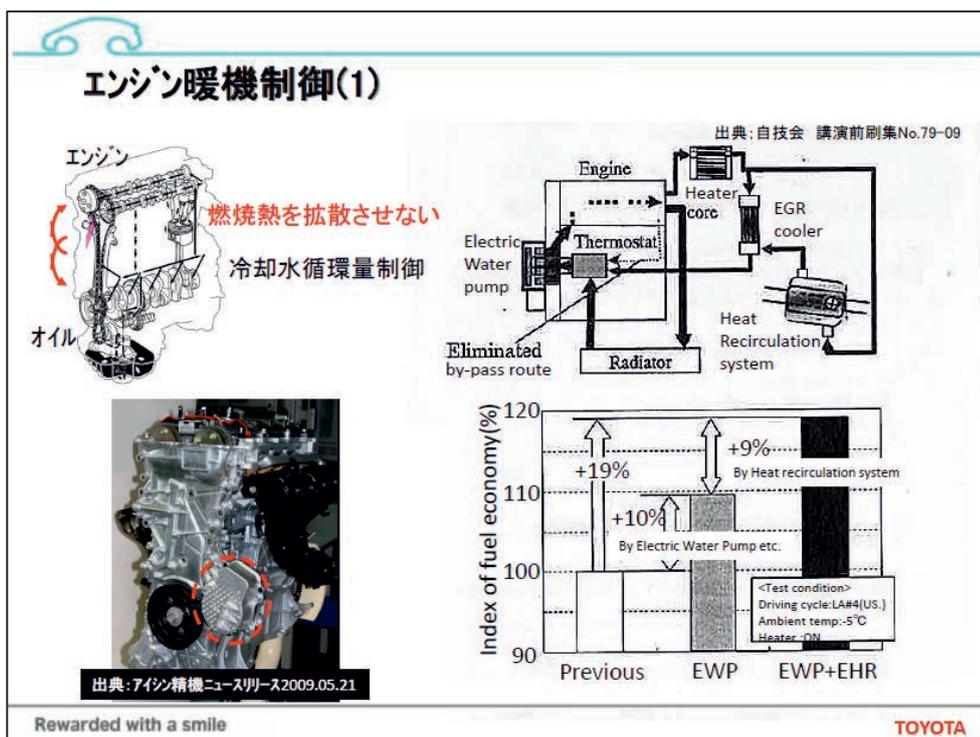


図 3-4-5

4つめは熱輸送ループについてである。エンジンの過給ダウンサイジングという流れがあり、過給エンジンとハイブリッドシステムの組み合わせというのはおそらく増えてくると思われる。その場合、エンジンルーム内やバンパーの所にラジエーターが増える。その理由だが、まずエンジン冷却用の高温の熱ループが1個必要である。それから、インバータや過給エンジンの吸気を冷やすための65℃ぐらいの水ループ、そしてバッテリーなどの温度コントロールとエアコンに必要な10℃近辺の熱輸送ループも必要である。この3種類の熱輸送ループに必要なラジエーターが配置されるので、搭載が非常に大変なことになる。

しかし、全部が全部同じ時期に放熱能力が要るわけではない。例えばエンジンの負荷は小さいがクールダウンが必要な場合、余裕がある所から相互に熱を融通し合うと非常に効率的になる。しかし思わぬところで温度が逆転する場合もあるため、なかなかうまく熱を融通し合えない問題も起こっている。そのような場合に、熱ダイオード的に片方向にしか熱が伝わりにくいというような材料があると非常に合理的になるとと思われる。

材料が変わると要素が変わり、システムも変わり、車の制御も変わり、車の形も変わっていく。材料開発への期待は非常に大きいと感じている。

【質疑応答】

- Q：トヨタのような自動車メーカーの中で、例えば熱ダイオードのような基本的な材料の研究はしているのか、それとも外部に任せているのか。
- A：「トヨタ研究公募」という社外公募を使い、「こういう困り事があります」と提示し、共同研究で外部と一緒に進めている。材料そのものは「先端材料技術部」という部署が担当している。
- Q：熱マネージメントが非常に重要であるというのはよく分かった。最後に「材料に期待している」とのことであるいろいろな材料が必要だと思うが、その中で特にこういう材料があればかなり良くなるということを示すことは可能か。
- A：ここで触れなかったものとしては高密度な蓄熱材が欲しい。それから、ずっと熱電変換の開発もやってきたが、なかなかコスト面が合わない。装置側はいろいろな検討が進んでおり、ZTが高い材料を期待している。
- Q：すでに潜熱蓄熱材料などは実用化されているものもあるが、そのレベルではなく、さらに桁のオーダーで違うような高密度な材料のイメージか。
- A：エンジンコンパートメントの中は各種機器がぎっしり入っており、蓄熱に使える容積を想定すると1Lか1.5Lぐらいのスペースになる。エンジンを25°Cから60°Cまで一気に暖めたいが、その場合には1MJのオーダーになり、蓄熱密度は1MJ/Lが必要になる。従来の潜熱蓄熱材料に比べてかなり高密度なものを期待している。
- Q：PHVとかHVもそうだが、蓄電池が低温になるような状況での熱マネージメントは必要ではないか？ 駆動が遅いだけではなく、寿命にも効いてくると思うが。
- A：蓄電池は満充電で高温状態に保持し続けると（安全面で）厳しいため、冷却することが主体となる。しかし低温では出力が足りない場合もあるので、適温にコントロールしたい。PHVの場合は外部電源とつなげることができるため、比較的やりやすい。しかし、根本的に自動車で「貯める」ことを考えておく必要があると思う。
- Q：EVは熱を出すのが苦手で何か仕組みを設けなければならないのは分かるが、FCVの場合には、水素を燃焼して熱を出すことと、燃料電池で電気を起こすことの両立は可能なのか。
- A：FCVで今一番困っているのは、効率が良いとはいえ熱が出て、排気ガスで熱を捨てるという部分が無いので、全部水側に熱が落ちてきてしまうことである。そのため、ラジエーターが普通の車の約2倍付いている。もう一つは、FCVはヒートマス（熱容量）が非常に大きく、市街地で効率が良いためになかなかFC冷却水の温度が上がらないので、暖房の熱を取り出しにくい。ヒートポンプを使う話もあるが、その中で水素を触媒燃焼して熱を作り出すことも可能性としてはありうる。
- Q：蓄熱のニーズについて、それは熱を保つというニーズなのか、あるいは要望に応じて熱を蓄積しそれをまた放出するというニーズなのか。
- A：1つの目安として、金曜日の夜に停止した時の熱を月曜日の朝に使いたいというのが実用上のニーズとしてある。したがって、できれば化学蓄熱のように保存のための断熱が要らないのが一番良いと思う。以前に（排気エミッション規制対応のために）魔法瓶の仕組みを利用した顕熱蓄熱システムを搭載したことがあったが、断熱スペースを含めると全体容積5Lくらいになり搭載性や採算面で厳しい。

## 4. ナノ熱計測・シミュレーション

### 4.1 ナノスケールの熱計測・熱解析技術

徐 一斌 (物質・材料研究機構)

ナノスケールにおける熱伝導率の測定と理論解析を数年間行った結果の中から、面白いと考えていること、分かったこと、分かっていないこと等を報告する。

図 4-1-1 に示すように、ナノスケールではバルクの熱伝導と大きく異なっており、バルクと薄膜の熱伝導率も温度依存性がこの様に異なる。界面熱抵抗の温度依存性は、熱伝導に相当すると考えると低温領域で増加する傾向になる。

ナノ・ミクروسケールの熱伝導としての特徴の 1 つは、やはりサイズ依存性であり、薄膜の熱伝導率は厚さに依存する。さらにカーボンナノチューブやグラフェンも長さによって熱伝導率が大きく変わることが分かっている。グラフェンも原子層のレイヤー数によって熱伝導が変わることが分かっている。

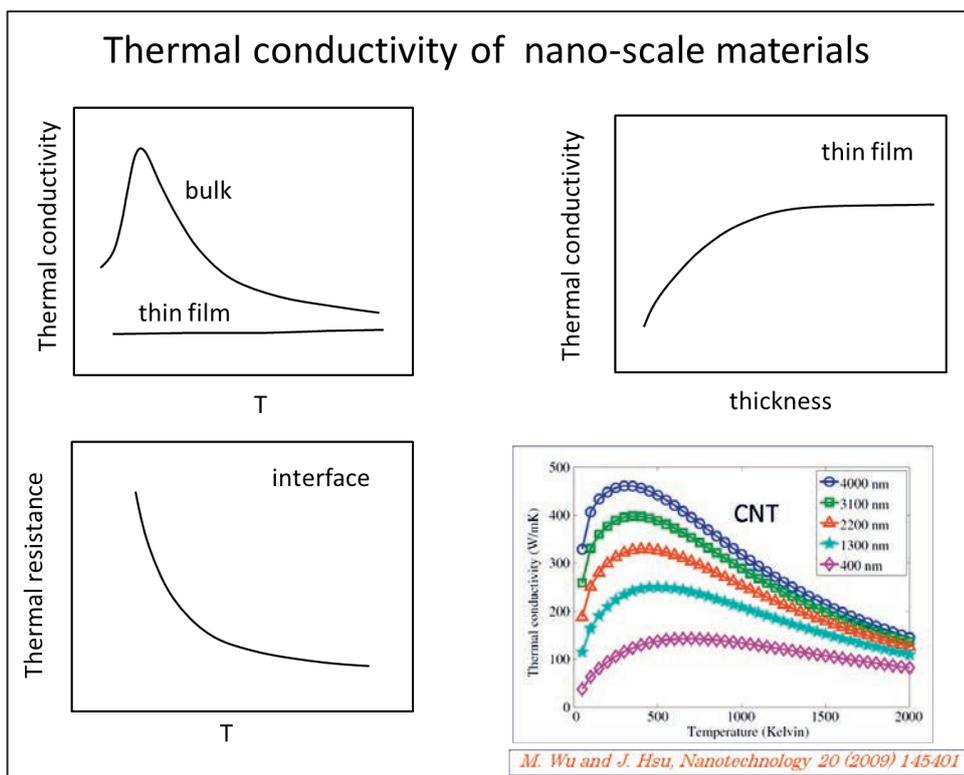


図 4-1-1

我々は主に薄膜と界面の熱伝導の計測・解析を行ってきた。薄膜の熱伝導のメカニズムは、もちろんバルクと似ているところも異なるところもある。似ているところはフォノンとフォノンの散乱やフォノンと欠陥の散乱であり、これらについてはバルクと薄膜で一致している。薄膜は多結晶の場合が多いので粒界での散乱が多いが、薄膜が薄くなるとバリスティック（弾道型）なフォノン熱伝導によりフォノンは散乱せずに界面間を直接走って

くる。これはバルクに存在しないメカニズムであり、それは薄膜の厚さに大きく依存する要素となる。

薄膜の垂直方向の熱伝導の測定方法として、図 4-1-2 に示すように Time domain (時間領域法) と Frequency domain (周波数領域法) の 2 種類が多く使われる。サーモリフレクタンス法は温度を測定する方法である。Time domain と Frequency domain のそれぞれの評価にサーモリフレクタンス法を使うこともある。これらの原理的な違いを説明する。Time domain においてパルスレーザーで表面を加熱して表面温度を測定すると、一気に上がって減少する。これに対して産総研の馬場らのグループが行っている背面から加熱して表面温度を測定する方法では、ゆっくりと温度が上昇した後に徐々に下がっていく。これらの温度曲線によって熱伝導率を解析するこの方法はレーザーフラッシュ法と近く、多くの人になじみやすい方法である。他方、Frequency domain では周期的加熱を行う。周期的な加熱により、温度の上昇・降下を繰り返すと 1 つの温度波が生成され、この温度波が試料の中で伝達する形となる。加熱方法としては電流加熱方法と周期性レーザーで加熱する方法があり、温度測定に関してはサーモリフレクタンス法や加熱センサ自体の電気抵抗変化で行う方法もある。ここでの  $3\omega$ 、 $2\omega$ 、 $\omega$  は、加熱している熱流に対して温度信号が 3 倍、2 倍、同じ周波数になるものを指す。

Measurement methods of nano-scale thin film and interfacial thermal resistance (cross-plane direction)

	Sample system	Heating	Temperature response
Time domain		Pulse laser	
		Pulse laser	
Frequency domain		AC current	
		AC current	
		Period laser	

図 4-1-2

Time Domain と Frequency Domain のどちらもメリット、デメリットがあるが、Time Domain は馴染みやすく、直感的に理解しやすい方法であるのに対して、Frequency Domain は周波数空間で見ているため、直感的ではないとも言える。しかし、Time Domain は、解析原理からみると、1 回のパルス全部フーリエ変換し、周波数空間において全ての周波数を扱う手法であり、その一方で、Frequency Domain は、その中の 1 つの周波数を抽出して解析を行うものであることから、Time Domain 法と比較して、解

析原理が圧倒的に簡単な手法である。Time Domain の解析がアメリカの数学者が作った方法と式に頼った解析をしており、解析結果が本当に正しいかどうかを分かって測定している人はそれほど多くはない。これに対して Frequency Domain の方は理論的には簡単であり、特に加熱領域を大きくし温度測定領域を小さくすることにより一次元の熱伝導の条件を満たすと、さらに簡単に解析できる。

我々は図 4-1-3 に示す方程式で実際に解いているが、一切近似条件を使わない精密解となる。そういう方法に基づいて開発した計測装置を特許出願したところ審査を通り、特許登録される予定である。一次元の熱伝導条件については、膜が薄ければ薄いほど解析しやすく、厚さには上限があるが、下限はない。どんな薄い膜も理論上は測定可能であり、特に界面測定に向いている。

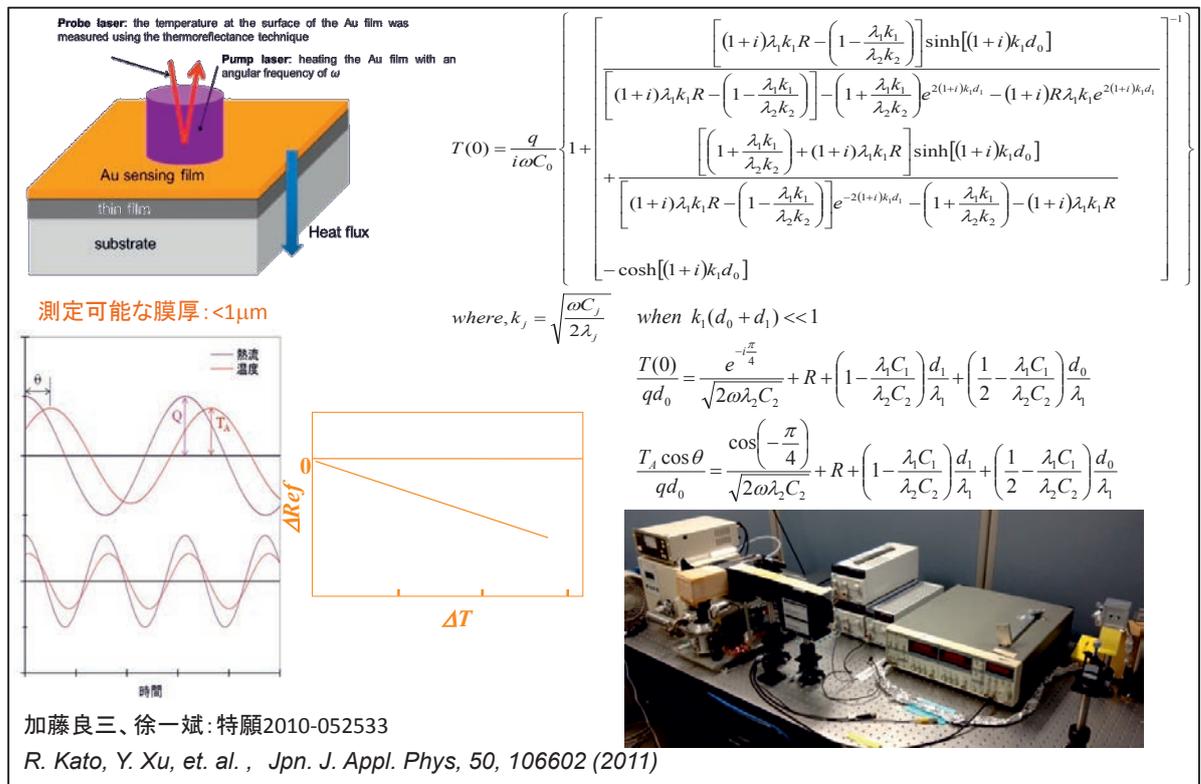


図 4-1-3

本方法を利用して我々が膜と界面を測定した結果の一例として、Zinc Oxide 薄膜を図 4-1-4 に示す。スパッタで作ったこの薄膜は TEM 画像に見られる様に大体 200nm 厚の細かな結晶からなる初期成長領域が存在し、その上は大きく成長した結晶から構成されている。この構造の不均一性は熱伝導にそのまま表れている。膜の熱抵抗は、もし均質であれば厚さに比例するが、ここでは均質にならず、下の方が熱抵抗が高く、上の方が低くなる。さらに面白い点はこの膜が柱状結晶からなることにある。その直径は大体数十 nm、長さが数百 nm であり、先ほどの粒界の影響があれば粒の直径方向と長さ方向の熱伝導率が異なると予想されるが、測定結果はあまり変わらず、基本的には同じ傾向となる。ここで単結晶の熱伝導率が 100 W/m·K 程度あるのに対して 5 ~ 7 程度しかなく、粒の長さ方向の熱伝導率も粒の直径サイズに依存することが分かった。理論的に粒界だけでは解釈はでき

なくなるので、少し解析を進めてみると、この一つ一つの粒子自体の熱伝導がバルクと異なるだけではなくて、サイズに依存して変わっていることや小さい粒子自体にも単結晶と比べて数多くの欠陥が含まれており、それにより熱伝導が変わっていることが分かった。これらはこれまでの物理の理論では殆ど考慮されていなかった欠陥である。

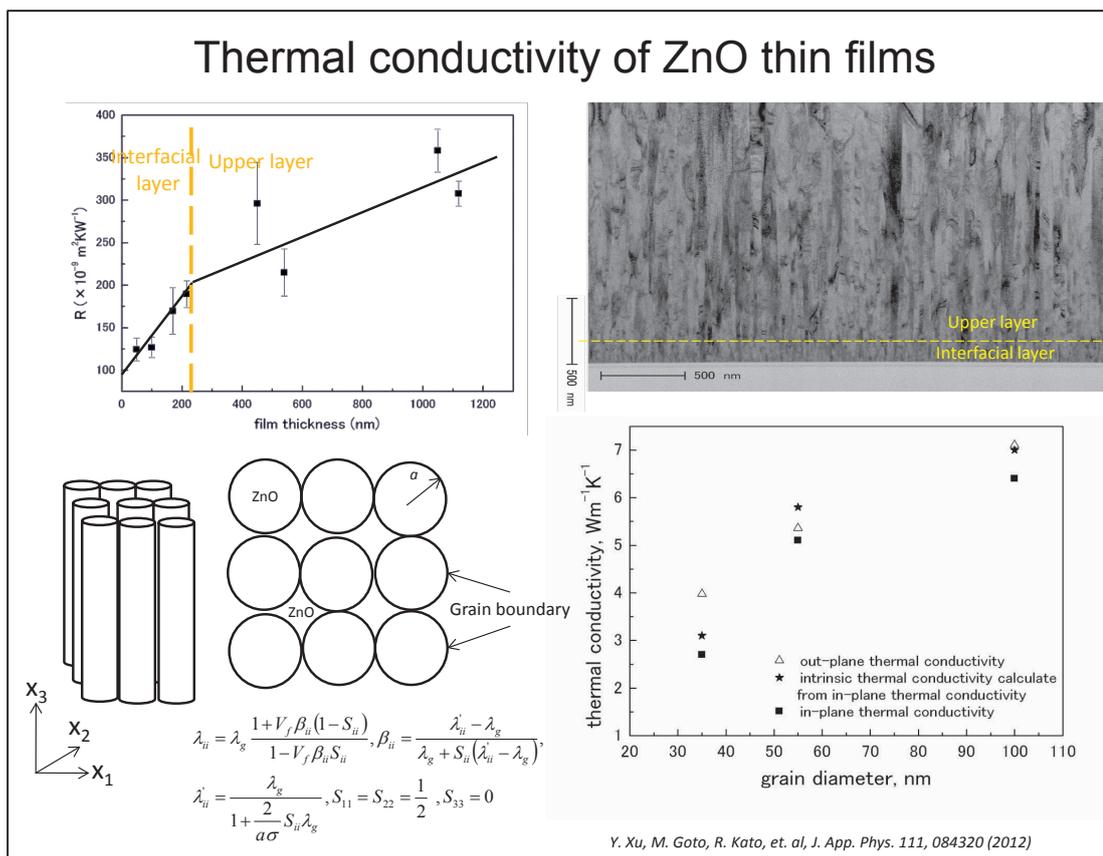


図 4-1-4

また、膜厚が 100 nm と 250 nm のアモルファスのシリコン (Si) あるいはゲルマニウム (Ge) 薄膜の熱伝導率を測定した例を図 4-1-5 に示す。横軸が薄膜成膜時の温度で、縦軸が熱伝導率である。これまでアモルファス中のフォノン平均自由行程は大体 2 ~ 3 nm と言われており、もしその通りであればこの程度の膜厚差では膜厚依存性が無いはずであるが、明らかに 250 nm の方が Si も Ge も高い熱伝導率が得られている。この様に古典的な理論では解析が不可能となるので、MD 法によるシミュレーションでフォノンの平均自由行程を計算することが行われている。その結果、フォノンの平均自由行程は一定ではなくて、その周波数に依存することが分かってきた。低周波数側は数百 nm にも達する非常に長い平均自由行程を持っており、これを利用すると説明が可能になる。ただし、 $\text{SiO}_2$  については 20 ~ 500 nm を測っても膜厚依存性が全く見られないことから、Si あるいは Ge 薄膜に見られる膜厚依存性はそれらに特有なフォノン構造によるものである。また、25°C および 300°C で堆積された Ge 膜はいずれもアモルファスであり、TEM 像で全く区別が見られないが、熱伝導に関しては明らかな堆積温度依存性が見られる。これは未だに説明ができておらず、これらの構造で何が違うかは分からない状況にある。

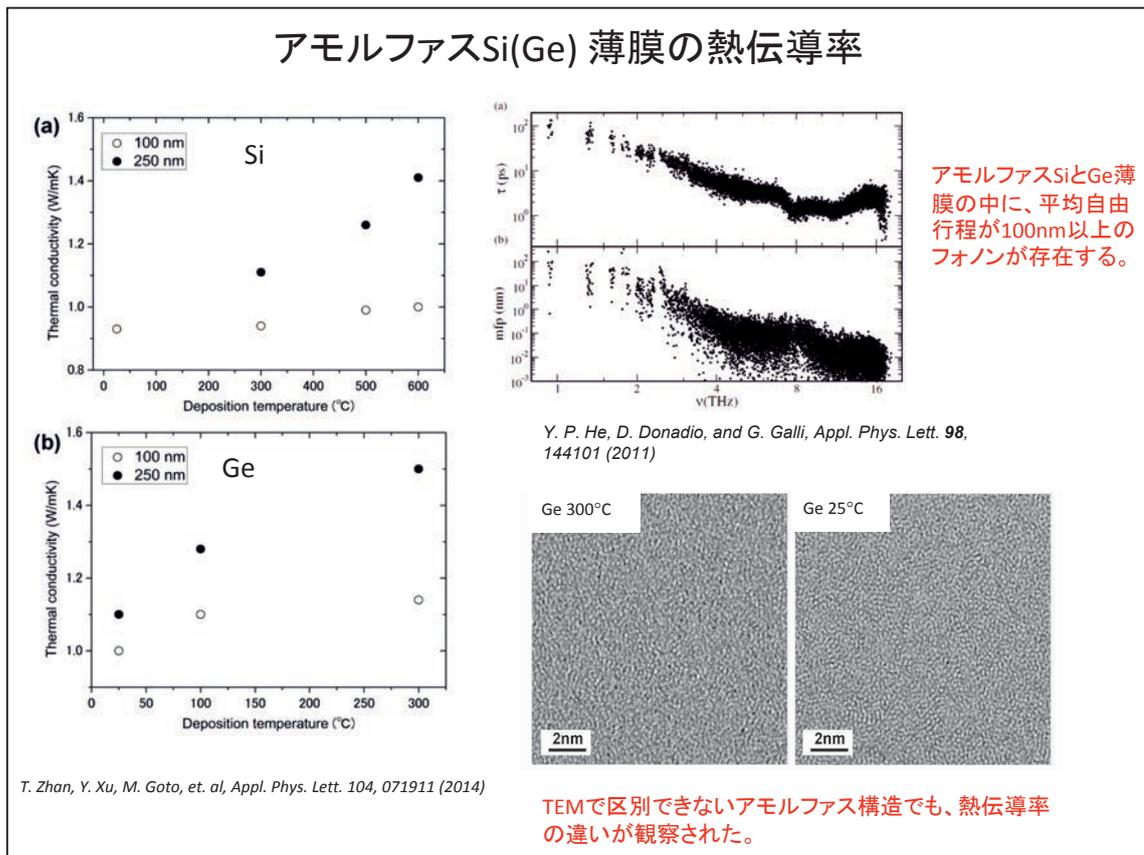


図 4-1-5

界面熱抵抗については、工学的に問題となる接触抵抗と物理的なフォノンモデルという2つの解釈があるが、今日の話はフォノンモデルとなる。このモデルに基づいて簡単に計算するものとして、Diffusion mismatch modelがある。原理としては2つの材料のフォノンの状況のミスマッチによって熱伝導が生じるというモデルであるが、我々はこのモデルに基づいて1,000種類の界面を計算した。これを図4-1-6に示す。この1,000種類の材料をデバイ温度順に並べて分かったことは、角の所に片方はデバイ温度の低い材料、片方はデバイ温度の高い材料を配置した場合はミスマッチが大きいため界面熱抵抗も大きいですが、デバイ温度が近いと界面熱抵抗も小さくなり、大体同じデバイ温度で且つデバイ温度が高い時に熱抵抗が一番低いことが分かった。

