

様 式 C - 1 9、F - 1 9 - 1、Z - 1 9（共通）

科学研究費助成事業 研究成果報告書



令和 5 年 6 月 1 5 日現在

機関番号：8 2 6 2 6

研究種目：基盤研究(C)（一般）

研究期間：2020～2022

課題番号：2 0 K 0 4 6 1 1

研究課題名（和文）フォノン熱輸送のデバイスシミュレーション

研究課題名（英文）Device simulation of phonon heat transport

研究代表者

服部 淳一（Hattori, Junichi）

国立研究開発法人産業技術総合研究所・エレクトロニクス・製造領域・主任研究員

研究者番号：8 0 6 3 6 7 3 8

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 3,300,000 円

研究成果の概要（和文）：トランジスタをはじめとする半導体デバイスの挙動を計算機上に再現するデバイス・シミュレーションに対し、熱シミュレーションの正確度を高めるため、半導体では原子の集団運動、すなわち、フォノンが熱の主たる運び手であることに注目し、フォノンによる熱輸送のシミュレーション方法を検討した。そして、標準的なデバイス・シミュレーションの枠組みの中で実現する方法を考案し、フーリエの法則に基づく従来の方法よりも忠実にデバイスで起こる種々の熱関連現象をシミュレーションに反映できるようになった。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究は、フォノンによる熱輸送のシミュレーションを、標準的なデバイス・シミュレーションの枠組みに完全に適合する形で実現する方法を検討した初めての取り組みであった。考案した方法は標準的なデバイス・シミュレータに容易に実装できる。既に、研究代表者の所属機関で開発するデバイス・シミュレータ「Impulse TCAD」に実装しており、希望者は当該機関の所定の手続きを経れば使用することができる。

研究成果の概要（英文）：In order to improve the accuracy of thermal simulation by a device simulator, which reproduces the behavior of transistors and other semiconductor devices on a computer, we focused on the fact that the collective motion of atoms, or phonons, are the main heat carriers in semiconductors, and investigated methods to simulate the heat transport by phonons. We then successfully developed such a method, which can be easily implemented in standard device simulators and enables us to incorporate various thermal phenomena occurring in semiconductor devices into simulations more faithfully than Fourier's law-based conventional methods.

研究分野：半導体デバイス物理

キーワード：フォノン 熱輸送 熱伝導 半導体デバイス 熱電デバイス デバイスシミュレーション TCAD

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

1．研究開始当初の背景

今日の高度情報化社会を支える半導体集積回路は、スイッチング素子であるトランジスタを微細にして数多く集積することで高性能化、高機能化を実現してきた。しかし、トランジスタの密度が高まるにつれて発熱の密度も増し、熱による集積回路の性能や信頼性の低下があらわになった。そして、これを抑える熱設計の重要性が増し、正確度の高い熱シミュレーションが求められるようになった。トランジスタをはじめとするデバイスに対しては、デバイス・シミュレーションがその役目を負う。従来のデバイス・シミュレーションでは、熱伝導は専ら経験則であるフーリエの法則に従うものとされた。半導体では、多くの熱は原子の集団運動、すなわち、フォノンによって運ばれる。フーリエの法則が成り立つためには、フォノンの平均自由行程に対してデバイスが十分大きく、かつ、フォノンの緩和時間に対してデバイスが十分ゆっくり動いている必要がある。しかし、このような状況に今日のデバイスは無い。したがって、デバイスにおける熱伝導を正確にシミュレーションするには、フォノンの挙動をシミュレーションできなくてはならない。これをデバイス・シミュレーションの枠組みの中で実現するべく、本研究を実施するに至った。

2．研究の目的

デバイスの挙動を計算機上に再現することで、デバイスの研究から開発、量産までの各工程における経済的、時間的コストの削減を実現することがデバイス・シミュレーションには期待されている。したがって、デバイス・シミュレーションは高速でなくてはならない。そのためには、フォノンによる熱輸送に対し、枝葉を払い、本質を見極める必要がある。すなわち、フォノンの数あるモードのうち熱輸送を決めるものはどれか、関係する諸現象のうち考慮すべきは何か、これらの問いに取り組みながら、得られた知見を結集し、モデルとして形にすることが本研究の目的である。具体的な目標として次の二つを設定した。

（１）フォノンのモードはほとんど無数にあるので、計算機で扱うためには適当な数にまで集約する必要がある。扱うモードの数が少なくなればなるほど、シミュレーションは高速になるはずであるが、種々のフォノン物理、例えば、トランジスタで見られる十分加速されたキャリアから光学フォノンが放たれ、それが散乱によって音響フォノンになって周囲に伝わるといったようなことを表現できなくなるとは正確度を担保できない。そこで、モードをどのような規則によってどれだけ統合すればよいか、適切な集約方法を考案する。

（２）デバイスにおいてフォノン熱輸送を考慮すべき領域、例えば、トランジスタのチャネル部分は、従来はバルクであったが、最先端のものではフィンになっており、いずれナノシートやナノワイヤなどの低次元材料になると考えられている。低次元材料におけるフォノンは、界面において反射やモード変換を繰り返した結果、バルクにおけるフォノンとは異なる様相を呈する。そうしたフォノンを再現できれば、シミュレーションの正確度を格段に高められるはずである。そこで、その方法を考案する。

3．研究の方法

デバイス・シミュレーションの標準的な枠組み、すなわち、有限体積法によって方程式を離散化し、それをニュートン法によって解くという、この枠組みに適合するようにフォノン熱輸送の数値モデルを開発した。そして、研究代表者の所属機関で開発されるデバイス・シミュレータ「Impulse TCAD」にそのモデルを実装して種々のデバイスをシミュレーションし、モデルの妥当性および有効性を評価した。

（１）フォノン・モードの集約については、二つのモードの類似度を表す指標を考え、類似していると判定された複数のモードを一つのモードで表し直すことで実現した。そして、指標と最終的なモードの数を変えてシミュレーションを行い、適切な指標とモードの数を探った。

（２）低次元材料におけるフォノンの再現については、バルクにおけるフォノンとの違いを生む界面における反射やモード変換を表す境界条件を検討した。また、種々の方法によって得られる低次元材料