これらのデータは全て界面熱伝達率データベースの中に収納し、インターネット上で無料にて公開している。この予測値を存在する実験値と比較すると、そのうちの50%は一致し、25%は実験値のほうが高く、残り25%は実験値のほうが低い。その差は大体数倍の差はあるものの、桁を超えるほどの大きな差は見られない。

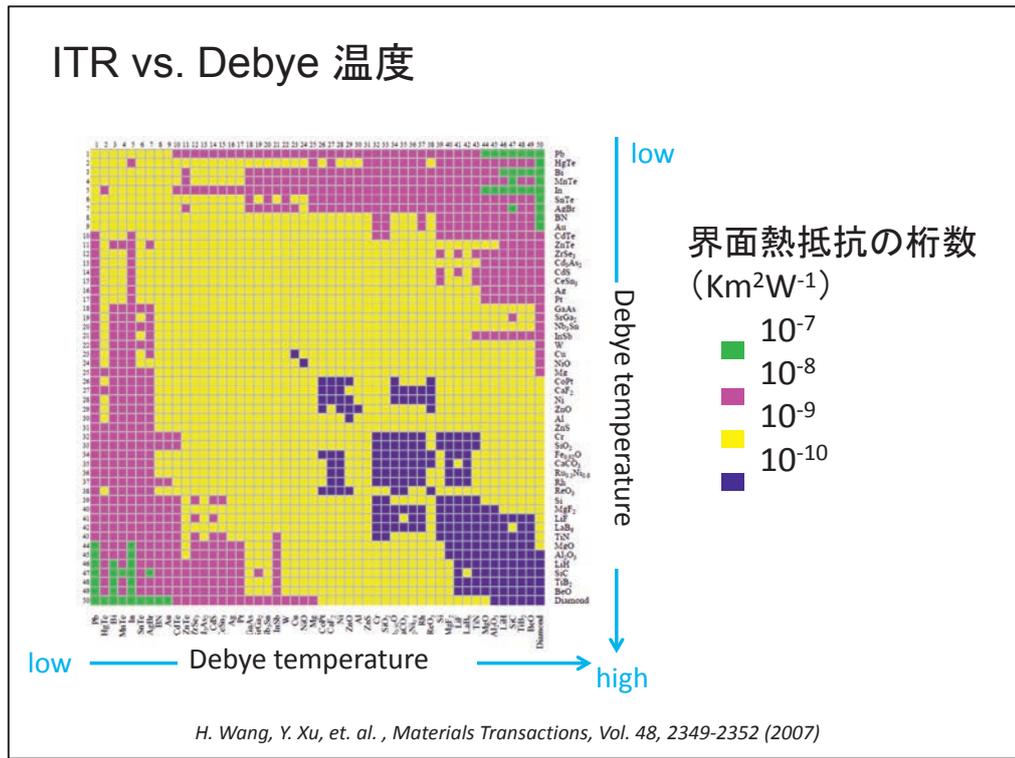


図 4-1-6

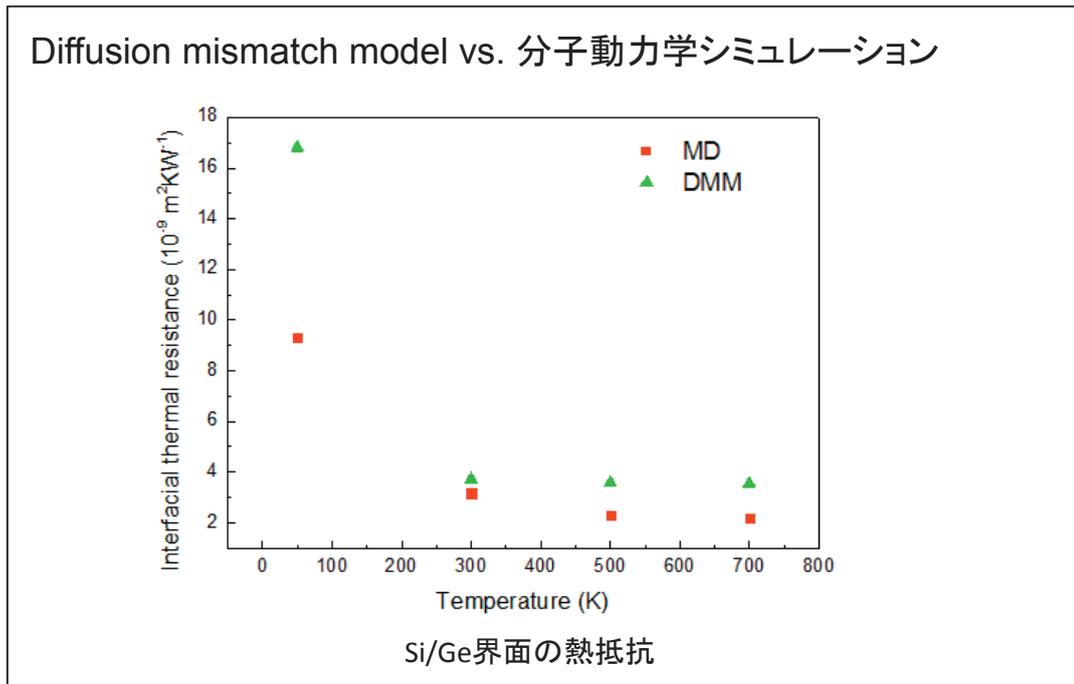


図 4-1-7

先程の計算結果と MD のシミュレーションの結果を比べると、図 4-1-7 に示す様に Si/Ge の界面の場合には、全ての温度領域に関して MD の結果はより低い熱抵抗を予測している。これは Diffusion mismatch model は界面での結合は無視しており、フォノンの DOS はバルク状態と変わらないという仮定になっているものの、実際の材料は界面でひずみを生じて DOS が変わり、より熱が通り易くなっているのが原因だと考えられる。

金とサファイアの界面で、成膜条件により様々なサイズの金粒子と接触率が異なる界面を作った場合の界面熱抵抗を測定している。界面抵抗率は、どの程度の割合できちんとくっついているかという結合率に依存する。もちろん結合率が高いほうが熱抵抗は低い。さらに空隙の効果を除いて金の粒子サイズにも依存しており、粒子サイズが大ききときは理論値と一致するものの、ナノ以下になってくると界面熱抵抗が増加することが分かる。特に熱抵抗が低い所では X 線回折から熱処理後に金属間化合物相ができていたことが分かる。これは界面の化学結合によって界面熱抵抗が下がることを示している。

まとめると、我々の研究でのフォノンエンジニアリングは材料作製、計測技術、シミュレーション・理論解析の 3 つの要素について情報を共有するシステムが存在した形となっている。それぞれがお互いに参照しつつ、不明な点の解析を進めて行くことが重要であり、この研究情報共有システムにおいて、異なる研究機関のデータベースとツールの共有をはかり、それらを管理・保管することが重要であると考えられる。

### 【質疑応答】

コメント：パルスレーザーで加熱する Time Domain と周期的に加熱する Frequency Domain の比較の際に、パルスは直感的であるとの指摘があった。パルス加熱により決まった距離を一次元拡散していくのを測るのがレーザフラッシュ法であり、超高速レーザフラッシュ法（サーモリフレクタンス法）である。パルスで発熱させてパルスで計測するのが基本である。また、熱は最後一定温度になる半分の温度に達するまでの時間を測り、試料の厚さの二乗を時間で割って 0.1388 を掛ければ出るという、非常に簡単に計算できる方法であり、正しく測れているかどうか一目で分かる。この様にパルス加熱法やレーザフラッシュ法は分かりやすい方法であり、JIS 規格や ISO 規格もバルクから薄膜のデータまで、我々の様な計量の標準研究所が標準物質も出して国家標準を構成している。そういう意味では安心して使ってもらえる。

Q：金粒子の熱抵抗について、界面の化学結合によって熱抵抗が変化するということがあがるが、具体的にどのようなことを意味しているのか。

A：X 線回折で新しい相のピークが検出できる所で一気に熱伝導が下がっている。フォノンレベルで見ると、化学結合によって界面でのフォノン構造が変わったことにより、格子のマッチやミスマッチだけではなく、熱伝導が起りやすい経路が形成されるのではないかという考えである。この実験だけではなく、最近の Nature 誌や Science 誌でも 2 つの材料の界面に化学結合しやすい原子層が入ると、熱抵抗が簡単に低減されたとの報告もあり、これは基本的に界面のフォノンの状態が変わった結果だと考

えている。

Q : それは、最初は完全に化学結合できていなかったものが熱処理により、しっかりと結合できたことによるという意味か。

A : 最初スパッタ法で作った界面には金とサファイアしか存在しないが、熱処理後に 500°C で 30 分置くと、新しいピークが検出され、それに対応して熱抵抗が下がった。(すなわち、新しい相が形成されたことによるものと考えている)

Q : シミュレーションで MD と DMM を比較されているが、その結果に対して実験結果はどの辺にあるのか。

A : 実験は両方ともに合っていない。大体は DMM よりも高い 10 ぐらいの値が出ているが、色々な原因による結果と考えられて説明は難しい。

## 4.2 第一原理からの格子熱伝導計算の現状

東後 篤史（京都大学）

フォノン間相互作用の研究を中心に行っている。格子系の熱伝導はフォノン間相互作用の典型的な例で、実験データも豊富であるので、その研究の一環として熱伝導率の計算をするソフトウェアを開発している。熱伝導の大きさは温度勾配に比例することが知られており（フーリエの法則）、その比例定数が熱伝導率  $\kappa$  である。格子熱伝導率を決定するのに、我々はフォノンのボルツマン方程式を解く手法を用いている。計算の入力として必要なフォノン間相互作用強度を第一原理非調和格子力学計算から求めている。そのためのソフトウェアとして、オープンソースプログラム **Phonopy** を開発している。

主にバルク結晶の計算を行っているが、バルク結晶においては対称性を考慮すると計算量が非常に少なくなる場合が多く、また同時に数値精度を上げることができるので、結晶の対称性を正しく取り扱うことは定量的な計算を行うにあたって重要である。したがって、結晶の対称性に関する計算を行うソフトウェアライブラリ **Spglib** を開発している。このソフトウェアもオープンソースプログラムとして配布しており、フォノン計算以外にも世界でたくさん使われている。また、計算を系統的に大量に行うための自動計算システムである、オープンソースコード **Cogue** を開発して研究において利用している。原子に働く力を計算するためにウィーン大学で開発されている第一原理平面波 PAW 法の **VASP** (**Vienna Ab initio Simulation Package**) コードを用いている。第一原理計算を用いるのは、フォノン間相互作用を含む結晶の非調和性を表すためのモデルポテンシャルの開発が困難だからである。

ここで用いている手法と同様の格子熱伝導率計算を行うソフトウェアは、世界中で幾つかのグループがそれぞれ作っており、すでに論文も出ている。しかし、論文にはあまり詳細について書いていないので、計算の信頼性がよく分からない状況である。フランスの **Natalio Mingo** のグループは、オープンソースコード **ShengBTE** を公開しており、上述した我々の開発しているソフトウェア **spglib** を内部的に用いている。我々の開発している格子熱伝導率計算コード **Phonopy** のソースコードは公開しているが、熱伝導率計算を行うためのマニュアルに関しては、クローズドベータとして限られた数のグループに配布している以外は、まだ一般に公開していない。

第一原理非調和格子力学計算から格子熱伝導率を計算する手法を用いた研究で、興味のあるエキゾチックな系の物質を研究対象とした論文は増えてきている。そういった場合、ひとつの物質を計算することで、ひとつ論文が出るというような状況である。ただ、様々な物質を系統的に計算し、計算手法の妥当性を検証する研究や、フォノン間相互作用のような微視的な物理現象を解明するような基礎研究はあまりなされていない。例外的に、最近、**Lucas Lindsay**（米国オークリッジ国立研究所）が、ユニットセルの中に原子数が 2 原子や 4 原子であるといった比較的シンプルな結晶系を対象とした系統的な研究を行っている。

格子熱伝導を計算から得るためには、非調和性の計算は必須であるが、調和性に関する部分だけ、つまり、フォノン振動数や群速度が分かればよいというのであれば、調和近似レベルの第一原理格子力学計算で済む。そういったフォノン計算は2体の原子間相互作用が分かれば計算できるが、以前のコンピュータでは第一原理計算から行うのが大変であった。しかしながら、最近のコンピュータであれば、比較的気楽に計算ができるようになってきている。したがって、良い2体間の原子間モデルポテンシャルがなかったとしても、多くの系で第一原理計算からのフォノン計算が可能となっている。第一原理フォノン計算で分かることは、例えば熱力学的な物性値（比熱、熱膨張率など）であり、これらは、かなり実験を再現している。二次的な構造相転移やペロブスカイトの研究にもよく用いられている。仮想的な結晶構造の機械的構造安定性の検証（仮想構造のスクリーニング）、原子の空間分布や原子変位の温度依存性なども計算でき、実験との比較も容易になってきている。

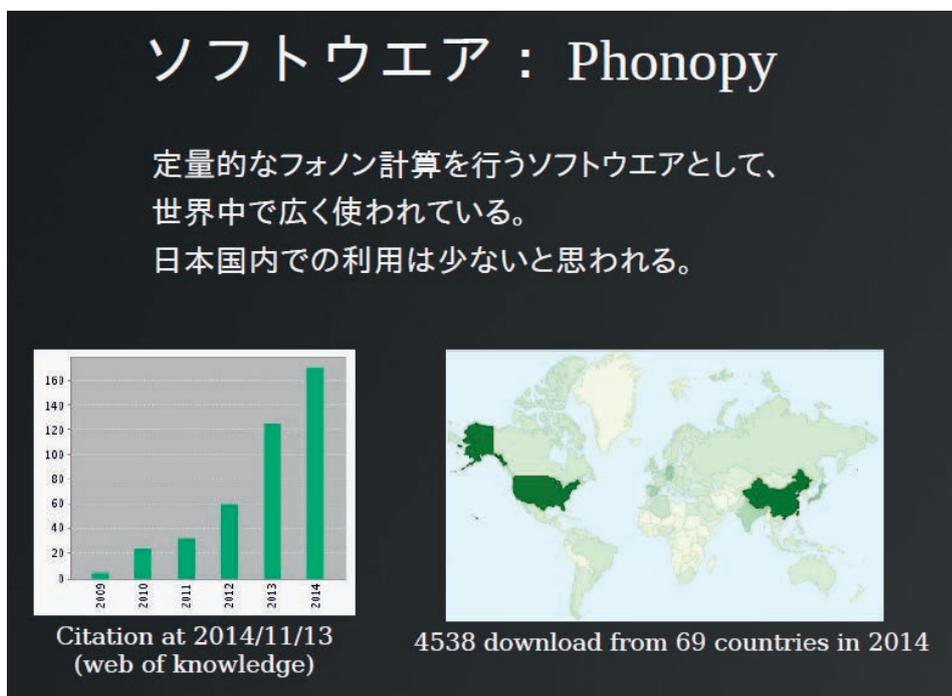


図 4-2-1

そのような第一原理フォノン計算を行うソフトウェアはいくつかあるが、我々が開発している Phonopy が最近是非常にポピュラーになってきている。Phonopy は使いやすく高機能で、また、たくさんの人が使うことで信頼性が高くなってきている。図 4-2-1 に示すように、Phonopy を用いた研究の論文の引用数は急激に増えてきており、これは第一原理フォノン計算を行う人の数が急激に増えてきていることを反映しているものと思われる。第一原理フォノン計算が身近なツールとなってきており、定量的な計算ができることでフォノンに関する研究が注目されてきているということかもしれない。現在、このソフトウェアは世界中の国からダウンロードされている。共同研究をもちかけてくるのは、ドイツのアーヘン工科大学（RWTH）、英国のバース大学、米国のドレクセル大学、フランスの国立科学研究センター（CNRS）や国立航空宇宙研究所（ONERA）といった主に外

国の研究者である。他にも、ドイツ・ボーフム大学の先進的材料シミュレーション学際センター (ICAMS) や、台湾、韓国、米国の大学からも共同研究の声がかかるが、日本では私の行っている研究について、限られた数の研究者しか知らないようである。

次に、熱伝導率の計算をしたい場合、実際どれぐらいのコスト、計算時間がかかるかを述べる。今、ユニットセル中に4つの原子があるウルツ鉱型構造というのを考える。原子間の相互作用をある程度遠くの距離まで計算するためにユニットセルを72原子ぐらいまで拡張し、その拡張セル(スーパーセル)中での3体の原子間の全ての相互作用を計算する。私は、自作した Xeon-16 コア×45 ノードのコンピュータ・クラスタを使っているが、ウルツ鉱型結晶の計算には、元素など系にもよるが、このクラスタを用いて大体1日から2日ぐらいの時間がかかるくらいの大変な計算になる。原子間の相互作用を得るために、ある原子を変位させたとき他の原子がどういう力を感じるかを計算する。その原子変位のパターン数が1,254個あれば1,254個のスーパーセル計算が必要となる。1個のスーパーセル計算が、4原子からなる結晶の第一原理計算の200倍程度の計算コストを必要とするので、全部掛け算すると、普通の第一原理計算の30万倍ぐらいの計算機能力が必要になる。

岩塩型、閃亜鉛鉱型、ウルツ鉱型の結晶構造に対して、元素を変えて約100個の結晶の格子熱伝導率を系統的に計算した。このような系統的なたくさんの計算を手作業で行うのは大変なので、自動計算システム Cogue を開発して、計算機に自動的に計算させている。熱伝導率の実験値が知られているものに関して、計算結果と実験値を比較すると、両者は対数スケールでは非常によく合っている。10 W/mK 前後の低熱伝導率の領域では、少し不一致がある。計算の問題か、実験の問題か、今のところ原因がよく分かっていない。

線形化ボルツマン方程式を直接的に解くような場合 (LBTE) は、緩和時間近似 (RTA) より計算コストが必要となる。上述の結晶系に関しては、LBTE と RTA では対数スケールでプロットすると見た目ではほとんど変わらない結果が得られる。RTA だけでなく、LBTE も私が開発した Phonopy に実装されている。これらの計算は数値精度に極めて敏感で高い計算精度が必要で、計算のどこかの精度が落ちれば格子熱伝導率が1桁や2桁ぐらい変わってしまうことも起こる。したがって、慎重に計算を行う必要がある。

酸化マグネシウム (MgO) の格子熱伝導率の圧力依存性の研究も行っている。対数ではなく線形のスケールで実験値と比較してよい一致が得られている。線形のスケールで計算と実験が圧力に対してよく一致するというのは簡単なことではないが、私がソフトウェアに実装している範囲のすべての技術を用いて計算することで、この結果が得られている。圧力に対して熱伝導率は線形に変わるということが現象論的に知られており、この計算結果はそれをよく再現している。格子熱伝導率の定量的な計算結果は、電子系の多体効果の取り扱い (交換相関ポテンシャルのタイプ) の違いで多少変わるが、GGA-PBE、LDA、PBE-sol のどれに対しても、この現象を非常に良く再現している。

最後は、計算手法の概略について述べる。結晶中の1個の原子を少しだけ動かすと、他の原子は力を感じる。この力は、第一原理計算では波動関数の一次の摂動から直接計算で

きる。例えば、2 次のオーダーの原子間の力定数を計算するには、ある 1 個の原子を微小変位させて他の原子にかかる力を計算すれば、原子ペア間の力の定数が分かるので、その計算を全ての原子のペアに対して行うことにより、2 次の力の定数が得られる。図 4-2-2 に示すように、3 次の定数の計算をするには、さらにもう 1 個原子を選び、計 2 個の原子をペアで動かし、他の原子に働く力を計算する。この計算は 2 次の力の定数の計算よりも数値精度がかなり厳しい。ペアの原子変位パターンが極端に増えるので、計算量が爆発的に増える。

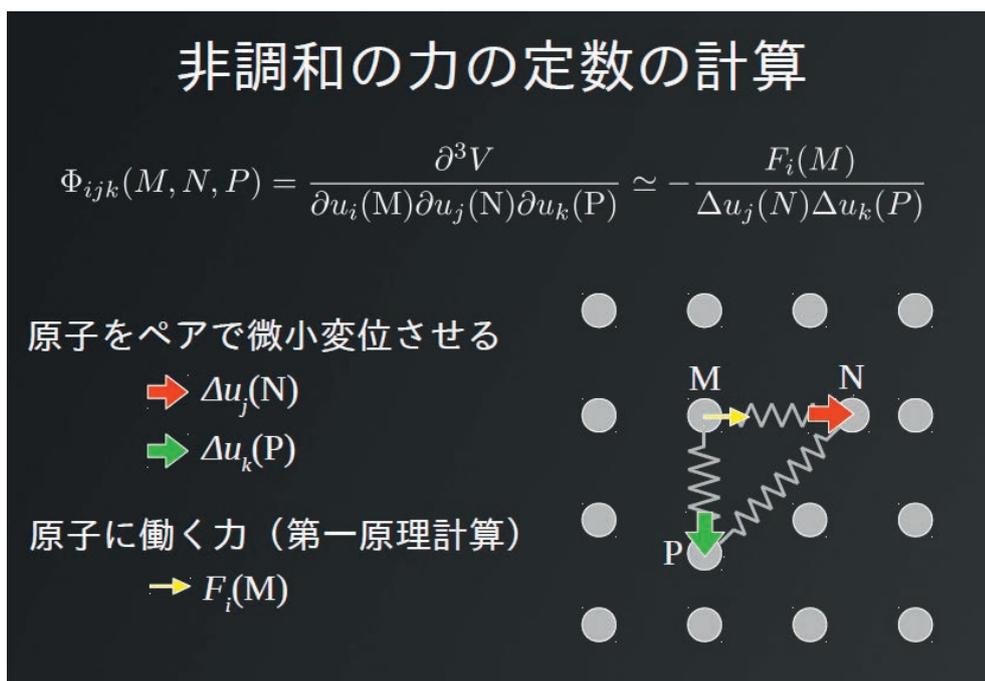


図 4-2-2

フォノンというのは原子の集団的な協調運動である。1 個の原子が揺れているという描像ではない。ハミルトニアンをフォノンを基底として展開することで、フォノン間相互作用強度はその展開係数として計算される。フォノンのライフタイムは、フォノン間相互作用強度などから計算できる。フォノンのライフタイムが計算できてしまえば、格子熱伝導率はそれから簡単に計算できる。

【質疑応答】

- Q： 格子熱伝導の計算には、非調和項は入っているか。
- A： 入っている。一番低次の非調和項だけを入れている。
- Q： 熱伝導は、フォノンの衝突という形で扱っているのか。
- A： そうである。フォノンの衝突（フォノン間相互作用）と、3 次の力の定数（非調和項）は、ほとんどフーリエ変換しただけの関係である。
- Q： 結晶に不完全性があるときにどうなるかという話はやはり議論になっていると思うが、不完全結晶の熱伝導計算にもある程度は使えるのか。

- A: 我々の用いている手法では直接的に扱うのは難しい。例えば、アイソトープがランダムに入っている場合など、そういう風に平均化できる場合は理論的に扱いやすく、ライフタイムとして取り入れることができるからである。しかしながら、例えば界面などは、現時点では非常に計算が難しい。
- Q: 大変な計算をたくさん行っているが、計算結果はいわゆるデータベースの形で公開されているか。
- A: 全く公開していない。データを公開してもよいが、私自身がデータベースを作ったり管理したりするのは、時間的に難しい。
- Q: まず初めに第一原理計算をやって、最後にボルツマン方程式のほうへ展開するということなのか。
- A: ボルツマン方程式の入力パラメータを第一原理計算から作るということである。
- Q: ボルツマン方程式は連続体に対して使えるので、計算モデルは連続体モデルということか。
- A: そうである。
- Q: ということは、具体的なデバイス構造を考え、有限要素法などとボルツマン方程式を組み合わせ、様々なデバイス中での様々な熱の振る舞いをこの方法で計算できるのではないか。
- A: ボルツマン方程式の解き方が違うので、直接的にはできないと思う。多分いろいろトリックがあると思うが、そういうことを私は全然知らない。塩見先生のほうでご存じではないかと思う。
- Q: 何か緩和定数に全部押し込めて計算するとか、そういうことはできないか。
- A: 緩和時間近似 (RTA) の場合、既に押し込まれてしまっている。我々が用いている手法の場合、逆格子空間の問題を解いており、実空間では空間全体にフォノンが広がっている。
- Q: 今の話は東後先生の指摘の通りだと思うが、この精度でこのフレームワークでそういう界面を同時に取り扱うのはなかなか難しいのではないか。したがって、トリックと言ったが、もうちょっと計算精度を妥協して、例えば内部はバルクの緩和時間で行って、界面では、その透過率でその界面を透過していくような計算はどうか。そのときも拡散的に反射されるのか、それとも鏡面的に反射されるのか、そういうモデルを立てて組み合わせながら、例えばモンテカルロ法で解くとか、そういったレベルでは取り扱えるのではないかと考えている。
- A: フォノンが壁にぶつかったところでエネルギーが全方向に拡散してしまうというようなモデルを使うと、平均自由行程 (例えば、 $0.5 \mu\text{m}$ ) の逆数をライフタイムとして簡単に入れることもできる。いろいろな界面のモデルというのがあり、界面を量子的に扱って厳密に計算する方法まで、いろいろすごく幅がある。
- Q: 緩和時間近似 (RTA) の計算妥当性のスライドでは、普通に両対数プロットされているが、見ると  $1,000\text{W/mK}$  ぐらいまでだったら RTA でも行けるという解釈もできなくもないと考えられる。ボルツマン輸送方程式で解く必要があるのはどんな材料か、どういう材料だと RTA が崩壊するのか、コメントがあれば頂きたい。
- A: 私が計算した範囲では、どういう材料だと RTA が崩壊するのかは全く分からない。強く系に依存するかもしれない。

- Q：フォノンの非平衡性みたいなものにも利いてくると思う。例えば、散乱のスペースが小さい場合とか、ナノチューブの場合だったら、どうなのか。
- A：それは分からない。基本的には、平衡である（すなわち、右に行く確率と左に行く確率は等しい）という仮定のもとで、解いているからである。
- Q：確かに、この場合はそうである。だから、そういう扱いが、例えば何千 W/mK といった大きな値になると、おそらくそういう仮定がなかなか成り立たなくなってくる可能性がある。
- A：そうだと思う。線形化ボルツマン方程式と RTA がどこまで行けるか全く分からない。多分、誰もあまりきっちりできる道具立てを持っていないのではないかな。

### 4.3 半導体における電子・熱輸送シミュレーション

栗野 祐二（慶應義塾大学）

大学に移る前は、富士通の研究所に長くいたので、企業にいた時代を含めて考えてきたことについて話す。どちらかと言うと、このテーマを現実に近い所でどうやって活かし、どのように発展させるべきかということ、ずっと考えてきたので、大胆な取り組みによって現実の課題解決に役立てるという話もしたい。

私は2008年くらいから、『フォノンエンジニアリング』という言葉を使い始めていた。この分野はきっと伸びると考え、その頃の英国出張では訪問先の大学で、そのことを行脚して回ったことを覚えている。その当時、半導体デバイス分野では、フォノンの輸送をきちんと解こうとは誰も考えていなかった頃であった。当時、私はモンテカルロシミュレーションという手法で、HEMT (High Electron Mobility Transistor) や SiGe の微細 MOS デバイスの研究をやっていた頃である。私のドクターでのテーマは「電子輸送現象解明のためのモンテカルロシミュレーション」であった。1985年に、ガリウムヒ素 (GaAs) のショートチャネルデバイスの中で起こる非平衡状態の輸送特性の計算で学位を取った。サブミクロンサイズのデバイスは、丁度、散乱が起こるか起こらないかぐらいの空間サイズのデバイスであるために、それまでのデバイスシミュレーションに用いられていた流体モデルや拡散モデルではきちんと解けないだろうということで、GaAs などのガン効果 (Gunn effect) を計算するために使われたことのあるモンテカルロ法という手法を、1980年にこのテーマに初めて適用した。今では散乱のないバリスティック (Ballistic、弾道) 伝導という言葉が普通に使われているが、おそらく日本で最初にバリスティックという言葉を使ったのは私ではないか。当時、ガリウムヒ素の電子の平均自由行程が半導体の中では一番長く、コーネル大学のレスター・イーストマン (Lester Eastman) 教授らがその輸送現象を表すのに使った言葉であった。このモンテカルロ法という手法はかなり汎用性があり、後で紹介するテーマでもこの手法によってアプローチ可能であった。

さてここで少し、私の専門分野の1つである半導体ヘテロ接合デバイスの話をする。電子輸送現象に対する『バンドエンジニアリング』というのは我々の先輩方が産み出し、エレクトロニクスの世界を変えてきた。私も富士通の HEMT のグループにいたので、これを使いながら HEMT を実用化まで持っていく仕事を支えた。一方、情報量の爆発が非常に切迫しており、それに伴ってエネルギー問題も大きく浮上し、何らかの手を打たなければいけない時代に突入している。今まで、我々は積極的にフォノンを操作して変えようとか、バンドエンジニアリングと同じようなことをフォノンに対してやろうなどとは考えていなかった。しかし、それをそろそろ考えても良いのではないかという発想で、当時この言葉がすでにあっただろうか分からないが、前述したように2008年頃から海外に行く度毎に色々な所で『フォノンエンジニアリング』ということを書いてきた。会社の中では、当時からフォノンを使えそうなニーズはいろいろな所にたくさん転がっていた。例えば、サーマルマネジメントはよく使う言葉になっているが、どうやって熱を逃がすか、捨てている熱を何とかできないかということもよく言われていた。国際半導体技術ロードマップ

(ITRS) 作成の活動は 2000 年頃から携わっているが、私に関わっていた ERM (Emerging Research Materials) と ERD (Emerging Research Devices) においても、フォノンというキーワードはしばらく前から出てきた。今では、アメリカ、ヨーロッパでも既にプロジェクトが始まりつつあり、いろいろな国際会議でも『フォノンエンジニアリング』の名前の付いたチュートリアルが一昨年ぐらいから出てきた。なおこの概念は、直接的ではないが榊裕之先生 (豊田工業大学学長) の量子細線の論文の中に見出せる。

これから、フォノンバンドのエンジニアリングについて、主に理論的な研究について紹介する。最後に実験についても少し触れる

まず先に、結論として、フォノンエンジニアリングに対する私の考えについて紹介する。電子に比べて、フォノンの散乱現象についてはまだよく分かっていないことが多いが、電子の場合には散乱現象の制御をうまく使うことで多くの成果を得てきた。フォノンの場合も同様に制御したいし、まだできるのではないかと思っている。フォノンの分散に関しては、我々がいろいろな低次元系の量子効果電子デバイスをやってきたことからの考察として、ゾーンホールディングやミニバンドといった技術をフォノンに対して導入することができると考えている。デバイスの視点からは、何か構造を工夫することでフォノンを操作するというのが一つのやり方であるが、例えば、フォノンの波長あるいは平均自由行程とデバイスのサイズをうまく合わせることで、お互いを干渉させるということが考えられる。ヘテロ接合によるフォノン伝導の制御もできるはずである。これはシリコンとゲルマニウムの超格子を作製して、ヘテロ界面でのフォノン伝導変化に関する実験が実際に始められている。アメリカの MRS (Materials Research Society) の去年の会議で何件か発表があった。電子に対するヘテロ接合とフォノンに対するヘテロ接合は、同じヘテロ接合でも違う作用をするので、それをうまくエンジニアリングに結び付けることが狙いになる。シミュレーション・理論に関しては、原子レベルからデバイスまでつなぐような解析法を何とか確立したい。もちろん、全てを一つでできるということは難しく、継ぎはぎになるかもしれないが、これを通してできるうまいチームワークができれば、この分野はかなり進むだろう。

ここでは、一つの具体例として、我々のところで行ったモンテカルロシミュレーション法によるガリウムナイトライド (窒化ガリウム、GaN) の電子輸送と FET の解析について紹介する。GaN はパワーデバイスとして非常に期待されているが、パワーデバイスの共通の課題として発熱問題がある。例えば、通常の動作で電圧降下がゲートのドレイン端辺りで最も大きくなることで、その付近での加熱現象が起こる。この加熱現象をきちんと取り扱わないと所望の素子動作ができないという問題が生まれる。

電子輸送のために用いたモンテカルロ法というのは、電子は波としてではなく particle (粒子) としてコンピュータの中で動かして、ボルツマン方程式を解析的に解く代わりに直接、統計的にコンピュータで解く方法である。これを電子だけでなくフォノンも含めて両方とも計算しようと考えた。実はこれは私がドクターコースの頃 (1985 年) にすでに考えていたことであるが、当時はなかなか実現できなかった。その理由は、輸送現象が定常状態まで落ち着くまで時間、言い換えれば時定数 (タイムコンスタント) が電子とフォノンとで桁違いに違うためである。そのため、両方をセルフコンシステント (Self-

consistent、自己無撞着)に解くことは非常に難しく、このテーマはしばらく寝かしていた。それが最近になって、実際に計算を可能にする良い手法を開発することに成功した。そのためには、後で述べるように大胆な仮定をする必要があった。

実際には走行する電子がフォノン (GaN 場合の場合は光学フォノン [Optical Phonon]) を生成し、この光学フォノンが時間とともにフォノン-フォノン散乱の結果として音響フォノン [Acoustic Phonon] に変わっていき、それらがデバイスの中を拡散していくイメージになる。このようにフォノンと電子の輸送が全部計算できれば、どの辺が熱くなるもわかるはずである。

図 4-3-1 は、フォノン輸送を取り扱う必要性を示している。フォノンの場合も電子の場合とほとんど同じで、従来のように熱を流体として計算し、局所的な電界と電流からジュール加熱を求めることができるが、デバイスのサイズが小さくなってくると実際と合わなくなってくる。それは、フォノン輸送現象の場合も定常状態になるまでに非定常輸送があり、デバイスのサイズが十分に定常状態になるほど大きくなければ、言い換えればフォノン散乱の平均自由行程とデバイスサイズが同程度になると、十分何度も散乱した後の結果を使うモデルは全て使えなくなってしまう。そこで、確率的に散乱が扱えるモンテカルロ法が有効な手段となる。一方、量子効果のような波動性はこの方法では扱いにくいという弱点もある。ところが、波動性を扱えるシュレディンガー方程式を解く手法の方は、高電界での散乱現象や温度効果、現実的なデバイス構造のモデル化などに弱点がある。一つで万能なシミュレーション手法はないので、この課題についてはこちらの手法が良い、こちらの手法をベースにして弱点を補っていこう、という進め方が必要だと考えている。

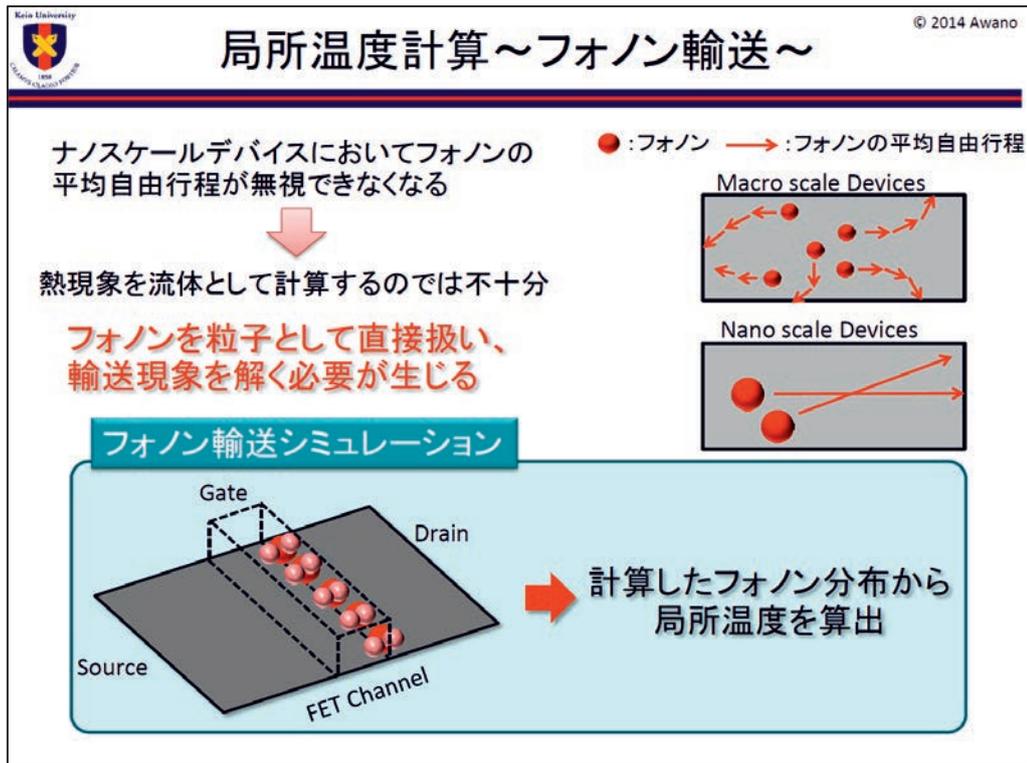


図 4-3-1

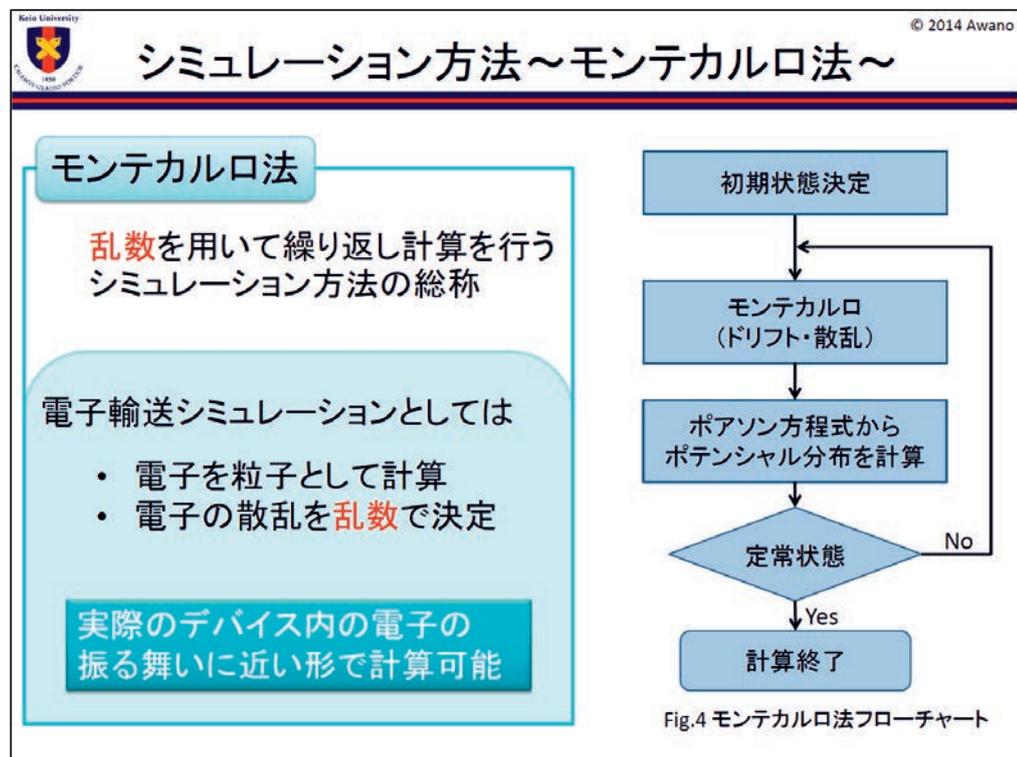


図 4-3-2

次に、図 4-3-2 を用いてモンテカルロ法を簡単に説明する。電子の輸送を計算するとき、モンテカルロ法（乱数を用いた繰り返し計算）を使うのは、ドリフト現象と散乱現象

の解析のところである。電子は電界によって加速されていくが、次の散乱が起こるまでの時間（ドリフト時間）をその散乱確率に基づいて決めたり、散乱の種類を決めたり、また散乱後の終状態を多くの状態の中から確率的に1つ選ぶ場合がある。これらは全て確率現象であって、そこに乱数を用いるモンテカルロ法を自然な形で適用する。多くの電子が存在するデバイスを扱うには、多くの粒子を使う必要がある。これを多粒子モデルというが、多粒子の空間分布から Self-consistent に電界分布を求めることができる。それを次の時間のドリフト電界として電子の輸送にフィードバックする。このような手順を時間発展と同じようにぐるぐる回すと、電子デバイスのシミュレーションができる。シリコンの MOSFET の微細な構造、例えば数十 nm クラスのデバイスシミュレーションでは、最も定量的に正しい答が得られるのはモンテカルロ法だということになっている。私がこの手法を微細デバイスに適用してから、30年の間にそう考えられるようになった。

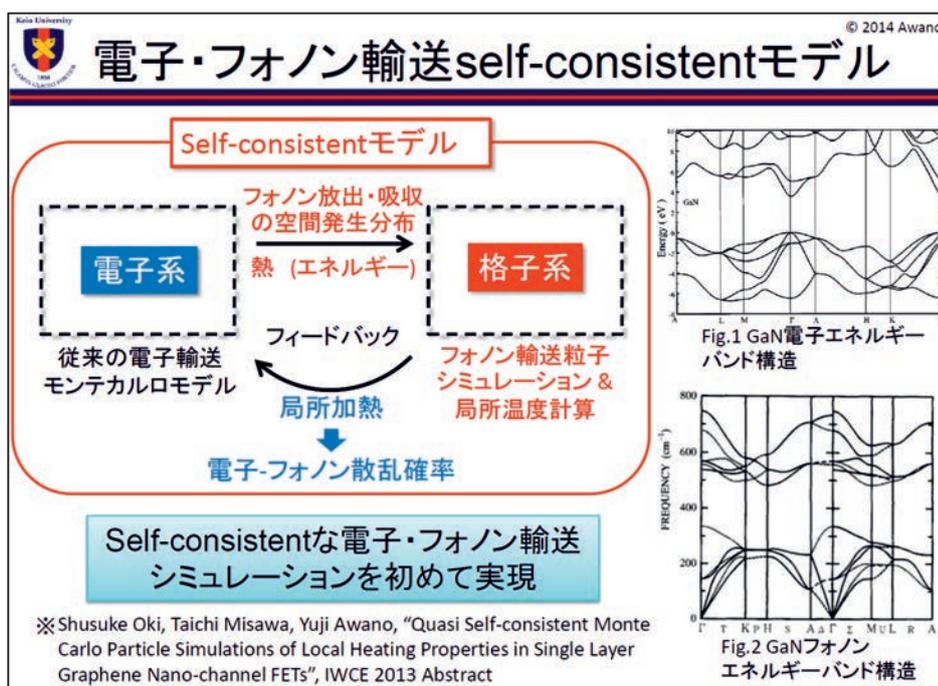


図 4-3-3

今までの電子輸送のためのモンテカルロシミュレーションでは、電子がフォノン散乱をすると、フォノンを発生させて電子は状態変化するが、フォノンに対しては何もやってこなかった（計算しなかった）。そこで、フォノンがいろいろな所に散らばっているものをきちんと計算し、格子系としてフォノンの分布を求めて局所的な温度を再計算して、それを電子のフォノン散乱確率に戻してやると、もっと正確な電子輸送を計算できるようになる。これが図 4-3-3 に示している Self-consistent なループである。さらにフォノン自身、速度を持った量子なので、時間とともに移動し、それによる変化も考慮することができる。電子デバイスの微細化によって、フォノン分布やフォノン輸送の重要性が高まったことで、25年ぶりに電子・フォノン輸送の Self-consistent モデルに取り組むことにした。ただし、上述したように、これには大胆なエンジニアリング的な新しいモデルが必要であった。このモデルは、最初、熱伝導の優れたグラフェンに対して適用したが、パワーエレクトロニ

クスで GaN のほうがより切実な問題を抱えているので、次に GaN へ適用することにした。次にそのモデルについて説明する。

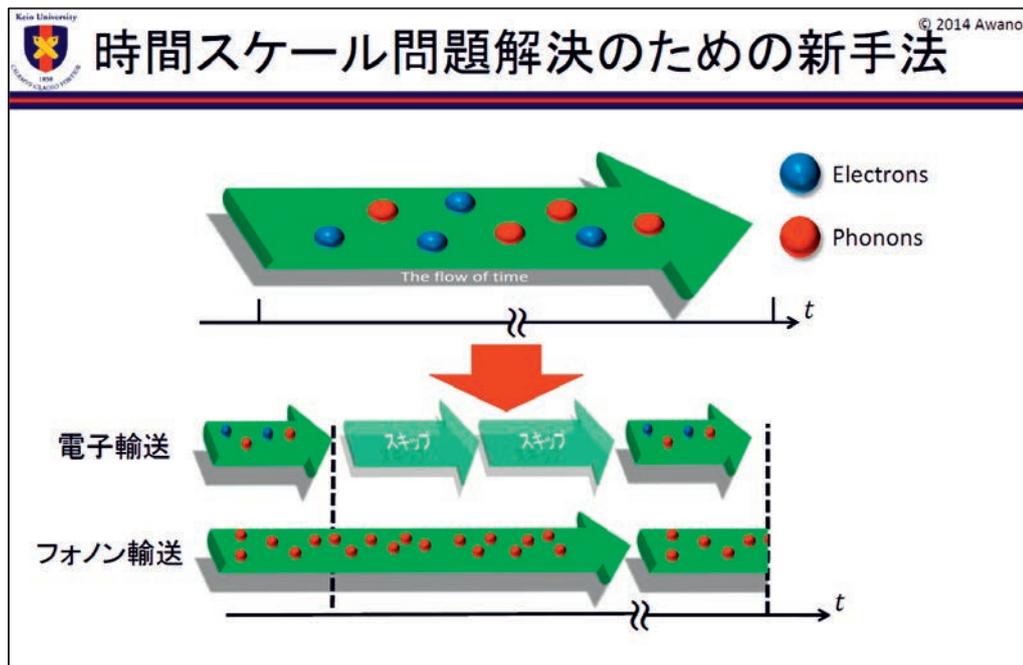


図 4-3-4

実は、まともに電子の運動を計算しながらフォノンの運動を計算するのは無理だった。それは、電子が定常状態に達する時間と、フォノンが定常状態に達する時間とはかなり違いがあるためであった。そこで、2種類の Time constant (計算時間間隔) を使うことにした。電子の輸送に関しては、定常状態までの計算をしたら、そのレプリカを作る。つまり、電子がデバイスの中のどの辺りでフォノンを吐き出すのか (フォノン発生) とか、フォノンを吸い込むのか (フォノン吸収) という情報は、そのレプリカを反映して、実際の電子のモンテカルロ計算はスキップする。その間、フォノン輸送をもっと長時間追跡する。フォノンの移動やフォノン・フォノン散乱で光学フォノンが音響フォノンに化けるといふ所はきちんと計算する。そしてフォノン輸送計算の Time constant まできたら、再び新しい温度分布などを使って電子のレプリカを更新する。これを繰り返すことで、大幅な計算時間の短縮が可能となった。今回は局所的な温度を計算する新しいプログラムも作成した。

図 4-3-5 の右の図に示すように、デバイスは GaN と AlGaIn からなる HEMT 構造になっているが、非常に単純化してある。ソース、ゲート、ドレインがあって、この中を青い色の電子と赤い色のフォノンが両方とも動き回る。これはポンチ絵なので、実際には少し違って、多くの電子の粒子とフォノンの粒子がモデルの中で動き回ることになる。

左図はチャンネルの温度分布を示している。フォノンが移動した後のフォノンの分布から局所的な温度を計算して求めると、どの辺の温度が一番上がっているのかをきちんと見積もることができる。この Self-consistent モデルは、長年の懸案だったもので、今までできなかったことであった。まだまだモデルが不十分であるが、新しいアルゴリズムはこれで確立されたことになる。昨年の IEEE のシミュレーションの学会 (SISPAD) ではとても好評であった。ニーズが非常に多いことは事実で、その場に集まってきた人たちも、熱

をきちんと解くことをやりたかったようであった。これは修士課程1年生の発表であったが、学生の賞ではなく、全体の Best poster 賞をもらった。この発表と並行し、フォノン・フォノン散乱やフォノンの分散関係をもっときちんと自分でも計算しなければいけないと思い、フォノンの第一原理計算を始めている。実は、Phonopy も使っている。

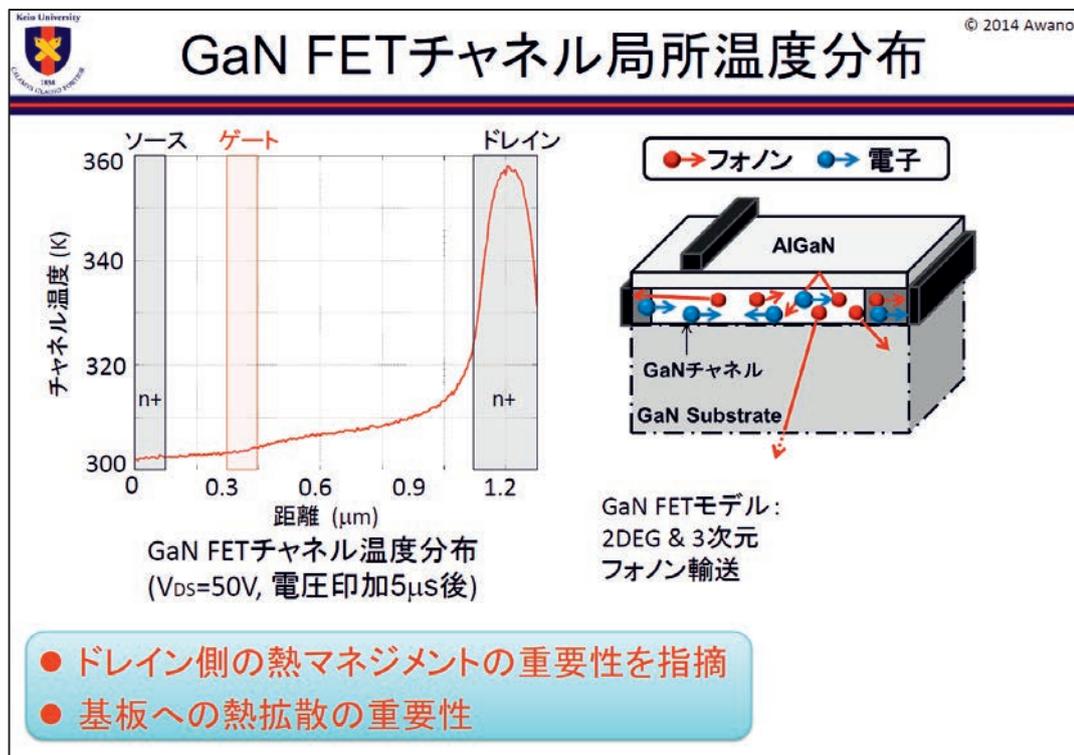


図 4-3-5

先ほど『自分でフォノンをデザインする』ということをお話したが、その一環として、2次元原子状薄膜の計算についても紹介する。グラフェンナノリボン (GNR) やヘキサゴナル窒化ボロン (h-BN) ナノリボン、さらにはそれらのヘテロ接合超格子におけるフォノンと電子の両方について、バンドの第一原理計算を行っている。こういった新材料の両方のバンド計算を行いながら、どんなバンド構造になっていて、そこで電子とフォノンをどう動かすか、といった探索研究を行っている。これは北陸先端大・サザンプトン大学 (英国) の水田先生たちと一緒にやっている。

最後になるが、私は理論屋だけではなく、実験屋でもあるので、実験についても少し紹介したい。我々はカーボンナノチューブやグラフェンを LSI 配線に使う研究を進めているが、同時に放熱に使うという研究も進めている。放熱アプリのほうが先に来るのではないかという人もいます。グラフェンやカーボンナノチューブは非常に優れた熱伝導特性を持っていることも実証している。カーボンナノチューブのバンドル束を柱状にして、それを GaN HEMT 実装用のフリップチップ・バンプに使うというものである。LSI チップを実際にマウントするときには、TIM (Thermal Interface Material) など、チップとヒートシンク間に色々な材質が挟まることになるが、そういう所にグラフェンやナノチューブを使う研究も行っている。これらは主に富士通研究所と一緒にやっている。先ほど新材料

の電子・フォノン両バンド計算を行っていることを話したが、それを本当に作ろうという研究も行なわれつつある。原子レベルで非常に薄い薄膜材料であれば、デザインしたものに似た構造がヘリウムイオンビーム加工によって実現できる可能性がある。北陸先端大・サザンプトン大の水田先生の所では、こうした研究に着手されたところである。

【質疑応答】

Q：電子系のバンドとフォノン系のバンドを組み合わせるときに、カップリングはどういうふうに取り扱っているのか。

A：それは独立にしている。モンテカルロの中では、電子の輸送については、電子が持っている波数が分かれば速度が分かる。フォノンに関しても、群速度からフォノンの輸送をシミュレートして動かしている。2つのカップリングについては、フォノン輸送によってデバイス中の温度分布が変わり、それからフィードバックがかかって電子・フォノン散乱の散乱確率が変わる、というようにしている。音響フォノンと光学フォノンによる電子・フォノン散乱には温度依存性があり、デバイスの中で実際に起こっている局所的な温度が変わっていることをきちんとモンテカルロシミュレーションの中でも解いている。

Q：厳密に考えると、フォノンもいろいろなモードがあって、それぞれのカップリングマトリックスを考える必要があるが、このスケールでのシミュレーションではそこまでできない。どこまでやると良いのか。

A：その質問に答えるのは非常に難しい。実験屋と一緒に、どこまでモデルに入れば実験に合うのか、ということを確認するしかないと思う。電子デバイスのシミュレーションの場合も、例えば電子速度の電界依存性 ( $v$ - $E$  特性) で合わせ込みをしている。また、できるだけパラメータを使わないで、信頼できる数字だけを使って計算していくしかないと思う。フォノンに関しても、やはり実験屋と理論屋はいろいろなタイミングでお互いのデータをフィードバックし合わないと思う。シミュレーションのほうからも歩み寄って、できるだけ実験しやすい簡単な系で計算してみるということが必要であろう。

コメント：熱伝導率というマクロなところで合わせるやり方の他に、非弾性中性子散乱でフォノンをモードごとに調べるやり方があるが、どうやるのか全く想像がつかない。

A：実際には実験と理論が協力することで実現可能になる。実験の人達がやり始めているのであれば、それを理論でも使うようにすべきである。

Q：デバイスの中のシミュレーションで、フォノンを粒子として扱わず、いわゆる拡散方程式を使った場合、100°C程度ホットスポットの温度が違うという話を聞いたことがあるが、実際に測定した場合、どっちが正しいのか。

A：例えば、トランジスタのどの辺で一番発熱しているかというのは、空間的な動きがあるので、ホットピークは古典的な計算から出てくる所よりも少しドレイン側にずれる。実験としてはモンテカルロのほうがより実験に近い。特に、デバイスが小さくなってきているので、ホットなエレクトロンが多く出てきており、このような非平衡状態のものを考慮しないと、実験とのずれがどんどん大きくなる。

Q：トランジスタにおいて、電子のトランスポートだけでシミュレーションやるのに対し

て、フォノンを入れるというのはすごく重要である。その結果として新しく得られた情報の1つは温度分布が出てくることだが、電子のトランスポートに逆に影響を及ぼすということはないのか。

A : 例えば、トランジスタの電流・電圧特性 (I-V カーブ) は飽和するのではなく、発熱により負性抵抗のように電流が減ることは実験でも多くの報告がある。それを計算で出したいと考えているが、まだそこまでは計算が進んでいない。計算すれば出るとは思っている。

Q : GaN の電子の速度を決めているのは光学フォノンによる散乱だと考えるが、それが音響フォノンに変わるプロセスというのはどのように考えたら良いのか。

A : 光学フォノンはすごくゆっくりと動いており、ほとんど動いていない可能性がある。グラフェンではこの群速度は結構速いが、GaN やガリウムヒ素 (GaAs) では群速度はほとんどゼロに近い。そのため、光学フォノンが音響フォノンに変わって、ようやく速度を得て周りに飛び散っていくといったイメージである。その過程はフォノン・フォノン散乱をきちんと解くことでしかシミュレーションできない。今は、その過程はまだかなり大ざっぱな議論しかできていない。理論屋の中にもフォノン・フォノン散乱の計算をする人が出てきているので、一番信憑性の高いものをモデルの中に入れてはいるが、それでもまだエネルギー依存性などはきちんと出ていないので、そこまでは入れていない。簡単なモデルで、それでも現実の実験に近いものが出てくれば、これを使ってもっと精度を上げたいと考えている。特に、パワーデバイスは、例えばカーエレクトロニクスで多く使われ、これから市場が大きくなるが、GaN や SiC では発熱の問題は避けて通れない問題であるので、絶対にやるべきである。

Q : 電子系の温度がものすごく上がり、それが格子系に緩和してくる場合、光学フォノンを介するのか音響フォノンを介するのか、どちらになるのか。

A : 例えば GaAs の場合だと、光学フォノン散乱と音響フォノン散乱は数十倍散乱確率が違う。光学フォノンの散乱頻度はかなり大きいので、光学フォノンが決めていると言って良い。これは材料によるので、例えばシリコン系だと、音響フォノンが決めることになるだろう。

Q : 今はどちらかという簡単な構造を使って計算しているが、例えば IGBT のような複雑な構造になってきたときに、現実的な計算はできるのか。

A : ソフトウェアのベンダーはモンテカルロ手法を既に入れていて、3次元のシミュレータも開発しているので、多分できる。この心臓部のアルゴリズムを教えれば、可能である。

## 5. デバイス革新

### 5.1 熱設計によるデバイス高機能化戦略

内田 建（慶應義塾大学）

デバイスで発生する熱の問題について、デバイス性能を良くするだけではなく、熱を利用して新しい機能を加えるという我々の取り組みについて紹介する。

LSI 関係者にはよく知られていることだが、年代が進むにつれて CPU のパワーがどんどん増えてくるといことが過去あった。90 年代の半ばぐらいには、CPU の温度がホットプレートの温度（200℃）に近い温度になっていて、その勢いが続いているという状況であった。あるウェブサイトでは、CPU のクーラーを取ると本当にその上で目玉焼きができるという写真が公開され、本当にホットプレート程度の温度になっているという状況であった。また、同じ頃に、この勢いで発熱が伸びるとある時にはロケットノズルの温度も超えて、2010 年には太陽の表面温度と等しくなると言われた。ただ、現実にはそうはならなかった。LSI をパッケージに収める必要があることなどから、消費電力は 100W 程度にまでに抑えなくてはいけないので、実はパワーは頭打ちしている。これは、デバイス単体の速度を向上させることを追求することをやめ、その結果 CPU のクロックスピードも向上しなくなってきた。一方で、デバイスは一定のスピードであってもより低電圧で動作することが可能なため、集積度が上がっても、結果的に単位面積辺りの消費電力は減少もしくは一定に保つことができている。また、トランジスタのオフ時のリーク電流を減らすことも重要である。トランジスタの駆動力を一定に保ちつつ電圧を下げたりリーク電流を減らしたりするためには、できるだけ電子を小さな領域に閉じ込め、少しの電圧でも効果的にチャネルポテンシャル（電子を感じるポテンシャル）を変調できるようにしてやるのが基本的な戦略になる。

このためのトランジスタ構造はチャネルが立体的になっていて、この側面を電流が流れる形になっている。このようなトランジスタ構造では、チャネル部にナノスケールのシリコンが使われている。すでに量産化されているシリコントランジスタでも、8nm という薄さになっている。

シリコンを薄膜化、あるいは材料を薄膜化すると、熱伝導率はどんどん悪くなる。構造的な革新を頑張っても将来的にはシリコンの厚さは 4nm を切るぐらいにしなくてはいけないので、熱伝導率はものすごく悪くなってしまうことが予測される。そうすると、このチャネル部分で発生した熱はこのシリコン中を伝わって配線から逃げていく。あるいは、シリコンの基板に逃げていくという経路もあるが、電子を閉じ込めたいという理由で SiO<sub>2</sub> を下に使うために、熱は下に逃げにくくなっている。このように、熱伝導の主な経路が遮断されており、しかも横向き経路もシリコンが狭窄化しているために逃げにくい。例えば、2003 年のスタンフォード大学のグループの発表によると、トランジスタの動作時（静特性）の温度は 300℃ から 400℃ 近い温度になるだろうと予測され、非常に深刻な問題と考えられた。実際、トランジスタは温度が高くなると信頼性が低下し、性能も悪くなる。

我々はこのようなナノ構造シリコンをチャネル部とするトランジスタの動作時における

温度を測定している。また、トランジスタ特性の計算をするときにも、ナノスケールのシリコンの熱伝導率を知らなくては行けないので、ナノ構造シリコンの熱伝導測定に関する実験的な取り組みも行っている。

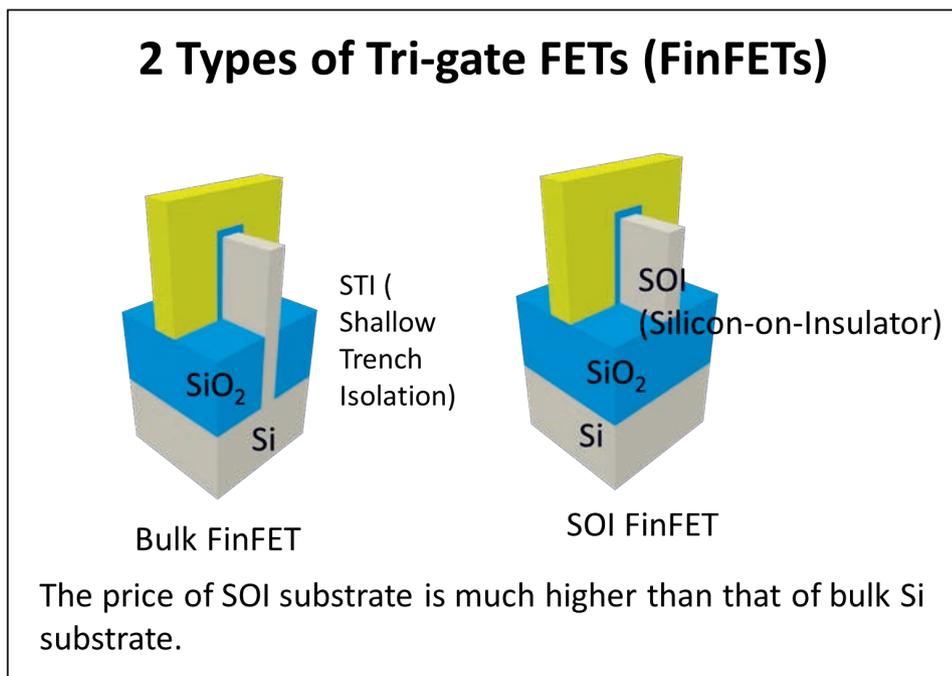


図 5-1-1

現在使われている立体構造トランジスタの温度がどのぐらい上昇しているか予測する計算について紹介する。図 5-1-1 の左の図のようにチャンネルの下がシリコン基板とつながっているものを **Bulk FinFET** と呼び、右の図のように下が  $\text{SiO}_2$  のものを **SOI FinFET** と呼ぶ。ただ、左図のチャンネルもナノスケールなので、シリコンでつながっていても熱は下に逃げにくいという状況になっている。

シミュレーションとしては、我々はハイドロダイナミックのモデルを使っている。キャリア輸送の方程式として、**Drift**、**Diffusion**、**Thermal Diffusion** を取り扱うのに加えて、エネルギーバランス方程式を考慮している。電子のエネルギーが緩和すると、格子のエネルギーが変化していくという形(電子から格子へのエネルギートランスファー)で取り扱っている。さらに、熱伝導率等のドーピング依存性、温度依存性、サイズ依存性など、我々の知り得る限りのデータベースを探して、できるだけ正確なモデルを取り入れて計算している。

その結果、例えば **Bulk FinFET** はドレイン側がかなり熱くなって、温度も相当上昇している。バルク基板を使っていると温度が低くなりそうなのだが、そうはなっていない。一方、**SOI** トランジスタは温度が非常に高くなるのが問題だと思っていたが、最近はその下の  $\text{SiO}_2$  をすごく薄く作ることができるので、そういう基板を使うと温度は結構低くなる。そうすると、**SOI** トランジスタは相互コンダクタンス ( $g_m$ ) が良くなるし、信頼性も高くなり、いろいろなメリットがある。

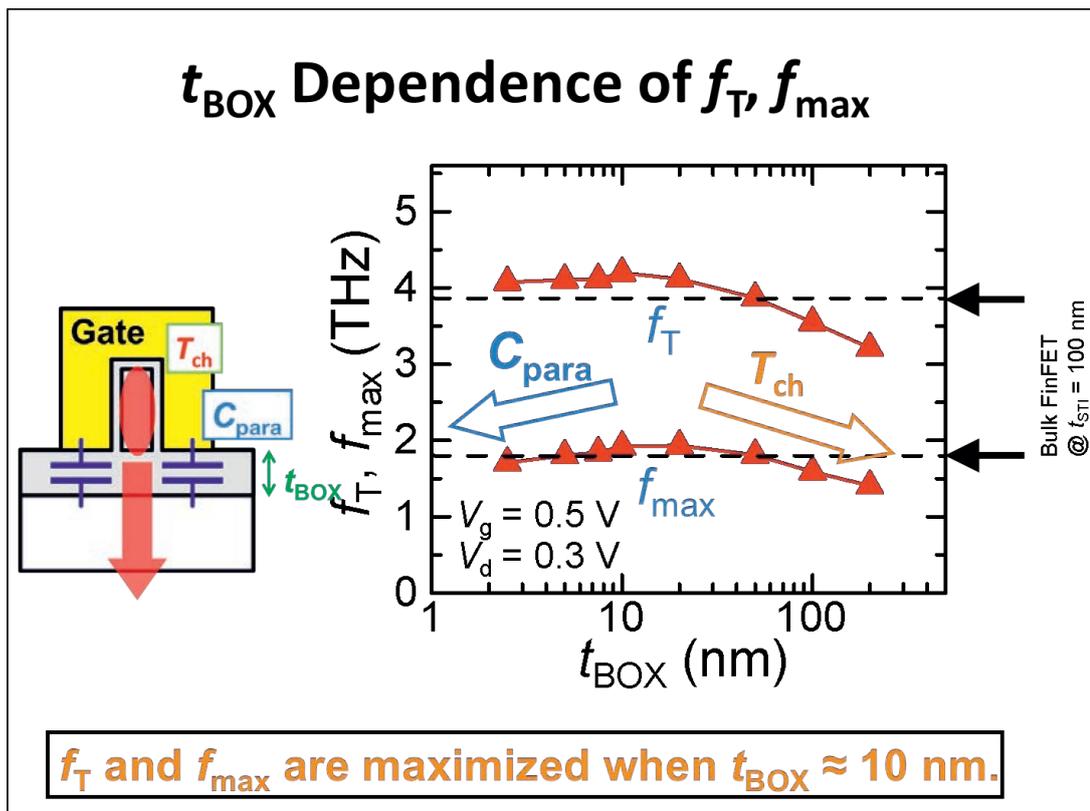


図 5-1-2

我々は電気屋なので、LSI 回路等を考えるときには、容量、インダクタンス、抵抗を考慮して電氣的な最適化を行っている。この考えによれば、薄い BOX（埋め込み酸化膜：SiO<sub>2</sub>）のトランジスタをアナログ回路に応用すると、SiO<sub>2</sub> が薄いのでゲート電極と基板との間の寄生容量が増えてしまい、高周波特性が悪くなってしまうと予測する。しかし、実際に熱を考慮して酸化膜厚に対してトランジスタの遮断周波数  $f_T$  を計算したのが図 5-1-2 である。酸化膜が薄い所からどんどん厚くしていくと、当初は寄生容量が減るために遮断周波数は上昇する。ところが、もっと厚くすると、熱が下に逃げにくくなるので電子・フォノン散乱が増えて  $g_m$  が下がり、アナログ回路の特性は悪くなる。このように、これからの世代は、電氣的な最適化だけでなく熱的な最適化を考えなくてはならない。また、ちゃんとしたパラメータを入れないとデバイス特性を再現することは難しい。我々は電流電圧特性もきっちり再現できるように合わせ込んだパラメータで対策をしている。

$f_T$  の変化は少ししかないと思われるかもしれないが、10% や 15% の差はものすごく大きい。寄生抵抗等を入れていないので非常に高い遮断周波数になっているが、微細化したトランジスタで 3THz の遮断周波数を要求するとする。そのときに下の酸化膜厚が 145nm というものを使うと、遮断周波数は  $g_m$  に比例するので、温度が高くなって移動度が悪くなった分、ドレイン電圧を高くして遮断周波数を上げてやる必要がある。ところが、下の膜厚が薄くなると温度が下がるので移動度が高くなり、その結果として同じ性能を達成しようと思ったときのドレイン電圧を下げてやることができる。ドレイン電圧を下げる効果はエネルギーの削減に効き、我々の試算によると、145nm の BOX（プレーステーショ

ン2に使われた標準的な膜厚) に比べて 10nmBOX を使うと、パワーは3分の1にまで減らすことができる。熱に配慮したこのような設計をすることで、消費電力は3分の1にまで減らすことができる。このように、先の世代では熱配慮設計が大事だということである。

チャンネル長が短くなると電子は非常に短い距離を電界で加速されてエネルギーを得る。チャンネルの中では電位降下はあるが、電子-フォノン散乱を起こすだけの十分な時間が無いため、チャンネル中でエネルギーを失うことはできない。そのため、ドレインに多数ある電子と電子・電子散乱でエネルギーを失い、その後格子にエネルギーが移される。このようなナノ構造での非平衡キャリア輸送は、原子レベルでこういった現象を理解をしなくてはならない。

ナノ構造の閉じ込め方向での電子・フォノン散乱も、微細効果・界面効果で変わるのではないかという問題意識を持っている。実験的に、ナノ構造の表面・界面近傍での電子-フォノン散乱を調べてみる。SiO<sub>2</sub> とシリコンの界面では電子-フォノン散乱が非常に起きやすいということがわかってきた。界面の比率が高いナノ構造シリコンでは電子-フォノン散乱、すなわち電子から格子へのエネルギー変換が、バルク・シリコンとは著しく異なることが予測される。つまり、このようにナノ構造での物理現象を、しっかり理解することが大切である。

私自身はこのように LSI の発熱について研究してきたが、ナノ構造のデバイスというのはほんの少しのエネルギーを投入するだけで温度が急激に上がることがわかった。その問題で苦しんでいるが、逆にそれを使えないかと考え、センサへの応用を提案して、櫻井先生の領域の CREST をやっている。

さらにナノの熱を利用してメモリを作るということをグラフェンでもやっている。2mW ぐらい投入することで、酸化膜が融けてしまうぐらい温度が高くなる。そうすることで、ただの配線だったグラフェンが抵抗としての機能を発現することも示している。

我々はナノデバイスでは熱特性の理解が非常に必要であり、ナノデバイスの発熱を抑制することでデバイスの特性を改善することができるということを示してきた。また、ナノ領域での自己加熱というのは非常に低いエネルギーで高温にすることを実現できるので、低エネルギーセンサやメモリといったさまざまな新規なアプリケーションを創出する可能性がある。ナノ熱輸送特性の理解はまだ不十分なので、実験データも決定的に不足している。今後の進展を期待したい。

実際に我々がいろいろやる上で、データベースとしてバルクのシリコンでドーピングしたらどうなるかというデータはあるが、ナノ構造のシリコンでドーピングしたらどうなるかというようなものは無いので、このようなさまざまなデータを知りたい。また、電子・フォノン相互作用、電子のエネルギーから格子のエネルギーにどう変換されていくかということを知ることも本当に必要である。

#### 【質疑応答】

Q：ドレインで発熱して、チャンネルではしないと言われたが、直接的な実験データはあるか。

- A：直接的なデータはない。我々の実験では、ゲート電極を温度センサとして活用するので、ゲートとチャンネル辺りの平均的な温度を見ている。本当はセンサをうまく配置したりしたいと思っているが、まだできていない。
- Q：最後にメモリ応用について説明してほしい。
- A：グラフェンのメモリ応用を簡単に説明する。真空中で作製したグラフェンに電圧を加え、電圧をどんどん上げていくと、ある所でこのグラフェンが破断する。ただし、適切なバイアスを印加すると導電性が回復する。もう一度、電圧をより高い所までかけてやると、また切れてしまって抵抗が高い状態になる。パルス測定で100回繰り返して特性を計っても同じようになり、メモリ特性が得られている。
- Q：グラフェンが切れて、物理的には何が起きているのか。
- A：物理的に何が起きているかは調査中である。ただ、切れたところをAFMで見ると、穴が開いている。その穴をさらにTEMで見ると、酸化膜が融けてしまっているのがわかる。さらに元素分析すると、カーボンが結構あり、その結合状態を調べると、 $\sigma$ 結合が少し増えていた。なぜこの辺りで変換が起こったかは分からない。興味深いのは、元の抵抗状態の半分ぐらいの値まで復活する。本当に何が起きているのか、不思議である。
- Q：シミュレーションでは、厚さを変えても同じ移動度の値を使っていたように思えたが、移動度の厚さ依存性も入れているのか。
- A：実際には、シリコンの場合は15nmぐらいを切ると、電子の移動度は少し悪くなるが、我々は膜厚依存性は入れていなかったと思う。本当は波動関数を計算して、散乱も評価してやらなくてはいけないと思うが、今の温度と電子の両方だけでも収束させるのがかなり難しいので、これ以上は難しい状況にある。少なくとも実験結果にはある程度の広範で合わせる事ができているので、取りあえずはこれで良いと思っている。
- Q：フォノン側はどういうことになっているのか。
- A：フォノンバルクフォノンを仮定している。LSIの業界では電子輸送を計算するとき、バルクフォノンを仮定するということがかなり広く行われている。しかし、それだと実験と計算はきちんとは合わない。このため、フォノンも本当はナノ構造フォノンということを入れないと駄目だという認識は強い。その例として、Si/SiO<sub>2</sub>界面さえも少しフォノンのことをきちんと考慮しないとイケないということを示そうと思った。本当はフォノンの計算を専門にしている人と共同研究をやりたいところである。

## 5.2 熱電変換材料設計

森 孝雄（物質・材料研究機構）

「熱電変換材料設計」について、基礎的な話も交えて述べたい。我々が使用する一次エネルギー（化石燃料などのエネルギー）の3分の1しか有効に使えておらず、3分の2が何らかの形で損失している。そのうちの、おそらく半分ぐらいが排熱だろうと言われている。そこで、実際広範囲な熱管理技術によってこのロスを減少させること、あるいはこれから主に話す熱電変換技術によって熱エネルギーを直接電気エネルギーに変えることがやはり今後重要になってくる。

廃熱エネルギーが我々の周りにたくさんあふれていて、多数の応用が考えられるが、実際は広範囲には熱電変換デバイスというのはまだ実用化していない。その一番の理由として、材料の性能が足りないということが挙げられる。熱電材料の性能を表すのがいわゆる性能指数  $Z (= S^2 \sigma / \kappa)$  である。ここで、ゼーベック係数  $S$  というのはゼーベック効果（物質の両端に温度差をつけたときにキャリアが拡散するために電圧が発生する現象）の係数である。単純に性能を上げる難しさとしては、半導体で言うと、ゼーベック係数  $S$  と電気伝導度  $\sigma$  がトレードオフ関係にあって、例えばキャリア濃度を増やしていくと電気伝導度  $\sigma$  は増すが、ゼーベック係数  $S$  は小さくなってしまふ。また、絶縁体ではゼーベック係数  $S$  は非常に大きいけれども、電気伝導度  $\sigma$  が小さく電気が流れない。もう1つは、温度差をつけるためには、電気を流して熱を流さないという、パラドックス的なことも要求される。そういう意味では、なかなか単純に性能を上げていくのは難しかった。プロジェクトも垂直連携になっていて、材料の高性能が上がっていかないと、システム性能が上がらずプロジェクトがなかなか進まない。それに、非常に早い時期に他国より早く国家的プロジェクトなどもあったが、少し時期が早く、性能の高い材料がまだ十分ではなかった。

現在、こうした熱電材料に関して、躍進の機が熟しているのではないかと考えられる。それはナノテクを使った熱電材料設計で、その一部を紹介したいと思う。それに、材料科学がかなり進展したために、今まで無理だった熱電材料設計がかなり現実的になり、世界的に非常に競争が激化している。主として他国だが、大型のプロジェクトが走っていて、いち早く先に実用化をつかみたいという動きが活発化している。我々は、先日発表された発光ダイオード（LED）に関するノーベル物理学賞の受賞報告に、熱電材料分野として勇気もらった。なぜならば、固体素子であるLEDも当初は性能が低くコストも高いということであまり普及していなかったが、性能のブレークスルーで飛躍的に発展を遂げたからである。したがって、LEDのように、固体素子である熱電材料（熱を直接電気に変換する固体素子）も性能のブレークスルーをすることで普及することができるのではないかと期待している。

熱電材料研究のアプローチとしては、私は両面作戦が必要だと思っている。1つは既存の高性能材料へのナノテク活用であり、もう1つは革新的なブレークスルーの探索である。したがって、既存の高性能材料へのナノテク活用による何割かの性能向上だけではなくて、

それを打ち破るような、超伝導で言えば高温超伝導発見のようなブレークスルーも同時に探索していく必要がある。例えば、複合効果、磁性半導体、そして、スピンゼーベック、量子力学的効果などが挙げられる。

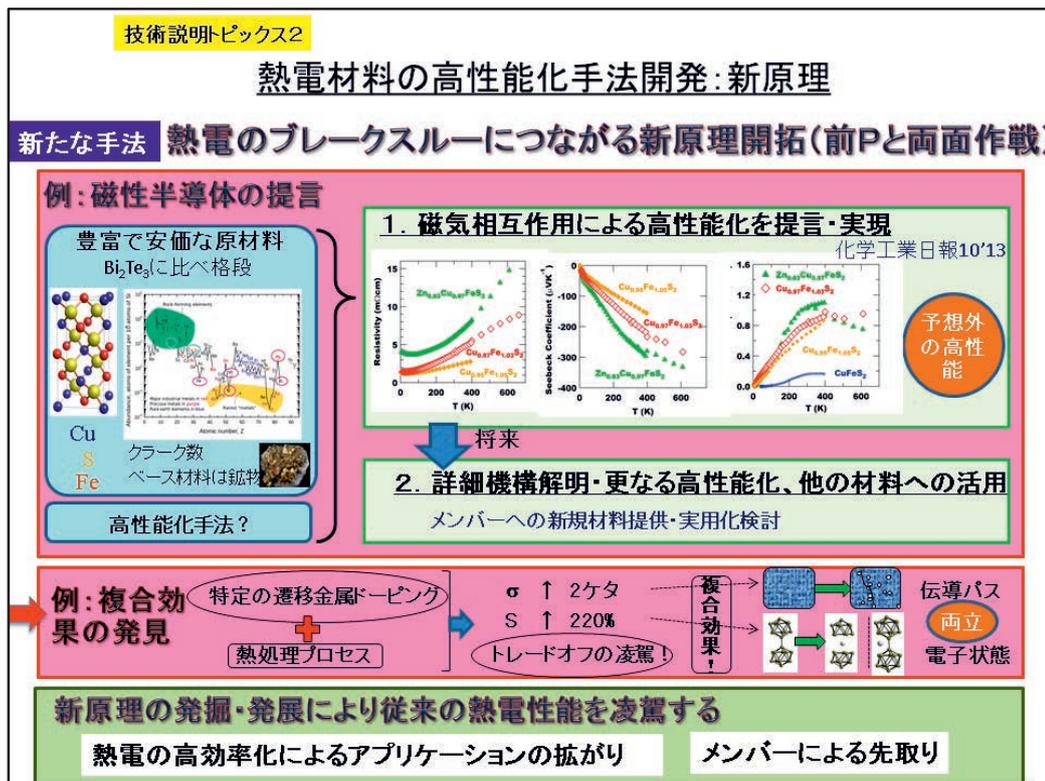


図 5-2-1

まず初めに、ナノテク活用とはどういうことか。それはナノ構造制御であり、塩見先生のプレナリートークで簡単に紹介された。性能指数  $Z (= S^2 \sigma / \kappa)$  の分母の所で、熱伝導度  $\kappa$  (キャリアの寄与  $\kappa_e$  + 格子の寄与  $\kappa_{lat}$ ) を小さくすれば性能は向上するわけだが、熱電変換にはキャリアの流れである電気も必要なので、熱伝導度  $\kappa$  のキャリアの寄与部分  $\kappa_e$  はいかんともしがたく、性能向上には、ナノ構造制御により電気伝導を殺さずに格子熱伝導度  $\kappa_{lat}$  をうまく下げなければならない。企業的な見地からは、ナノ構造制御の良い点として何か変わったとっぴな材料を研究するのではなくて、既存の高性能材料をナノ構造制御することで性能をもっと上げられるというメリットがある。

ナノ構造制御のバックグラウンドとしては、河本先生 (名大) と一緒に最近編集した “Thermoelectric Nanomaterials” (Springer, 2013) の中で、Gang Chen (MIT) が次のように導出している。界面熱抵抗  $R_k$  を大きくし、焼結体の結晶粒  $d$  を小さくすれば、格子熱伝導度  $\kappa_{lat}$  は小さくなる。ただし、我々は熱電材料に関しては電気が必要なので、ただ熱伝導度を小さくすればいいかというのではなくて、やはり何かの方法で熱伝導度制御をうまくやらなければいけない。そのために利用するコンセプトとして、これもやはり MIT の Mildred Dresselhaus や Gang Chen、Zhifeng Ren あるいは Mercuri Kanatzidis たちが一番最初に明確に証明した概念がある。それは、「キャリアの平均自由

行程と熱を伝えるフォノンの平均自由行程が長さの違いを利用して、フォノンだけが非常に散乱するナノ構造を導入することで電気を比較的損なわず、フォノンを非常に効果的に散乱することができる」というコンセプトである。現在では、このコンセプトは世界中の熱電研究者は知っているのですが、どうやって妥当なナノ構造を入れるかというのが勝負になっている。それぞれの材料でかなりフォノンのスケールが違うので、各材料でテーラーメイド的にナノ構造を工夫していかなければいけない。

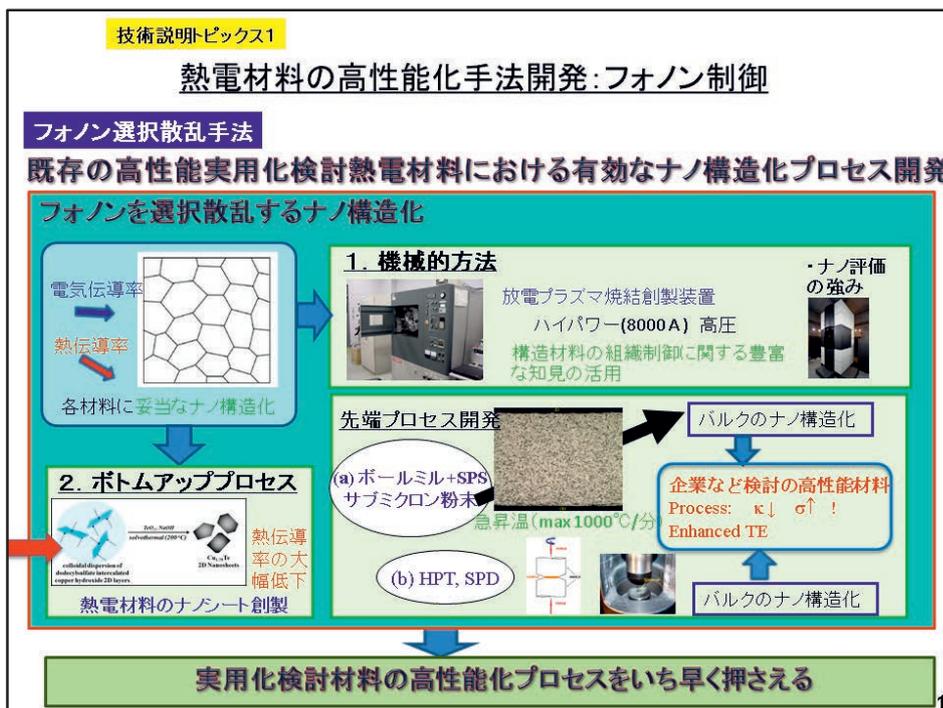


図 5-2-2

ナノ構造を入れる方法は2つある。サブミクロンあるいはナノ粉末は、ボールミルで機械的に作られるが、材料としては最終的には緻密にした固体を使わなければいけないので、ナノ構造をなくさないために、放電プラズマ焼結 (Spark Plasma Sintering: SPS) を使って固体を緻密化している。SPSは非常に速く加熱焼結するので、あまり粒成長でナノ構造を損なわずに緻密化できる方法として非常に強力な方法である。その方法を使った1つの成功例としては、我々と企業との共同研究の成果がある。企業が検討していた材料にナノ構造を導入して、実際パワーファクター ( $S^2\sigma$ :ゼーベック係数  $S$  の2乗×電気伝導度  $\sigma$ ) をあまり変化させないで、熱伝導度を30%低下させることで、単純に3割性能を向上させることができた事例である。SPS加工以外には、高圧ねじり (High Pressure Torsion: HPT) 加工という方法がある。HPT加工とは、非常に高圧でプレスして、ねじって、ナノ構造を入れる方法であり、比較的性能を上げることができた事例もあるが、電気伝導をかなり殺してしまうケースもあり、難しい。

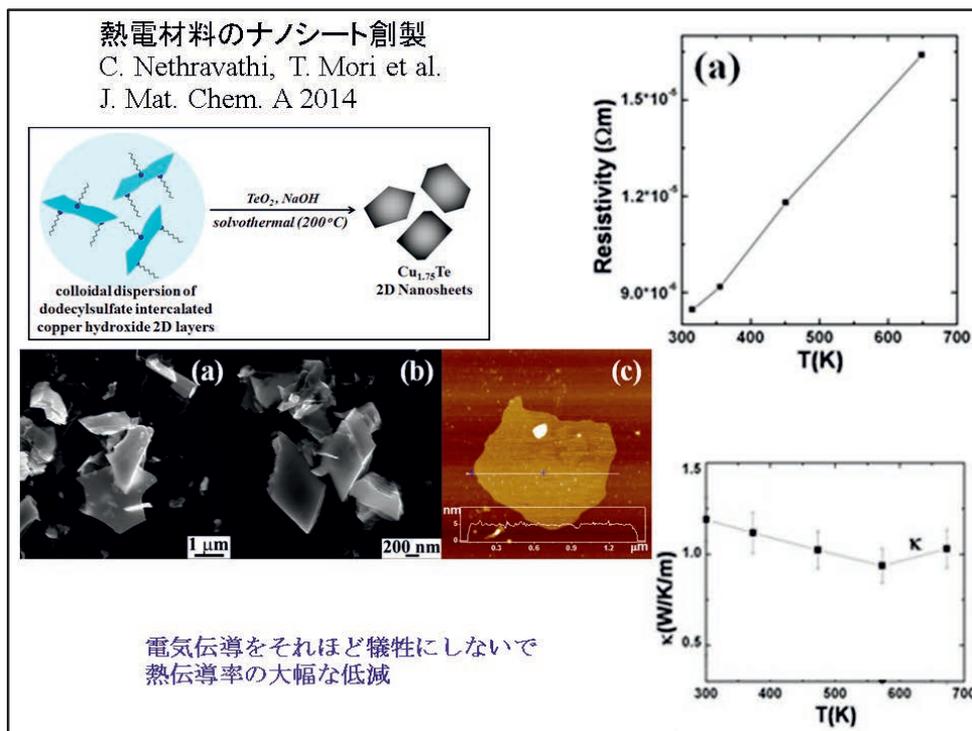


図 5-2-3

もう一方のナノ構造を入れる方法として、機械的粉碎や、ねじってひびを入れたりする方法ではなくて、ウェットなボトムアップ・プロセスでナノシートを作る方法がある。これは銅テルル化合物で行った研究だが、電気伝導はそれほど殺すことなく、金属間化合物として  $1 \text{ W/mK}$  というかなり小さい熱伝導率を有する  $5 \text{ nm}$  のナノシートを作ることができた。論文のレフェリーには「銅テルル化合物ではなくてビスマステルル化合物というもっと有名な材料でやれ」と指摘された。しかしながら、実のところ作製プロセスがより簡単な物質の方を先にやった訳であり、このようなウェットなボトムアップ・プロセスは科学的にも価格的にも容易にできる今後有効な方法ではないかと考えている。以上が、ナノ構造制御に関する話しである。

それに対して、複合効果を使った高性能化への期待もある。先ほど熱電パラメーターにはトレードオフの関係があると述べたが、電気伝導度  $\sigma$  をかなり上げながら同時にゼーベック係数  $S$  を大きくする複合効果を見出した。その複合効果発現理由として、ドーピングをすることで実際にドーパントが結晶格子に入り、ゼーベック係数  $S$  を上げる（より絶縁体的にさせる）とともに、同時にナノレベルの電気伝導パスができていないかと我々は考えている。この複合効果がいろいろな材料に使えるのではないかと考えており、一種の電気と熱の分離が可能できると期待している。また、ナノ構造に関する有名な原理としては、MIT の Lyndon Hicks と Mildred Dresselhaus が "Effect of quantum-well structures on the thermoelectric figure of merit" と題する論文 Phys. Rev. B 47, 12727 (1993) で提唱している。ゼーベック係数  $S$  の値はフェルミ面での電子状態密度の微係数に比例することから、三次元物質に比べて、低次元化したナノ薄膜やナノ超格子構造において非常に状態密度がシャープになる（ゼーベック係数  $S$  が大きくなる）ことで、

熱電性能を大きくすることができるという提案であった。

技術説明トピックス3

### 高品質熱電薄膜・超格子の創製 原理の検証・理論解析の高度化

超高真空中の薄膜作製：分子線エピタキシー (MBE) 法

米国Hi-Z社  
海軍研究所  
ZT~3 @RT ボロンカーバイド超格子

検証



高温MBE

超高温セルmax2400℃  
基盤加熱 少なくとも1800℃

超格子薄膜の作製

- 熱起電力の増大効果
- 界面の熱伝導機構の解明と制御



図 5-2-4

我々は様々な可能性を実験的に検証していきたいと考えている。Hi-Z社とアメリカの海軍研究所が発表したのが、室温で  $ZT = 3$  ぐらいのボロンカーバイド超格子というのがあった。実際この研究には軍関係も入っているのだから、その後どうなったか、あまり公にされていないが、あまりにも検証するのが難しいのでまだ真偽は分かっていない。多くの人は嘘だろうと思っているが、 $ZT$  が室温で 3 であり、温度差をつければ変換効率も 20% という非常に高い値を示すので、非常に興味を持っている。そこで、我々は高温の分子線エピタキシー (Molecular Beam Epitaxy: MBE) 法により、超高温セルで高品質のボロン系超格子を作製することを試みている。

熱電材料においてもナノ材料、ナノスケールレベルの物性が鍵になっており、ナノ構造あるいは複合したナノ構造、あるいはナノ薄膜、ナノ超格子を解析する理論や先端評価が重要になってきた。我々も理論家の方と協力して、ナノスケールレベルでの熱物性解析というモデリングを試みている。我々実験グループは、理論の鍵となるモデル物質を注意深く作製して評価し、理論にフィードバックすることで、その理論を高度化するための試みを行っている。実際、計算も進めており、モデル物質の評価も進み、結果が出始めている。

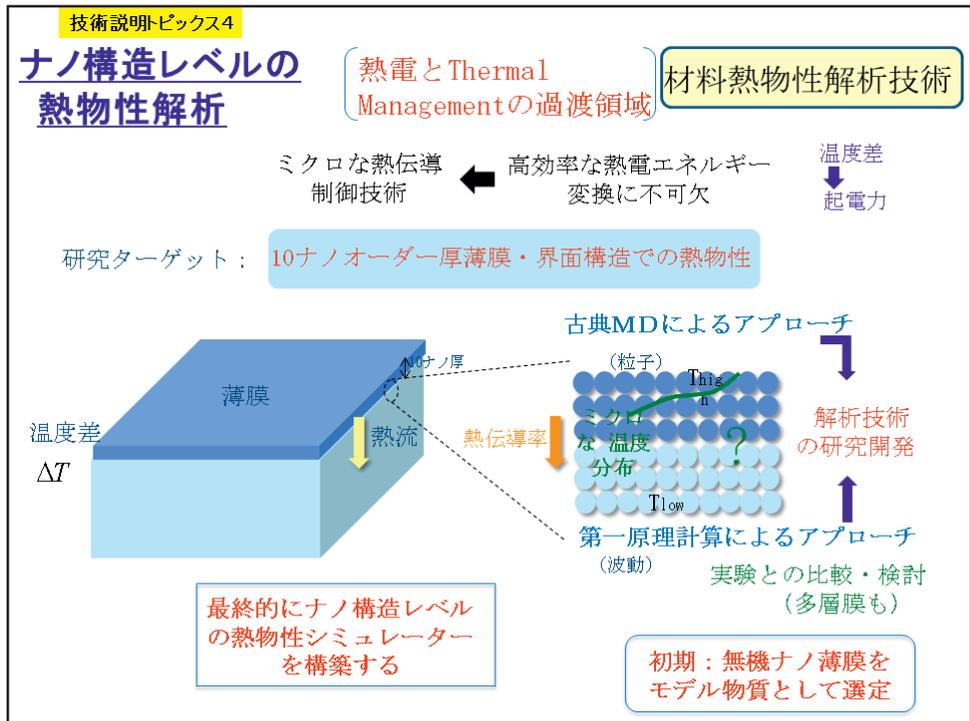


図 5-2-5

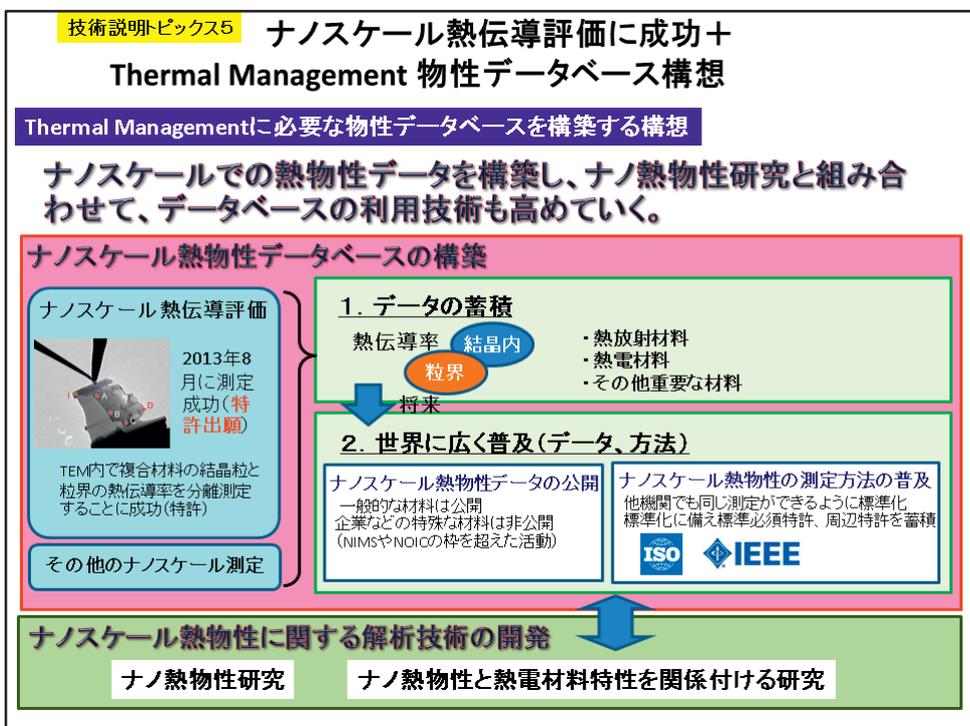


図 5-2-6

ナノスケールの先端評価に関して、熱電材料に限らず、所望のナノスケール領域の熱を正確に評価することが非常に重要になっている。現在、走査型サーマル顕微鏡（Scanning Thermal Microscope: SThM）が開発されているが、表面の熱接触抵抗が結構大きいという難点がある。ナノワイヤーの直接的な測定の情報もあるが、超微細加工技術で作ったものだけを熱評価するもので、所望のナノスケールの評価が非常に難しい。NIMSの電子顕微鏡のエキスパートが、電顕の中でナノスケールの熱を解析し、複合材料のサブマイクロレベルでの熱抵抗などを評価する方法を見つけ、研究開発が精力的に進められている。

高温材料に関しても、実はかなり熱電変換の用途がある。例えば、太陽エネルギーを電気エネルギーに直接変換する性能の高い材料ができれば20%以上の変換効率が達成可能である。あるいは、パワープラントにおいても、燃焼温度が高すぎて高温のタービンと燃焼温度との差を十分に使えていないので、熱電のトッピングサイクルを入れることでパワープラントの出力を上げることができる。しかしながら、なかなか良い性能の高温材料がまだない。そういう意味で、我々はエネルギー・ハーベスティングに加えて、高温の用途に応える材料としてホウ化物や窒化物などの研究を行っている。

最後に、カゴ状化合物に関してコメントする。カゴ状化合物には、ラトリングというカゴの中の希土類原子などがアインシュタイン振動子になっていて、熱伝導を下げながら電気を殺さない舞台ができています。それとは別に、カゴ自体の制御とナノ構造を組み合わせることで、希土類などを使わないで同じぐらいの高性能を出せるという実験結果も最近得ている。そういう意味でも、非常に多彩なフォノン制御が熱電変換技術に貢献すると考えている。

#### 【質疑応答】

- Q：膨大な排熱量を考えると、200°C以下ぐらいの中低温が実際の7割ぐらいと言われていた。そのような中低温領域では、先ほど述べられたナノ構造とか複合効果や新原理を使って、性能としてはどの程度まで上げることが可能なのか。計算ではいろいろ言われているが、実際問題としての数字としてどの程度まで性能を上げられると考えているか。
- A：確かに比較的低温では薄膜などを使うので、温度差はそれほど大きくないが、薄膜とか超格子に関しては実際実験では無次元性能指数（性能指数  $Z \times$  温度  $T$ ） $ZT$  が2.4というかなり高い数字が出ている。先ほど紹介したボロンカーバイドの超格子などは150°C～200°Cぐらいで $ZT = 4$ という値の報告もあり、理論的にに関してはナノ構造閉じ込めなどを使えば高い $ZT$ 値が出るというのは決しておかしくはない。また、今回のスライドには示さなかったが、トポロジカル絶縁体などを使って表面状態をもう少し利用できるような工夫すれば、非常に桁の違う $ZT$ 値が出るということを提唱している研究報告もある。そういう意味では、薄膜とかナノのレベルではかなり高性能化する余地はあるとは個人的には思っている。また、中高温領域の材料、高温領域の材料に関しても、ナノ構造が死ななければ結局バルクで高性能化したものを使うので、そういう意味ではナノ構造とかナノ効果というのが非常に強力だと考えている。

Q：周りの排熱を考えると（もちろん高温は高温で有効利用していかなければならないが）、実は100℃以下の廃熱はほとんど捨てられており、これを何とか利用したいという思いはある。100℃以下ぐらいで有効に性能が出る材料は実はあまりない。100℃ぐらいだとビスマステルル化合物ないしはその系統の材料が一般的に知られているが、やはり広く熱電材料を普及させていくということを考えると、企業サイドから言えば、毒性のあるものは使いたくない。よって、テルルとか鉛とかアンチモン等を除いた無機材料には性能が良いものが現実にはないことを考えると、逆に有機材料の方がポテンシャルを持っているのではないのかと思う。もちろん有機材料なので300℃ぐらいの高温になると、耐久性の問題でいろいろな問題を起こすが、逆に100℃近辺ぐらいであればいろいろな加工性も含めて考えると、有機材料の方が使いやすいという見方もあると感じている。したがって、有機材料もそうだが、無機材料でナノ構造を利用しながら、どれだけその温度領域での性能が上げられるかということについて今後検討していく余地が大きいと考えている。

A：熱電材料分野の良い点として、かなり排他的でない分野だと私は思っている。熱は多彩に存在し、温度域も多彩にあるので、例えば半導体でのシリコンのようなオールマイティ的な材料で全部用を足すというのはあり得ないと思う。そういう意味では、例えば非常に安くフレキシブルな熱電材料を作るには有機材料を使うとか、熱耐久性が必要な場合には熱耐久性の高い無機材料を使うとか、用途によっていろいろな可能性はあると思う。

ビスマステルル化合物は室温のチャンピオンとして何十年か君臨しているが、テルルは非常に希少で、ビスマスもかなり重金属であり望ましくない元素なので、元素戦略の観点から代替物質を探索する動きがある。我々は、最近カルコパイライト系にキャリアドープしたものがパワーファクター（ $S^2\sigma$ ：ゼーベック係数 $S$ の2乗×電気伝導度 $\sigma$ ）で1 W/mKを超えることを見出し、ビスマステルル化合物に比べてまだ少し性能が低いけれども、このような系における磁気相互作用による高性能化が可能なのではないかと期待している。その他の動きとしては、スピンゼーベック効果を使った比較的毒性のない元素からなる高性能熱電材料が設計できるのではないかとこの動きもある。

Q：実際のところ、おのこの用途ごとにどこが本当の目標なのかがはっきりしない。ビスマステルルが室温のチャンピオン物質だが、実際広くは使われていない。それではまだまだ性能が足りなくて、どこまで行ったら例えば500℃領域が使えるとか、200℃だったらどんな物質が要るとか、そのようなことが明確ではない。先程、ナノ構造で2～3割上がったと言ったが、それがどれぐらいのものなのかということがよく分からない。結局、いろいろな発表では常に「前より性能が良くなった」と言うが、前より良くなったけれども、実用化の頂上に向けてどの程度の位置にいるのかがよく分からないので、その辺がもう少しクリアになると良いと思う。もちろん前より良くなったら論文を書けるという観点ではいいことだが、世界中の熱電材料研究によく見られるように、言う割に全然駄目ではないかと思っている。

A：非常に厳しい指摘である。ただ、昔はZTが1を確実に出せたら使えと言われてたが、今はそれをかなり超える材料が数多く見出されるようになってきた。我々研究者側の気持ちとしては、実用化に向けて企業側も積極的にこの流れに乗って欲しいと考えて

いる。

Q：ZTが1を超えても、なぜ使われないかというのは、明確な理由があるか。

A：実際は自動車会社の要求は非常に高い。ただ、自動車会社ではなくて、他のいろいろな会社でかなり精力的に熱電研究に携わっている研究者は、かなり現実的なところに近づいている（必要な性能に近づいている）と感じていると思う。ZTにおいて、1が1.6になったとか、そういうレベルでかなり実用化に近づいていると思っている会社が増えてきた。

Q：結局、排熱の問題を考えるには、ボリュームがものすごい大きな話をしなければいけない。だから、それに対して材料としても、細かいナノ構造とか小さなサイズにおけるZTの値を言うだけではなくて、もっと大きなところでどう展開できるかということが大事である。

A：プロセッシングや原料の豊富さ等、指摘のとおりである。

### 5.3 スピンゼーベック効果と熱電変換

内田 健一（東北大学）

スピンゼーベック効果と呼ばれる新しい現象とそれを用いた熱電変換技術の可能性について、以下の内容で紹介する。

- (1) 本研究のバックグラウンドとして、スピントロニクス分野と、その主役のスピン流と呼ばれる概念
- (2) スピンゼーベック効果（普通の熱電効果との比較）
- (3) スピンゼーベック効果の観測実験例と、絶縁体を用いた熱電変換
- (4) この現象を用いた熱電変換のメリットや特徴、将来への展望
- (5) フォノンクスとスピントロニクスとの融合の提案

スピントロニクス分野は電子が有する電荷の自由度に加えて、磁気の源であるスピン角運動量の自由度も積極的に利用することで、電荷のみを用いていたこれまでのエレクトロニクスでは得られなかった新しい機能や特性を創出することを目的としている。エレクトロニクスが電子の電荷の流れである電流によって機能しているのに対し、スピントロニクス機能の多くは電子スピン角運動量の流れであるスピン流というものによって駆動される。

スピン流を用いれば、例えば磁場を介さずに磁化の制御が可能になるため、これに基づく情報の書き込み・読み出し技術が盛んに研究されており、その機能の一部は MRAM などとして不揮発メモリの駆動源として既に実用化段階まで来ている。また原理的にはスピン流を用いることで低損失な量子情報伝送なども可能になると期待されていることから、世界中でスピン流物性の開拓が行われている。

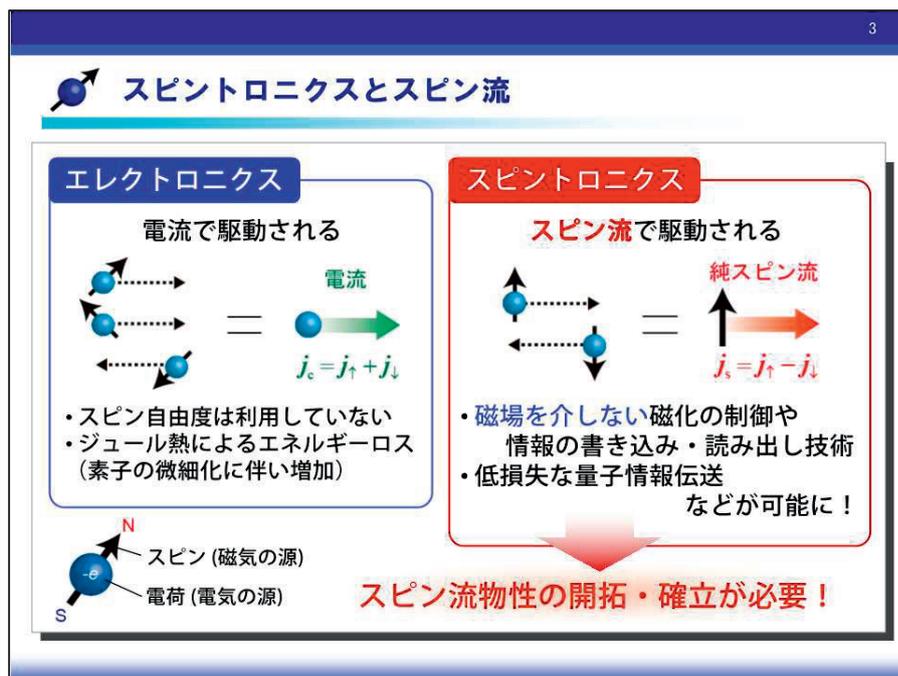


図 5-3-1

図 5-3-1 に、電流と、伝導電子によって運ばれるスピンのモード図を示す。まず、電流とは左図のように電子がある方向にだけ進みやすい傾向がある際に流れる正味の電荷の流れである。通常物質中において電子スピンの方向はランダムなので、全体ではスピンは打ち消し合い、単純に電荷のみが流れている状態となる。一方で、上向きスピンの電子と下向きスピンの電子が異なる量流れていると、正味のスピン角運動量、すなわち、磁気の流れが生じる。これがスピン流の一番基本的な形である。特に重要なのは右図のように上向きスピン電子と下向きスピン電子が逆向きに同じ量だけ運動している状況で、この場合には正味の電荷の流れがキャンセルされ、電流を伴わない純粋なスピンもしくは磁気モーメントの流れによって、さまざまなスピントロニクス機能が駆動される。

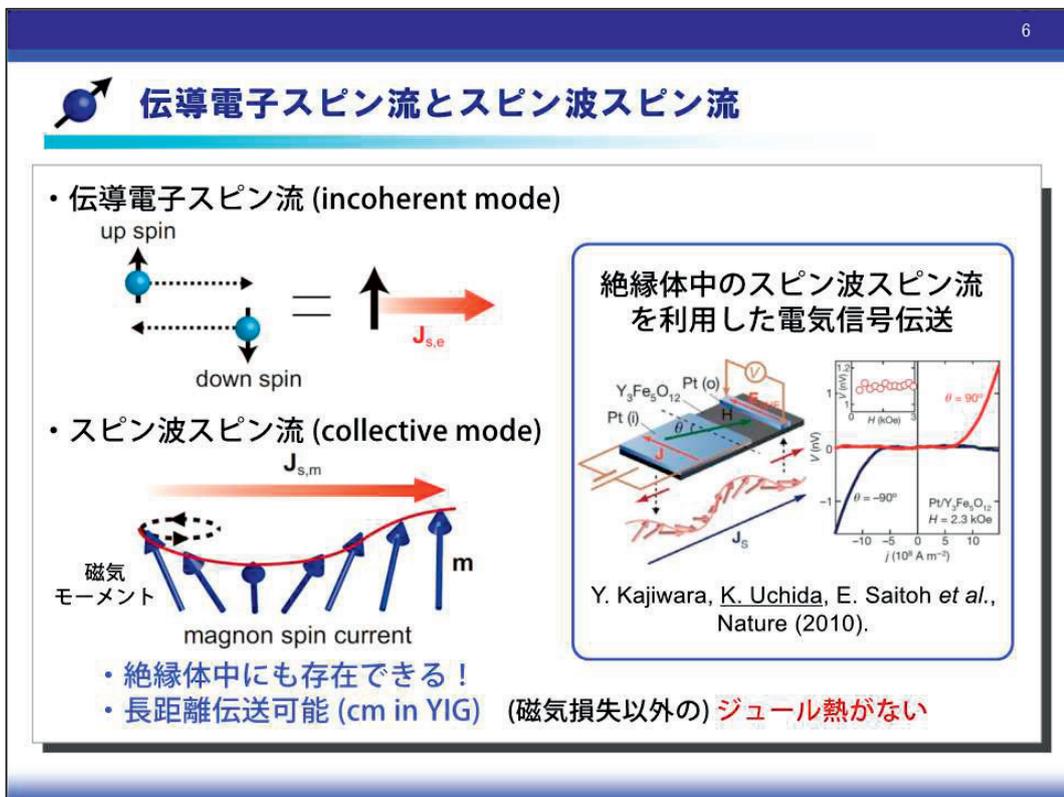


図 5-3-2

スピン流にはさまざまなタイプがあり、今紹介した伝導電子が運ぶスピン流に加えて、スピン波と呼ばれる局在スピンの集団運動によって運ばれるスピン流も存在する。スピン波とは、図 5-3-2 のようにある波長を持って波のように集団運動をしている磁気モーメントの集団のことであり、まさに本ワークショップの主題であるフォノンが格子振動や音波の量子であるのに対応しており、このようなスピンの波はマグノンとも呼ばれている。このようなスピンの集団運動は、マグノンが一方向に伝播しているということと等価で、これも正味のスピン角運動量が予想されるので、スピン流として機能する。スピン波スピン流が有する大きな特徴は、金属や半導体のみならず絶縁体中にも存在できるという点であり、基本的にはジュール発熱もない。2010年に私たちの研究グループでは絶縁体中のスピン波スピン流を介した電気信号伝送が原理的に可能であることを報告している。

もともと導体、絶縁体という区切りは、電荷の流れである電流に対して定義されたもの

で、それは必ずしもスピンの流には当てはまらない。つまり、電流にとっては絶縁体であるが、スピン流にとっては導体であるという物質が存在し、本研究においてはこのカテゴリーの物質群が主役を担っている。

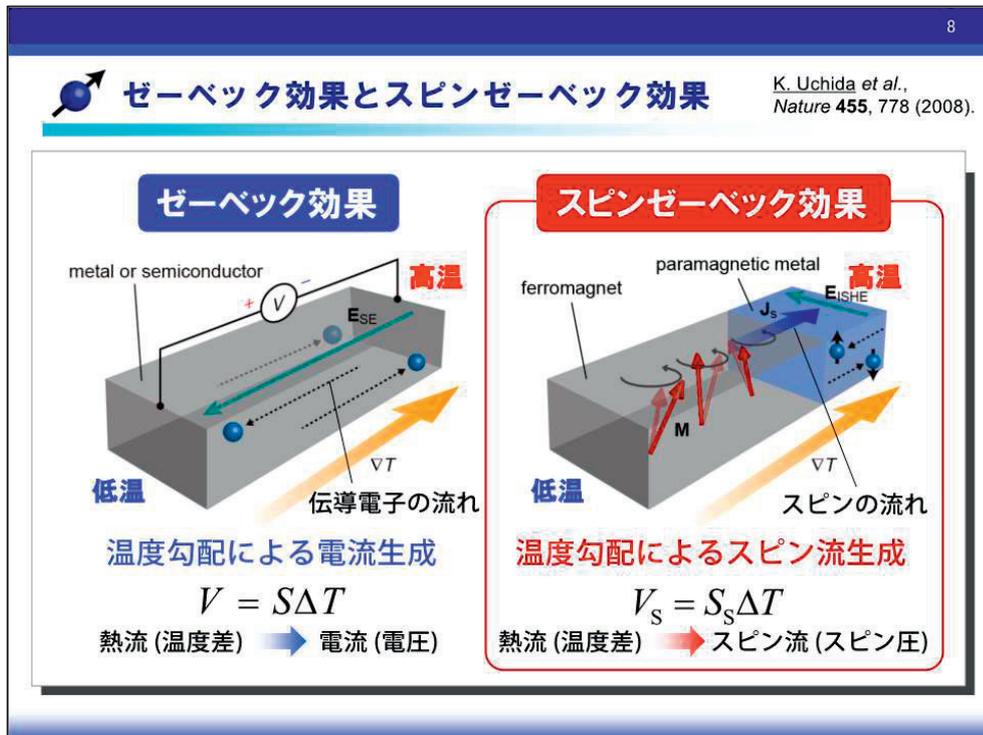


図 5-3-3

では、スピン流はどのように生成できるのだろうか。スピントロニクス分野では例えばマイクロ波や光を利用したスピン流生成現象が盛んに研究されているが、スピン流は熱でも生成できる。それがスピンゼーベック効果と私たちが名付けた現象になる。一般に熱から電流を生成する現象はゼーベック効果と呼ばれている。この現象は図 5-3-3 左図に示すように温度差をつけた金属や半導体中に、熱流に沿った方向に電圧が発生するというものであり、小型の発電・冷却モジュールや温度計などとして実用化されている。一方で、スピンゼーベック効果は、右図のように、磁性体に温度勾配をつけることでスピン流が発生する現象と定義することができ、温度差に比例したスピン流を生成することができる。これは 2008 年に私たちのグループが発見した現象である。

ゼーベック効果とスピンゼーベック効果が決定的に異なる点は、スピンゼーベック効果は金属・半導体のみならず、磁性を持った絶縁体においても生じるという点だ。通常のゼーベック効果は熱流によって駆動された伝導電子やホール運動がその駆動源となっているので、絶縁体中では全く存在しないが、スピンゼーベック効果は絶縁体中にも存在できる。スピンの局在磁気モーメントの集団運動、すなわち、先ほどご紹介したスピン波が駆動源になっているということがこの結果によって明らかになった。これは 2010 年に論文発表したものである。この報告以降、実験、理論ともにスピンゼーベック効果の研究や理論的理解が急激に進み、現在では磁性絶縁体がスピンゼーベック効果の研究の主役となっている。

近年、世界中で盛んにスピン流に関する研究が行われているが、その大部分は情報伝送やメモリ応用を意図したものになっている。一方で、私たちはスピンゼーベック効果を利用することでスピン流を熱電変換技術に応用できるのではないかと試みを進めている。

スピンゼーベック効果を熱電変換技術に利用するためには、生成されたスピン流を電流に変換する必要がある。スピン流と電流は、物質中のスピン軌道相互作用に基づく逆スピンホール効果と呼ばれる現象を利用することによって、相互に自在に変換することができるので、この現象と先ほどの絶縁体中のスピンゼーベック効果を組み合わせることで、絶縁体ベースの熱電変換が可能になる。

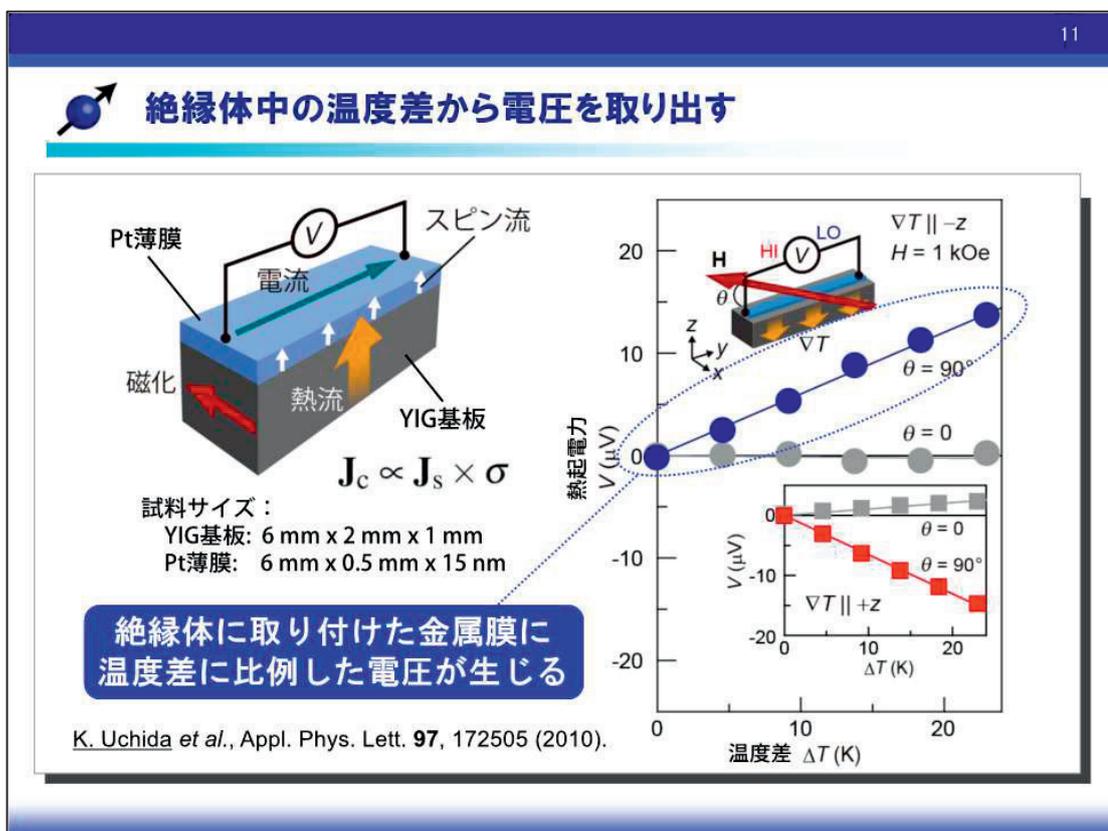


図 5-3-4

図 5-3-4 は YIG と呼ばれる磁性絶縁体と白金の薄膜の接合系を用いて最初に報告した「絶縁体におけるスピンゼーベック効果の観測実験」の一例である。デバイスはこのように簡単な磁性絶縁体と金属の 2 層構造になっており、接合界面の法線方向に温度勾配をつける。この系において温度差は絶縁体層のみについていれば良く、この電極層は常磁性体であるにもかかわらず、この両端にスピンの方向に依存した熱起電力が観測された。

これまで私たちはさまざまな対照実験を報告しており、ここで観測された信号が純粋にスピン流に由来するものであることを確かめてある。つまり、絶縁体中を流れる熱から、それに取り付けた電極によって起電力を取り出すことに成功したと言える。なお、白金を使うのはコスト的にはもちろん不利であるが、最近貴金属を利用しなくても同等の

出力を出せるようになってきたので、この点は問題ないと考えている。スピンゼーベック効果を利用すれば、これまではできなかった絶縁体中の熱からもスピン流や電流を取り出しが可能になる。熱電変換技術としてスピンゼーベック効果を用いることのメリットは、高い設計自由度とシンプルなデバイス構造の2点である。

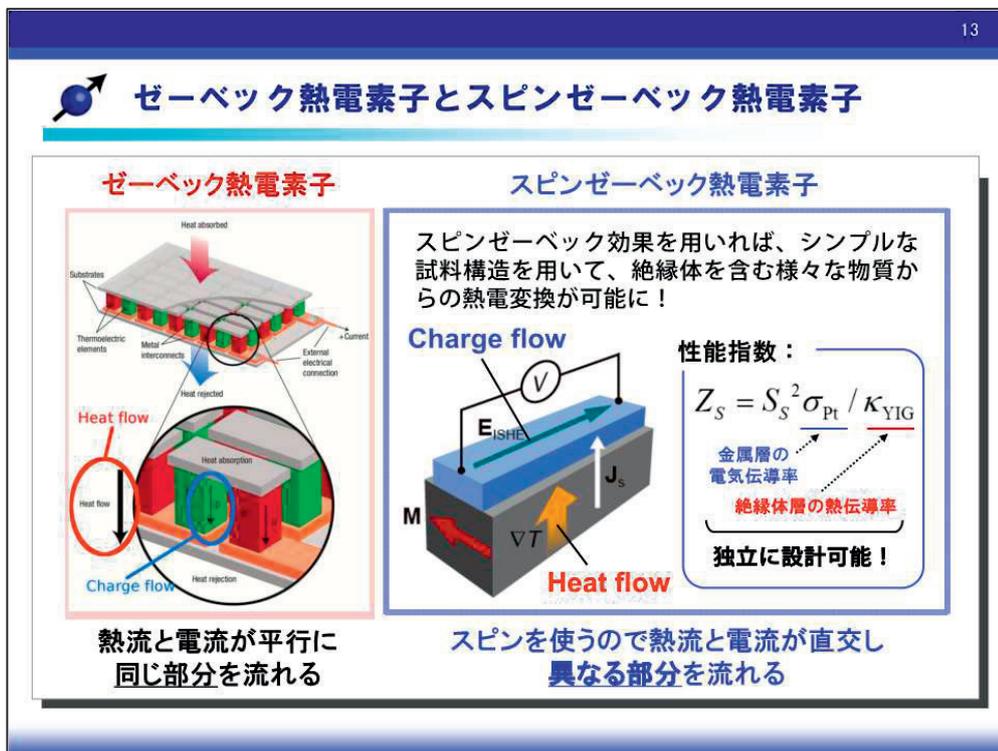


図 5-3-5

熱電素子の性能は性能指数と呼ばれるパラメータによって決定され、単位温度差あたりの熱起電力（熱電能）の2乗と電気伝導率に比例し、熱伝導率に反比例する。しかし、通常の熱電素子の性能指数における電気伝導率と熱伝導率は同じ物質中に対するパラメータであるため、これらは Wiedemann-Franz 則という法則も知られているように、基本的にトレードオフになってしまう。また、この全てのパラメータは基本的に物質固有のものであるため、こちらを独立に制御・改善するのは困難であった。

それに対し、スピンゼーベック素子では温度差は絶縁体層のみについていればよく、図 5-3-5 右図のように熱の流路と電圧発生の役割をそれぞれ絶縁体層と金属層の2つの物質に分離することが可能になった。この特徴により、同じ物質中の熱と電気の流れに関する制約である Wiedemann-Franz 則による制約を完全に回避することができ、素子設計の自由度が大幅に向上すると考えている。つまり、スピンゼーベック素子における性能指数は物質パラメータではなく、材料の組み合わせにより設計できる。例えば磁性体層に非常に遮熱性の高い絶縁材料、金属層に導電性の高い材料を用いて組み合わせることにより性能指数を稼ぐことができるというメリットがある。

また、もう1つ重要な特徴として、スピンゼーベック素子の出力は素子の面積に比例するという点が挙げられる。この特徴により従来の熱電素子のようにPN接合の直列接合

を多数集積したものを作製することなく、大面積素子を作製するだけで高出力化が行える。スピンゼーベック素子はシンプルな磁性体、金属の2層構造を単位構造としているので、高出力化のための大面積素子の作製も比較的容易である。例えば電子デバイスの基板や筐体などへの熱電素子の直接実装が容易になり、設置可能場所の大幅な拡張が期待できるのではないかと考えている。

このような特徴を生かした新原理の熱電変換技術の実現に向けて、2011年から NEC のスマートエネルギー研究所との共同研究を進めている。また、基礎研究段階ではあるが、簡便なコーティングプロセスを用いて高品質なスピンゼーベック素子を作製可能であることや、めっき法を用いることでガラス基板とかフレキシブルなポリイミドフィルムなどにもスピンゼーベック素子を実装可能であることなどを報告してきた。

以上のように、スピンゼーベック素子はシンプルな薄膜構造や大面積化、フレキシブル化といった良い特性を備えているものの、出力が低いという問題点がある。すでに通常の金属におけるゼーベック効果よりはスピンゼーベック効果の方が大きな出力を出せるという状況にはなっているが、それでも実用化に向けて検討されているような半導体材料、強相関材料におけるゼーベック効果には遠く及んでいないのが現状である。そこで大学や NEC と協力しながら、さまざま取り組みを進めている。スピンゼーベック効果の発見以降、熱電能は年々向上しており、今後もさらにこれを改善していきたいと思っている。

また、スピンゼーベック素子の性能を評価するための世界的な標準指標というのがないというのも問題であると考えており、理論家や海外の実験グループとの議論を進めている。なお、現在の実験は私たちの実験装置に入る非常に小さい素子を用いて測定したもので、熱起電力は $\mu\text{V}$  オーダーと非常に小さいが、先に述べたように出力は面積に比例するので、大面積な素子を作製すれば出力は向上する。実際、1インチ程度ではあるが、実験室レベルで作製可能な比較的大面積な素子に電極をパターンニングすることで、 $\text{mV}$  オーダー以上の熱起電力が生じることを確認している。

これまではスピンゼーベック効果とそれを用いた熱電変換技術に関する現状を紹介した。ここから、スピントロニクスとフォノンエンジニアリングがどのように関わってくるのか、簡単に提案する。スピンゼーベック効果は熱によって駆動されているものなので、常にフォノンを使っているわけで、その制御が非常に重要な課題となる。理論においてもフォノン伝播やマグノン・フォノン相互作用などをきちんと取り入れることが非常に重要になっている。その一方、スピン流物性を開拓するツールとして、熱の代わりに音波を使うという流れもあり、こちらに関してもごく簡単に紹介する。

18

## 🚀 スピントロニクスとフォノンエンジニアリングの融合

① フォノンによるスピン流・電流生成

- ・音波によるスピン流生成
- ・フォノンドラッグによる熱電能向上

② **フォノンによる熱制御技術をスピンゼーベック熱電素子に導入**

スピンゼーベック素子の性能指数：

$$Z_S = S_S^2 \sigma_{Pt} / \kappa_{YIG}$$

$\sigma_{Pt}$   
金属層の電気伝導率

$\kappa_{YIG}$   
絶縁体層の熱伝導率

**独立に設計可能！**

熱流と電流は別の物質中を直交して流れるので、異方性のある材料や人工ナノ構造との相性が良い

e.g. ナノ構造化、多層化、  
フォノンニック結晶

➡ フォノンエンジニアリングにより電気伝導性に全く影響を与えず、熱伝導率の低減化（＝性能指数向上）が可能に

図 5-3-6

スピントロニクスとフォノンエンジニアリングの融合という観点で、3つの提案をする。まず1つの観点として、フォノンを用いてスピン流や電流を生成するということが挙げられる。これは電流に対するフォノンドラッグ効果のスピン版に相当するもので、スピンゼーベック効果の温度依存性の検証によって発見されたものである。フォノンのライフタイムが増強する温度においてスピンゼーベック効果の出力が大幅に増えるという振る舞いが観測されている。これに関しては定量的な議論まではされていないので発展途上ではあるが、ゼーベック効果、スピンゼーベック効果ともにフォノンドラッグ効果によるアシストを利用して熱電能を向上するという指針も原理的には可能であると思っている。またフォノンドラッグの応用として、熱の代わりに音波を直接磁性体に注入しても、スピン流を生成できるということも確かめている。こちらも基礎原理を実証したという段階で、応用まではかなり厳しいとは思いますが、今後明らかにしていく物理がたくさん眠っていると考えている。

2つ目として、熱電分野で盛んに行われているように、ナノ構造化や多層化、フォノンニック結晶などを導入することによって、フォノンエンジニアリングで熱伝導率を低減し、熱電性能指数を向上するという戦略が挙げられる。このコンセプトはスピンゼーベック素子においても全く同様に当てはまる。さらにスピンゼーベック素子においては、熱流と電流が別の物質中を直交して流れているので、もともと電気伝導率と熱伝導率は独立に設計でき、電気伝導性に全く影響を与えずにこのような熱伝導率低減戦略を導入できるというメリットがある。

3つ目は、2つ目とも重なるが、各種キャリアや素励起の長さスケールの違いを利用す

ることによって、スピン流・電流・熱流または音波の伝播特性をそれぞれ独立に制御することも可能になると考えている。熱電分野では、フォノンと電子の平均自由行程の違いを利用して、電気伝導に影響を与えずに熱伝導を制御するという試みが盛んに行われているが、これにスピン流のキャリアの自由度も導入することで、さらに多彩な機能や物理の発現を期待している。

今回はフォノンクスをスピントロニクスに導入するという観点で提案をしたが、逆にフォノンクスにスピンの自由度を導入するという観点ももちろんある。積極的に異分野の融合をして、新たな機能や物理の開拓につながれば良いと考えている。

### 【質疑応答】

Q：白金を使わないでもという話があったが、何を使って、どのくらい出るのか。

A：ニッケルなどを使うと、それなりに同等のものが出る。基本的にスピン軌道相互作用で出るので、直感的には白金より良いはずはないが、強磁性体を電極で使うと、同じ対称性で生じる異常ネルンスト効果による熱起電力も重畳するため、スピンゼーベック効果とのハイブリッド発電で白金に追い付くという結果を得ている。物理的には分離する必要があるが、熱電応用という意味では両方使うのが良いと思う。

Q：絶縁体であれば基本的にいろいろな材料についても同じように考えて良いということによろしいか。

A：それはその通りであり、いざ現象が発見されてしまえば、今までスピンゼーベック効果が生じなかった磁性体が無いぐらい、何でも出る。しかし、キュリー温度を超えたら磁石でなくなってしまうので、もちろん信号は消えてしまう。

Q：2MHz程度の音波による実験は、メカニズムとしては熱による広いスペクトルを持ったフォノンから作り出すのと同じなのか。

A：基本的には同じだと考えている。微視的には交換相互作用をフォノンが変調して、マグノンの分布関数が変わるというのを利用している。

## 5.4 フォノンバンドエンジニアリング

野村 政宏（東京大学）

我々は、格子振動が本来持つ波動性に着目して、フォノンバンドエンジニアリングに関する研究を進めている。まず初めに、ナノフォノンクスに関する俯瞰的な話をして、そしてフォノンバンドエンジニアリングはどのような所に使えそうかということ、原理から展望まで我々の研究を交えて話す。最後に、フォノンをキーワードにした国際的な研究体制の整備状況と、それをドイツで実際に見た上で感じていることを述べる。

「フォノンクス (phononics)」を Google などで検索すると、検索エンジンが「フォトンクス (photonics)」の誤入力なのではないかと指摘するぐらい、すごい量の「フォトンクス」に関する情報量の陰に「フォノンクス」が隠れてしまっている状況である。しかしながら、近年その存在感が非常に増してきていると感じている。2013年には『Nature』で”Sound and heat revolutions in phononics”と題したレビューが載り、2014年にはNTTの山口氏のグループが世界で初めて「フォノン伝搬の電氣的制御」に先駆的に成功したことが『Nature Nanotechnology』で報告されている。そのような先駆的な成果により、日経産業新聞でもフォトン（光子）やエレクトロン（電子）と並べて、フォノンがどのような所に使われそうかという新聞記事が出るようになってきている。

このナノフォノンクスは、フォノンエンジニアリングと比べて、基礎物理に軸足を置いたようなものと捉えている。非常に基礎的なところでは、フォノンを利用した量子コンピューティングがある。これは機械式共振器を極低温まで冷却し、フォノンの最低エネルギーの基底状態 (0) と第一励起状態 (1) の2つの状態を量子ビットとして量子計算に使うアイデアである。また、分子の振動はテラヘルツ周波数領域に存在することから、フォノンはテラヘルツ技術と絡んでいる。さらに、フォノンは、スピントロニクスや、プラズモン・ポラリトン、そしてオプトメカニクスなどとも絡んでいる。つまり、フォノンはいろいろな所に絡んでおり、電磁波とも、電子とも、光とも絡んでくる。

フォノンエンジニアリングには、2つの大きな出口がある。1つは熱マネジメントであり、ICTや自動車まで様々な幅の広い出口がある。もう1つは熱電変換を通じてエネルギーハーベスティングをする環境・エネルギー分野が出口である。

この2つに共通する重要な技術は伝熱制御であると考えられる。この伝熱制御は、ナノ材料・構造を利用した熱電変換材料開発を切り口として1990年ぐらいから非常に活発に行われてきている。ナノワイヤーや合金、粒界散乱などを使う手法や、多孔質にして（小さい穴を数多く作って）表面散乱を使う手法が伝熱制御に用いられているが、伝熱制御のもう一つの手法としてきれいな周期構造を使ってフォノン輸送を制御するという手法がある。

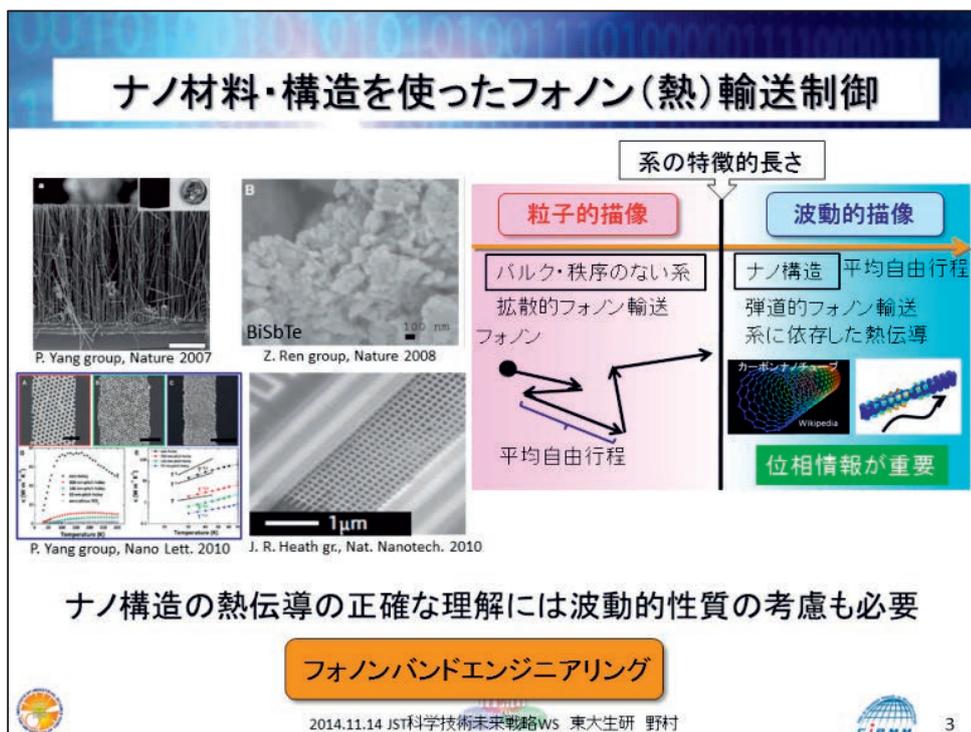


図 5-4-1

図 5-4-1 に示すような系でのフォノン輸送の理解には、拡散的輸送と弾道的輸送という明確に違う 2 つの輸送過程を考えなければならない。大体の系は準弾道的フォノン伝導になっていて、これを取り扱うのは難しい。なお、私がスポットライトを当てたいのは、平均自由行程が系の特徴的な長さよりも随分と長い系（例えばフォノンニック結晶のようなきれいな周期性がある系）である。

フォノンはもともと格子振動の量子なので、位相に関する情報を持っている。これが周期性を感じるということは、干渉が起きて輸送特性が大きく変化するということになる。このような系において、正確に物理を理解しようとする両方を考えなくてはならない。特に、フォノンの波動的性質をうまくエンジニアリングしてやれば、バルクでフォノンの粒子的性質を利用していたことよりも何か素晴らしいことができるかもしれないという期待感がある。

フォノンバンドエンジニアリングを私が始めたきっかけは、東大生研の荒川研究室でフォトニック結晶（光の伝播を屈折率の周期構造で大きく変える系）を研究していて、フォトニック結晶と同じように周期を作ると、フォノンも大きく輸送特性を変化させられるというフォノンバンドエンジニアリングの可能性に気付いたからである。こういった考え方は 1987 年のヤブロンビッチの論文が出た頃からあるが、それが実現するのはまだまだ難しい状況にある。

図 5-4-2 に示すように、周期構造でフォノンの輸送特性を大きく変化させられるのは、Zone-folding 効果による。結晶の格子定数の何倍かの新しい周期を入れてやると、波数空間では新たに内側に折り返し点できて、周期に見合った所でバンドギャップが開き、かつ群速度が下がることで、輸送特性が変化してくるわけである。このような私のバックグ

ラウンドである高度に発達した光波制御技術を伝熱工学に応用すれば、新しい研究領域もでき、うまくいけば伝熱制御に新しい選択肢を加えられるかもしれない、と期待している。

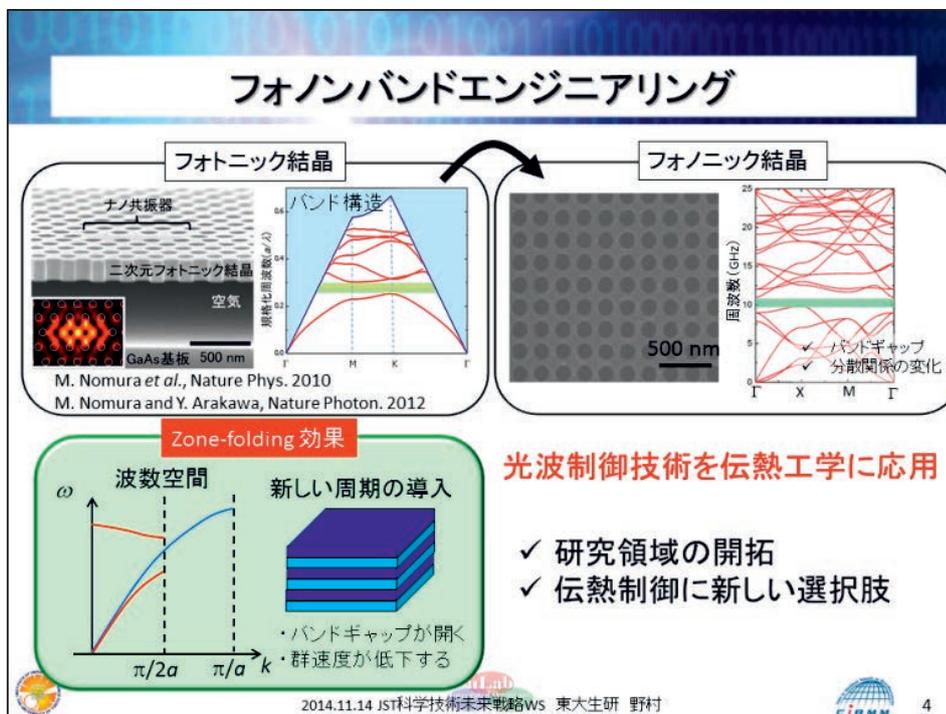


図 5-4-2

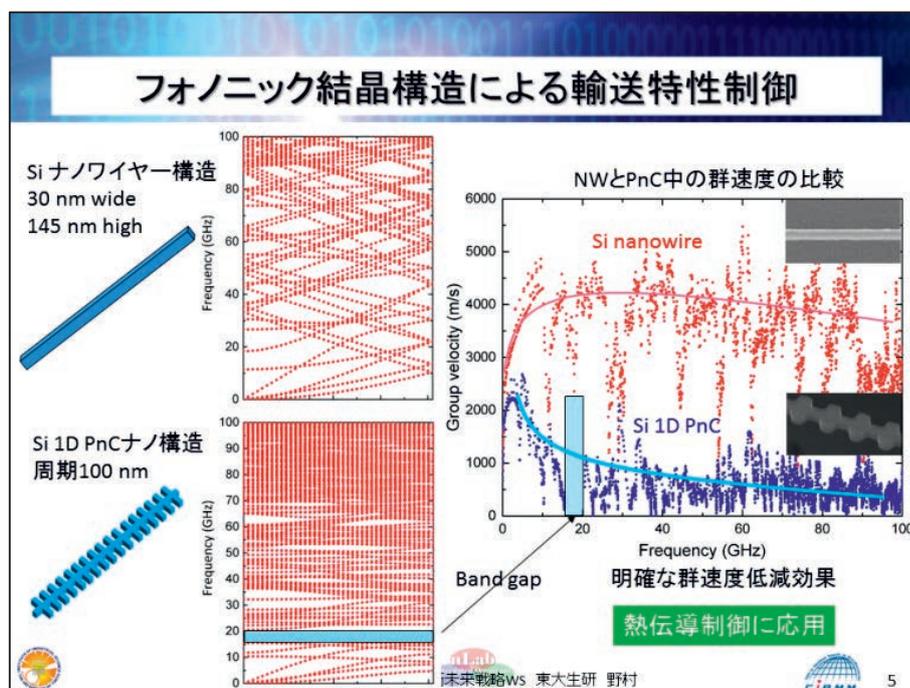


図 5-4-3

フォノン結晶構造を使うと、どのように輸送特性が変化するかを計算したのがこの図である。普通のシリコンナノワイヤー（図 5-4-3 左上）と、それに 100nm の周期で横棒を付けたような一次元のフォノン結晶（図 5-4-3 左下）を考えると、フォノンのバンド図は明らかに変化して、うまく設計すればバンドギャップも開いてくる。群速度を算出すると、シリコンのナノワイヤーで大体数千 m/s であったものが、フォノン結晶を使うと数百 m/s 程度まで明らかに群速度は低くなっていく。したがって、熱伝導制御に上述した手法が使えると期待されるが、20 年ぐらいたった今でもなかなかうまくいかないのが現状である。

確かに MHz ぐらいの周波数領域であれば、非常にきれいにフォノン結晶の実験が行われているが、フォノン輸送制御と熱輸送制御には全く別次元の難しさがある。フォノン輸送制御は単色のフォノン波レーザを使って実験するようなイメージである。一方、熱制御のイメージは、例えば軟 X 線から中赤外までの光を一気に扱うようなものであると言ってもいいかもしれない。したがって、熱は広周波数領域に分布したフォノンの集団なので、きちんと操るには、熱を運んでいるフォノン全域に効果的な構造設計と作り込みを行わなければいけない。

そのためには、どのような平均自由行程を持つフォノンが主に熱伝導を担っているのかをシミュレーションで明らかにし、それから効果的な伝導制御の構造を作り込む材料・ナノ構造作製技術が必要であり、最後にはその材料の熱伝導率を正確に測定する評価技術が必要になってくる。

熱伝導率測定に関しては、我々は測定系を作り、サーモリフレクタンス法を少し改造した測定法を使っている。図に示すように、真ん中の縞に金属を蒸着して、それを測りたい構造だけで支え浮かして測定している。瞬間的にここを温めて温度が冷める様子を見ると、この冷める速さには熱伝導率  $\kappa$  の情報が含まれており、他には熱散逸チャンネルがないので、非常に正確に熱伝導率  $\kappa$  を得ることができる。

シリコンナノワイヤーなどの系の熱伝導率を測定するには、電極付けを行った後にヒーターとサーミスタを用意し、マイクロマシーニングで下を抜くという非常に面倒な作業が必要なので、1 日で大体 1 個～10 個の試料しか測れないが、我々の測定系を使うと数千個程度の試料が 1 日に測れる。最近では、光を当ててから 3 秒ぐらいで試料の熱伝導率が分かるころまで測定系が構築できている。

全周波数領域に効果のある構造設計指針としては、2 年ぐらい前の『Nature』に載った（鉛テルルで実用性が保証されているような）オールスケールアーキテクチャ戦略がある。まず、最初に熱を運ぶフォノンの平均自由行程はどれぐらいなのかとこの周波数のフォノンをブロックすべきなのかとこの周波数を明らかにすることで、ブロックする守備範囲を見分ける。そして、トップダウンでは厳しいような 100nm を切るような構造では、ポリシリコンにしてボトムアップで任せて、比較的長い所の構造をフォノン結晶でブロックすることになる。

平均自由行程が比較的長いフォノンがたくさんいて、それが熱を運んでいるのではないかとこのことが分かっている。従来の研究では、非常に小さい構造を作ることにより、図

5-4-4 の領域①と②のフォノンをうまくブロックできていた。しかしながら、領域①と②をブロックした（削り切った）後には、残っていた領域③が非常に大きく見えてくるので、そこをブロックする手法としてバンドエンジニアリングが有効なのではないかと考えている。

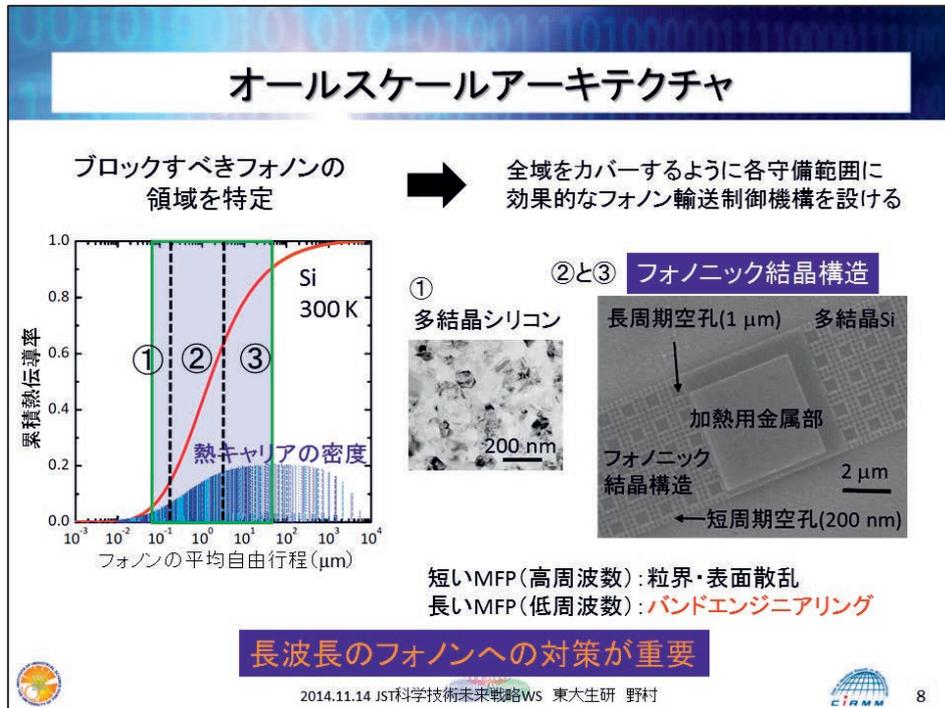


図 5-4-4

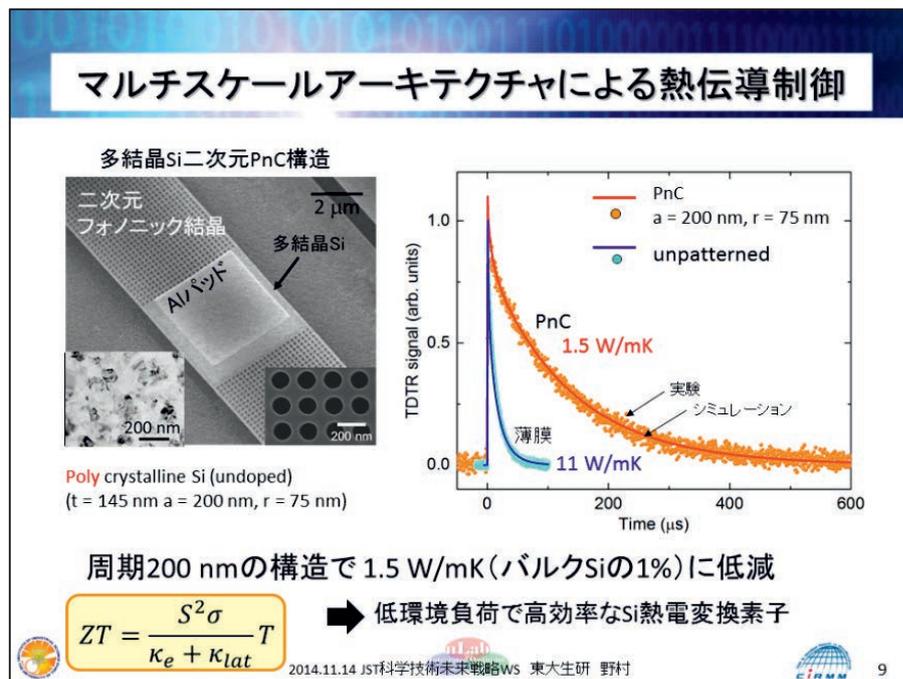


図 5-4-5

図 5-4-5 に示した研究成果はポリシリコンの薄膜を使って、二次元のフォノン結晶を使ったものである。薄膜化してポリシリコンを使っている時点で、シリコンの単結晶と比べまして熱伝導率 $\kappa$ が1桁ぐらい小さい値に既に低減しているが、図のように穴を開けると熱伝導率 $\kappa$ は1.5W/mKとなり、さらに1桁近く落ちることが分かった。この実験事実はフォノンバンドエンジニアリングの凄さを示すものであり、金属の半分とか3分の1ぐらい電気を通すシリコンがガラス並みに熱を通さなくなるレベルまでできているということになる。このテクニックを熱伝導率 $\kappa$ の低減に使えば、低環境負荷で高効率なシリコン熱電変換素子ができるかもしれないと期待しており、研究を進めているところである。

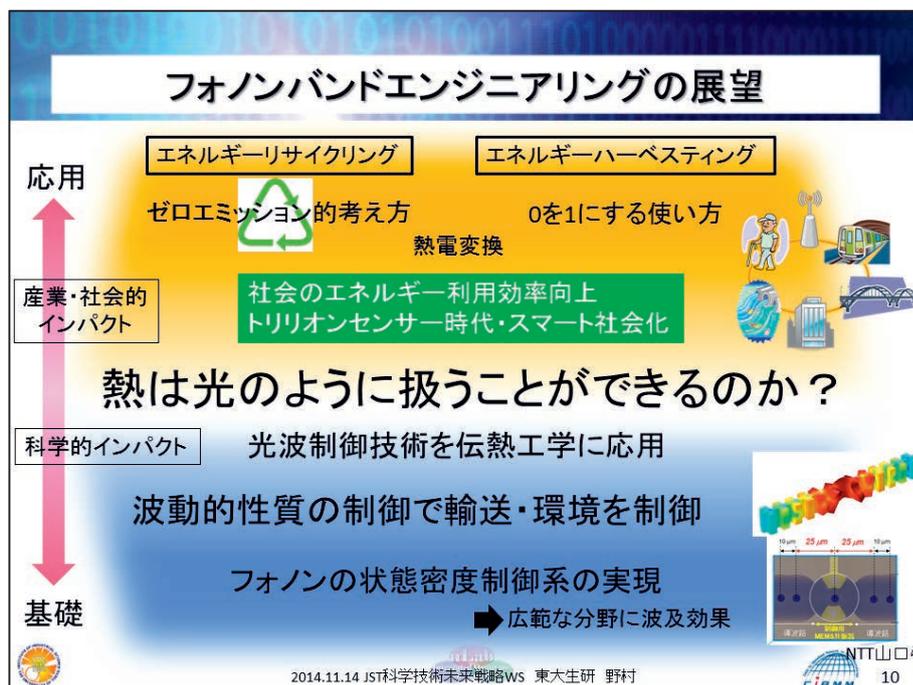


図 5-4-6

図 5-4-6 に示すように、「熱は光のように扱うことができるのか?」という根本的な疑問に基づいて、フォノンバンドエンジニアリングがどういう所に使えそうかということに関して述べたい。フォノンバンドエンジニアリングは非常に興味深く、もし使えるようになれば光波制御技術を伝熱工学に応用できるわけであり、いろいろなことができると期待している。これが科学的インパクトである。フォノンの波動的性質を積極的に利用して、デバイスのフォノン環境を最適整備するということは、固体系には必ずフォノンは良くも悪くもいろいろ存在しているわけなので、冒頭で述べたような広範な分野に対して波及効果があるものと考えている。

一方、応用のほうに目を向ければ、例えば熱電変換分野では、「エネルギーリサイクリング」というゼロエミッション的な考え方と、0を1にする使い方の「エネルギーハーベスティング」があると思う。このような応用により、社会のエネルギー利用効率を向上させることができる。ほぼ間違いなくやってくる近未来のトリリオン・センサー時代やスマート社会をより一層安全で利便性の高いものにするという意味で、「エネルギーリサイクリ

ング」や「エネルギーハーベスティング」の産業的・社会的なインパクトはほぼ間違いないと考えている。

最後に、フォノンをキーワードにした国際的な研究体制の整備状況と、ここ1年間研究拠点にしているドイツから実際に見た上で感じている国際動向について述べたい。

まず、アメリカには強烈なプレイヤーがたくさんいるが、割と個人プレイになっていて有機的なつながりはないように見える。しかしながら、研究資金はしっかり配分されており、例えば、エネルギー高等研究計画局から約20億円の研究資金がMITに配分されていて、フォノン関連の研究が行われている。また、中国では昨年フォノンと熱エネルギー科学の研究センターが立ち上がり、シンガポールでも、20人ぐらいのPIをリクルートにより集めて研究センター作り、国際会議も昨年開催したという状況である。そして、私が最も強烈だと思っているのが欧州の動きである。欧州では、EUPHONONという名の元に実に50を超える大学や研究機関、企業まで取り込んで、ワークショップなどを開催することで、非常に強烈なコミュニティ構築活動を行っている。このことは、研究グループが分野を超えて有機的につながる仕組みが必要であるということを示唆している。

したがって、我が国も、フォノンエンジニアリングをキーワードにしてチームをつくって、ボリュームのある研究をやっていくことが非常に重要である。

#### 【質疑応答】

Q：フォノンエンジニアリングは、主に熱伝導を下げる研究がほとんどであるが、逆に熱伝導を上げることは理論的に可能か。

A：熱伝導率を上げるには、まずできるだけクリーンに試料を作らなければならない。また、ヨーロッパの会議で発表があったが、光の力を借りて熱伝導率を上げるという方法があり、プラズモン・ポラリトンを使ってより速く熱を伝えるというアプローチも考えられる。

Q：フォノン結晶を作っているが、それは、フォノン結晶を使って、ある特定の周波数の波数のフォノンをブロックすることで熱伝導を低減するためか。

A：いいえ。熱フォノンは非常に広い周波数に分布しているので、バンドギャップを使って特定の周波数の波数のフォノンをブロックし、熱伝導の低減を狙うような物理的なイメージではない。計算してみると、全ての周波数領域で低減するので、理論的にはかなり高周波領域まで低減効果があるため、群速度の低減によって熱伝導率の低減を狙う。フォトン結晶では単色光で実験するので、フォトンバンドギャップの所に欠陥を作ってキャビティーにして光を閉じ込めたり、フォトンバンド端だけを使ってスローライトを発生させたりするので、フォトン結晶とフォノン結晶では大きな物理的イメージの違いがある。

Q：フォノン結晶では非常に広範囲のフォノンスペクトルに影響が出るということか。

A：はい、理論的には、その通りである。

Q：サイズはどのくらいに設計しているか。

A：今のところ、200 nm、300 nm、1 μ m のサイズに設計している。

- Q：そうすると、このサイズと低減効果とはどういう関係になるか。
- A：ほぼ近い所に来ており、先程の計算結果では、100nm サイズの場合、大体数十 GHz ぐらいの所に影響が出てくる。
- Q：それによって、より広い周波数領域のフォノンスペクトルに対して影響があるということなのか。
- A：そうである。
- Q：今の場合、バンド分散だけが注目されているが、状態密度というのを考えなくてはいけないと思う。実際にはデバイ温度とかデバイ周波数というのは、高い周波数のフォノンと関係している。むしろ伝熱ということを考える時には、テラヘルツオーダーの周波数領域をきちんと制御しないとイケないのではないか。
- A：その点は我々も最も興味がある所で、これぐらいの構造を使ったら何度ぐらいまで影響があるのかということ調べてようとしている。ただ、フォノンニック結晶による効果とその他の効果の切り分けが非常に難しく、フォノンニック結晶を設けることで表面が増えて表面散乱が増えてしまうので、なかなかきちんと実測できない。これが、アイデアが出て 30 年近く誰も明確に示したことがないという理由の 1 つだと思う。それにはもうちょっと時間を頂きたい。
- Q：EUPHONON という組織について教えてほしい。これは、学術的な機関の集まりなのか、それとも、企業やフランホーファー研究機構のような所も入っているのか。
- A：大半が大学であるが、一部、一桁数の企業も含まれている。
- Q：EUPHONON は今のところ情報共有するような場であり、大きなお金の流れはまだ発生していない状況なのか。
- A：昨年ポジションペーパーを作った段階である。

## 6. 総合討論

コーディネーター： 佐藤 勝昭 (JST-CRDS)

これまでの各プレゼンテーション・質疑を踏まえて、(論点1) ナノスケール熱制御で重要な研究開発課題、(論点2) 世界をリードするナノスケール熱制御の推進に必要な仕組み、(論点3) 社会的・経済的・科学的なインパクト、に関連する議論をおこなった。以下では、総合討論において挙げた主要な議論を、単位ごとに要約して示す。

### 論点1. ナノスケール熱制御で重要な研究開発課題

- 各発表者の内容にはそれぞれにつながりがあり、全体として一定の一貫性があることがわかった。しかし互いに不足があり、それを埋め合わせていくことが必要。
- 現段階でわれわれが戦略的に使える技術ツールとしてどのような種類があるのか、整理して共有が必要。道具立てとして何と何と何があるのかというのは、広げておくべき。もちろん定期的に成果を出して産業界にインパクト与えるようなものと、サイエンスとしてその先どこまで効果が広がっていくのかとの期待を持たせるものを残して、知恵を総動員しなければならない。
- 理論にも実験にも、やるべきことが多くあり今は初期段階である。フォノンエンジニアリングという大きな流れで、将来どの方向にアウトプットが出てくるか、現時点ですべて決めきることは適切ではない。例えば半導体のバンドエンジニアリングでやってきたことは、最初にヘテロ接合を作った時にはおそらく予想されていなかったはず。
- 理論と実験を独立に進めてはならない。理論グループと実験グループのなどのように、グループを最初から分けないほうがいい。実験には、材料を創製することと、フォノンの現象を評価することと2つあり、そこに理論解析が協力して融合していくことが重要。マテリアルデザインで、熱伝導率をどう制御するか、対称性を利用するなどいくつか新しいコンセプトが出ている。
- シミュレーションでは、回路シミュレーションになるとかなり高速に心臓部が動かなければいけないため、モンテカルロ法を入れることはおそらくできない。SPICE でやるのであれば、ある程度物理的なモデルから出た結果を抽出して、それを盛り込む形になっていく。もちろん上流にあるのは第一原理計算であり、バンド構造を決めるところから始める。国のプロジェクトで道筋を作ることができれば、他国にはできないツールを開発できる可能性がある。
- 理論側からみると、材料科学者はまずバルクの熱伝導率を探したいと思う。ほぼ調和的な情報だけから熱伝導率を予測したいという。3元系や4元系の材料の熱伝材料が期待されているが、その際、アコースティックモードとオプティカルモードを分けることにはあまり意味がない。アコースティックモードは3本しかなく、残りは全てオ

プティカルモードで、ユニットセルの原子数が多くなればほとんどはオプティカルモードになる。初めにこのような議論を始めた時には、フォノンというとアコースティックなものしか頭になかったようだが、しかしオプティカルフォノンのほうがむしろ数が多く重要。低熱伝導率を探す時は、構造相転移点に近い材料の非調和性が非常に大きくなる。非調和性による散乱をどう設計するか、フォノンのバンド構造が結構利く。フォノンというのはほとんど利くのが3帯のスキッターリングだが、例えばアコースティックモードを見ていても、それと残り2帯であり、この残り2帯の位置がすごく大事。オプティカルモードは非常に簡単なバンド構造をしていても、オプティカルモードの位置を変えるだけでスキッターリングを起こす周波数帯というのは結構変わる。

- ・計測技術は、プロジェクト全体に対して基盤技術として提供していけるようにすべき。プロジェクトのインフラとしての計測で、力を合わせて役に立つことが、産総研やNIMSの役割として重要だろう。1つの方法で全ての材料を測れる方法はない。それぞれの方法の得意と不得意があり、バラエティーがあることが大事。ナノスケールの測定では、影響要素が20個、30個と多くある。それが相互作用した最後の結果が測定結果になる。したがって測定結果からメカニズムの解析をおこなうことはかなり難しい。逆に、計算はある物理モデルに基づいて、各要素を分離して解析することが得意。その結果と測定結果が合わないことはむしろ当たり前のこと。この合わないということに意味がある。実験に合わせるために計算が存在するわけではないので、この違いをよく検討していくことが大事になる。
- ・攻める計測が大事。精度を度外視するというのは言い過ぎだが、新しい物理を捉えるために過激なことをやっていくというスタンスも、精度を求める基盤計測と並行して必要になる。例えば、フォノンの平均自由行程を計測したい。非弾性中性子散乱のスペクトルを見て、計算から出てくる非調和性と比べるというのもある。フォノンのエネルギーや周波数に依存した物性を、実験から取ってくるができることとよい。界面を設けたときに熱が透過するわけだが、その透過は周波数に依存して透過関数が違う。それをダイレクトに実験で求めることができないだろうか。フォノンをそのまま測るのか、それともほかの準粒子を、マグノンを探プローバーとして使うなど、新しいアイデアの計測にチャレンジすべき。フィンランドの研究グループは、希釈冷凍機内の極限環境でフォノン結晶の測定をしている。冷やした状態ではフォノンは波長が長くなるので、理想的な環境で実験ができる。実用の観点では、デバイスの設計や材料の選択をするときに、どういう方向に行けばいいのだというガイドラインがある程度できるためには、やはりまだ無いような攻めの測定法が求められる。電子の流れに比べ、今後ますます重要になるのが熱の流れであり、その測定が課題。
- ・企業でサーマルマネジメントに関わる材料の研究に乗り出した途端に、計測シミュレーションがうまくいかず実験の効率が落ちてしまった。非常にやりにくい実感を持っている。薄膜の熱伝導を面内で測りたいといっても、なかなかできない。あるデバイスを作って、熱流をシミュレーションしようと境界条件を設けてやるのだが、実験結果と合わない。汎用的に使えるような測定環境ができると、熱に関わる材料やデバイスの企業も、

開発が前に進むだろう。

### 論点2. 世界をリードするナノスケール熱制御の推進に必要な仕組み

- ・ヨーロッパでは枠組み作りが行われている。2013年にフランスのセバスチャン・ボルトツ先生が中心となり、50を超える大学、企業、研究所をまとめ上げ、「ナノフォノクス」というキーワードのもとにコミュニティを形成している。アメリカや中国の動きに刺激されてのことのようだが、アメリカではプレイヤーが点在していて、日本の状況に近い。日本では、伝熱学会においてフォノンエンジニアリングの認知度が徐々に上がっている。異分野へ広げていけないだろうか。
- ・新しい分野で人的ネットワークを補うものとして、データのネットワークが必要である。多岐にわたる分野の情報を、フォノン、電子、スピン、いろいろな技術をデジタル情報としてまとめて、使いやすい形で保存しておくことが大事。熱伝導だけではなくて、結晶構造や弾性率、ほかの特性を統合的に見られるようにし、使いやすい形で保存しておくこと。

### 論点3. 社会的・経済的・科学的なインパクト

- ・アナロジーとしては、半導体エレクトロニクスをフォノニクスの世界に持ってくることでできたら、インパクトがある。例えば、片方にだけしか熱が流れない、所望の時に熱を流したり切ったり、トランジスタのようなことをする。これはかなり夢のような話かもしれないが、将来的なインパクトは大きい。
- ・熱電素子というのが大きなテーマとして挙がるが、今まで使われていなかった余剰な熱をどう減らして、且つ使えるのか。基礎データとともにちゃんとできていけばインパクトになる。科学的なインパクトや魅力の点では、いわずもがな非常に高い。
- ・フォノンはある意味どんな物質にもある、どこにでも登場するからこそ、ほかの分野と融合することで今われわれが全く思っていないようなことも生まれてくる。しかしいまのフォノニクス技術は魅力的だが、元の材料よりも手間がかかる状況。トータルで見るとコスト的にペイしないレベル。
- ・熱電材料に限っての例だが、短期間でペイしなくても、長い目で省エネに貢献してペイすればよいのではないか。NASAは人工衛星の原子力電池を熱電により賄って、30年間誰もメンテナンスをしなくても全系統の電気を供給しているというケースがある。
- ・パワー半導体では、SiCにしるGaNにしる、放熱や熱伝導のいろいろな問題をきちっと設計できるようにならなければいけない。コストまで含めて異分野同士で話し合うことが求められる。熱のほうを詰めていくと、もともとの半導体チップのほうも直さないといけなくなり、ほかの材料についても新たな要求が出てくる。その間の技術仕様の調整はかなり必要。

- ・  $ZT=1$  の熱電素子ができたら自動車に使うという話があったが、しばらくするとそれではダメだとなり、次に  $ZT=4$  でなければという話になった。1 でいいと言った頃は、この技術は燃費を良くする技術なので競争する技術が必ずあり、その頃ハイブリッドシステムが非常に高価だったので、同じぐらいのコストパフォーマンスでいいとしたら1でも行けるのではないかということだった。ところが、量産が進んでコストが下がってくると、やはり4ぐらいないととなり、また、実際に車で2割を電気に変えたとしても8割の熱はまた別のラジエータで低い温度でさらに捨てなければいけない。出来た電力を変換してバッテリーに戻すためにはDC – DC コンバータが要るなど、付帯設備がどんどん増えてきて、すると  $ZT$  が4ぐらいないと合わないといった。つまり、予測はかなり難しく、その時その時の技術水準状況に合わせて考えなければならない。いま  $ZT$  の値は上がってきていて、2は夢の数字ではなくなった、バルク材料でかなり近い所に来ている。また、元素戦略の観点で豊富で安い元素からできるかだ。
- ・ 逆スピントリック効果でスピントリック効果が観測されている。オランダのフローニンゲン大学から論文に載ったばかり。スピントリックの注入方向によって温度が変わったという段階で、まだ冷えるということは証明されていない。スピントリック効果は温度というマクロなものが入力で、スピントリックが出力。それをすぐ電流に変えてしまうので、スピントリックの場合はスピントリックが入力。ナノスケールでしか機能しないスピントリックは、入力がナノだと大規模なものに出来ないのではないかと考えている。
- ・ 例えばウェアラブルに対しても、超低消費電力回路に対しても、排熱のマネジメントが直接的に影響する。半導体に限らず、マテリアルとアプリケーションのそれぞれの業界にインパクトを与えるだろう。健康・医療も関係するし、蓄熱もこれからの産業としてあり得るだろう。熱はいろいろな所に出口があるが、その根幹になっているのはフォノンである。もちろん、より直近のところではパワーエレクトロニクスや車。
- ・ フォノンエンジニアリングの成果を使う立場から、電子のサブバンドエンジニアリングでデバイスの高性能化をやっているときは、電子の散乱を抑えて、移動度を良くしようとする。そのために、ひずみをどう入れるか、量子構造をどうつくるか、そういったルールを整理して、ルールに基づいて統一的に考えることで性能を良くしていった。熱伝導を良くする、または悪くする統一的な指針がほしい。いくつかの簡単なルールに落とし込んでもらうことができると非常に良い。
- ・ 標準サンプルと標準データが極めて重要。私はシリコンの熱伝導率を測りながら測定手法を検証している際、シリコンの熱伝導率さえも148、160などばらつきがあって、数%の精度で計測したくてもどこに合わせていけばいいか、シリコンでさえ分からない。FZ基板を使うのと、CZ基板を使うのとで何が違うのか、こういったことから求められる。
- ・ ナノスケールの発熱が何か役に立つかということ、われわれが考えたときにはセンサへまづは行こうとしている。発熱が高くなったことで新しいアプリケーションを生み出したい。

- ・サイエンスとしては、光でもなくフォノンでもないような重ね合わせ状態をつくるという研究が世界的に進んでいる。フォノン一個一個を動かす。光とのハイブリッドでフォノン1個の状態を用意する。ある意味で究極のフォノンエンジニアリングであり、サイエンスのインパクトは高いが、日本ではあまりやられていない。
- ・人材確保。量子エレクトロニクス分野で、単一電子トランジスタや単一光子発生という観点からすると、フォノンはできるだけ消したいというような認識が研究室の学生にはある。しかし、このワークショップで見てきたように、フォノンの役割は将来重要になることは間違いなく、若い人材を確保しなければいけない。そのときに、学生にとってこの分野が魅力的に見えるためには、きちんと勉強できる学問としての体を成していかなければいけない。勉強するためのテキストが世の中にはまだないので、学問として成立させていくのも重要な役割の1つ。日本語と英語で作って、世界に「日本のフォノンエンジニアリング」を示していきたい。

#### まとめ

各発表者からの発表内容および総合討論の議論から、今後はそれぞれの領域での研究開発課題を推進するとともに、以下のような取り組みが必要なことがわかった。

- ・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、スピンの統一的理解と制御。

## 付 録

### 付録 1：開催趣旨・プログラム

#### 開催趣旨

JST 研究開発戦略センター（CRDS）では、科学技術に求められる社会的・経済的ニーズを踏まえて国として重点的に推進すべき研究領域や課題を俯瞰の視点から系統的に抽出し、そのファンディング戦略を明確にするための活動を行っております。このような活動の一環として、これまでに技術分野の俯瞰を目的とした「俯瞰ワークショップ」や、重要テーマの研究開発戦略を検討する「科学技術未来戦略ワークショップ」などを開催して参りました。

本ワークショップ「フォノンエンジニアリング」は、上記「科学技術未来戦略ワークショップ」に位置付けられます。熱の制御は産業・運輸・民生部門にとって非常に重要ですが、近年では電子・電気機器の駆動により必ず生まれる熱を、どれだけ効率よく逃がすことができるかが、関連産業においてクリティカルな課題となりつつあります。また、電子デバイスの微細化に伴い、他に影響を与えないで局所的な加熱・冷却を迅速に行うような要求や、自然界の熱や廃熱をエネルギー源として有効に利用する技術（エネルギーハーベスティング）が要望されています。これらの課題に対しては、微細構造や材料界面などナノスケールでの熱伝導をきちんと理解しておくことが重要ですが、まだ学術的な体系が構築されていないのが現状であり、大きく進展しているナノテク・材料技術や電子・光の領域で進んだ量子力学的な手法・知見を活用して、新たな学術領域を構築することが必要と考えられます。本ワークショップでは、現在あるいは将来の集積回路やパワー半導体、次世代ハードディスク、熱電変換素子などの熱に関する技術的課題や、必要となる科学技術、その開発を促進するための政策などの議論を行い、ナノスケールでの熱の理解に基づく熱の効率的な制御・利用のために有効な研究開発戦略策定の一環として開催するものです。

本ワークショップでは、熱の制御や利用に関する産業界の問題意識や要望などから、ナノスケールの熱に関する問題の根源を明らかにし、その解決に必要な科学技術とその推進方法などについて議論します。ナノスケールの熱の理解を深めるために必要な局所的な温度測定、薄膜や異種材料界面の熱伝導計測・熱物性評価、理論的解析技術、マルチスケールのシミュレーション技術、高い絶縁性を保ちながら高い熱伝導性を持つ材料やその逆に高い電気伝導性を有して低い熱伝導性を持つ新材料、熱（フォノン）と電子・光子・スピンの相互作用を利用した高性能あるいは新たな機能を持つデバイス、などについて議論をすることで、ナノスケール熱制御に関する研究開発の方向性を明らかにし、取り組むべき科学技術とその推進方法の共通認識を得ることにあります。

なお、本ワークショップは非公開とさせていただきますが、議論の内容は報告書として纏め、参加者及び関連府省に配布後、CRDS の web サイト上で一般公開させていただくと共に、今後の施策や提言書作成の参考にさせていただきます。

## プログラム

(敬称略)

開催日時：2014年11月14日(金) 10:00～17:45

開催会場：TKP 市ヶ谷カンファレンスセンター 3階ホール 3C

コーディネーター  
司会

佐藤 勝昭 (JST-CRDS)  
馬場 寿夫 (JST-CRDS)

10:00～10:05	開会	曾根 純一 (JST-CRDS)
10:05～10:25	ワークショップの趣旨説明	馬場 寿夫 (JST-CRDS)
10:25～10:55	「フォノンエンジニアリングの展望」	塩見淳一郎 (東京大学)

応用分野からの「ナノスケール熱制御」科学技術への期待 (各発表15分+議論10分)

10:55～11:20	「ナノスケール抵抗変化メモリ (ReRAM) における「熱」の役割」	島 久 (産業技術総合研究所)
11:20～11:45	「次世代パワー半導体の放熱問題」	山口 浩 (産業技術総合研究所)
11:45～12:10	「熱アシスト磁気記録」	喜々津 哲 (東 芝)
12:10～12:35	「自動車における熱制御」	松野 孝充 (トヨタ自動車)

話題提供① ナノ熱計測・シミュレーション (各発表15分+議論10分)

13:25～13:50	話題提供-1「ナノスケールの熱計測・熱解析技術」	徐 一斌 (物質・材料研究機構)
13:50～14:15	話題提供-2「第一原理からの格子熱伝導計算の現状」	東後 篤史 (京 都 大 学)
14:15～14:40	話題提供-3「半導体における電子・熱輸送シミュレーション」	栗野 祐二 (慶應義塾大学)

話題提供② デバイス革新 (各発表15分+議論10分)

14:50～15:15	話題提供-4「熱設計によるデバイス高性能化戦略」	内田 建 (慶應義塾大学)
15:15～15:40	話題提供-5「熱電変換材料設計」	森 孝雄 (物質・材料研究機構)
15:40～16:05	話題提供-6「スピンゼーベック効果と熱電変換」	内田 健一 (東 北 大 学)
16:05～16:30	話題提供-7「フォノンバンドエンジニアリング」	野村 政宏 (東 京 大 学)

16:40 ~ 17:40 総合討論 (コーディネーター 佐藤 勝昭)

論点 1. ナノスケール熱制御で重要な研究開発課題

2. 世界をリードするナノスケール熱制御の推進に必要な仕組み  
(推進の旗、研究体制、学会・分野の連携、人材育成など)

3. 社会的・経済的・科学的なインパクト

17:40 ~ 17:45 閉会

曾根 純一 (JST-CRDS)

## 付録 2：参加者一覧

### 招聘識者

(発表者)

- ・栗野 祐二 慶應義塾大学工学部 電子工学科 教授
- ・内田 建 慶應義塾大学工学部 電子工学科 教授
- ・内田 健一 東北大学金属材料研究所 准教授
- ・喜々津 哲 東芝 研究開発センター スピンデバイスラボラトリー 研究主幹
- ・塩見淳一郎 東京大学大学院工学系研究科 機械工学専攻 准教授
- ・島 久 産業技術総合研究所 エマージングデバイスグループ
- ・東後 篤史 京都大学構造材料元素戦略研究拠点 特定准教授
- ・野村 政宏 東京大学生産技術研究所 マイクロナノメカトロニクス国際研究センター 准教授
- ・松野 孝充 トヨタ自動車 性能実験部 熱流体開発 シニアスタッフエンジニア
- ・徐 一斌 (シュウ イービン) 物質・材料研究機構 中核機能部門 材料情報ステーション データベースグループ グループリーダー
- ・森 孝雄 物質・材料研究機構 MANA ナノマテリアル分野 無機ナノ構造ユニット ネットワーク構造物質グループ グループリーダー
- ・山口 浩 産業技術総合研究所 先進パワーエレクトロニクス研究センター副研究センター長

(コメンテータ)

- ・青合 利明 富士フイルム株式会社 先進研究所 フェロー
- ・馬場 哲也 産業技術総合研究所 計測標準研究部門 招聘研究員
- ・広瀬 賢二 NEC スマートエネルギー研究所 主任研究員
- ・山口 浩司 NTT 物性科学基礎研究所 複合ナノ構造物理研究グループ

### JST-CRDS フォノンエンジニアリングチームメンバー

- ・曾根 純一 上席フェロー・チーム総括責任者(ナノテクノロジー材料ユニットリーダー)
- ・馬場 寿夫 フェロー・チームリーダー (ナノテクノロジー・材料ユニット)
- ・斎藤 広明 フェロー (環境・エネルギーユニット)
- ・佐藤 勝昭 フェロー (ナノテクノロジー・材料ユニット)
- ・永野 智己 フェロー (ナノテクノロジー・材料ユニット)
- ・松下 伸広 特任フェロー (ナノテクノロジー・材料ユニット)
- ・的場 正憲 フェロー (情報科学技術ユニット)

### 参加者

- ・山本貴富喜 内閣府総合科学技術・イノベーション会議事務局 共通基盤技術グループ ナノテクノロジー・材料担当 上席科学技術フェロー

- ・ 田巻 孝敬 文部科学省 研究振興局参事官 (ナノテクノロジー・物質・材料担当)  
付学術調査官
- ・ 春田 諒 文部科学省 研究振興局基礎研究振興課基礎研究推進室 係長
- ・ 倉敷 哲生 経済産業省 製造産業局ファインセラミックス・ナノテクノロジー・  
材料戦略室 戦略調整官
- ・ 日向 秀樹 経済産業省 製造産業局ファインセラミックス・ナノテクノロジー・  
材料戦略室
- ・ 大園 拓哉 経済産業省 産業技術環境局研究開発課
- ・ 井関 隆之 新エネルギー・産業技術総合開発機構 技術戦略研究センター ナノ  
テクノロジー・材料ユニット 研究員
- ・ 小川ゆめ子 新エネルギー・産業技術総合開発機構 技術戦略研究センター ナノ  
テクノロジー・材料ユニット 研究員
- ・ 後藤 謙太 新エネルギー・産業技術総合開発機構 電子・材料・ナノテクノロジー部
- ・ 遠目塚幸二 新エネルギー・産業技術総合開発機構 電子・材料・ナノテクノロジー部  
主査
- ・ 石田 敬雄 産業技術総合研究所 ナノシステム研究部門 グループ長
- ・ 馬場 俊彦 応用物理学会 理事 (横浜国立大学工学研究院 教授)
- ・ 水田 博 北陸先端科学技術大学院大学 マテリアルサイエンス研究科 教授
- ・ 魚崎 浩平 JST-CRDS 特任フェロー (ナノテクノロジー・材料ユニット) /物  
質・材料研究機構 フェロー
- ・ 田中 一宜 JST-CRDS 特任フェロー (ナノテクノロジー・材料ユニット) /産  
業技術総合研究所 名誉リサーチャー
- ・ 河村誠一郎 JST-CRDS フェロー (ナノテクノロジー・材料ユニット)
- ・ 島津 博基 JST-CRDS フェロー (ナノテクノロジー・材料ユニット)
- ・ 中本 信也 JST-CRDS フェロー (ナノテクノロジー・材料ユニット)
- ・ 尾山 宏次 JST-CRDS フェロー (環境・エネルギーユニット)
- ・ 勝又 康弘 JST 戦略研究推進部グリーンイノベーショングループ 主任調査員
- ・ 辻 伸二 JST 戦略研究推進部グリーンイノベーショングループ 主任調査員
- ・ 栗原 健二 JST 戦略研究推進部研究評価グループ
- ・ 五明 明子 JST 研究プロジェクト推進部 主任調査員
- ・ 千野 昌彦 JST 産学連携展開部 S-イノベ・共創グループ

■ワークショップ企画・報告書編纂メンバー■

曾根 純一	上席フェロー	(ナノテクノロジー・材料ユニット)
馬場 寿夫	フェロー・チームリーダー	(ナノテクノロジー・材料ユニット)
斎藤 広明	フェロー	(環境・エネルギーユニット)
佐藤 勝昭	フェロー	(ナノテクノロジー・材料ユニット)
永野 智己	フェロー	(ナノテクノロジー・材料ユニット)
松下 伸広	特任フェロー	(ナノテクノロジー・材料ユニット)
的場 正憲	フェロー	(情報科学技術ユニット)

※お問い合わせ等は下記ユニットまでお願いします。

CRDS-FY2014-WR-15

科学技術未来戦略ワークショップ報告書

「フォノンエンジニアリング

ー ナノスケール熱制御によるデバイス革新 ー」

2014年11月14日(金)開催

平成 27 年 3 月 March 2015

独立行政法人科学技術振興機構 研究開発戦略センター ナノテクノロジー・材料ユニット  
Nanotechnology/Materials Unit, Center for Research and Development Strategy  
Japan Science and Technology Agency

---

〒102-0076 東京都千代田区五番町 7

電 話 03-5214-7481

<http://www.jst.go.jp/crds>

©2015 JST/CRDS

許可無く複写／複製することを禁じます。

引用を行う際は、必ず出典を記述願います。

No part of this publication may be reproduced, copied, transmitted or translated without written permission. Application should be sent to [crds@jst.go.jp](mailto:crds@jst.go.jp). Any quotations must be appropriately acknowledged.

---



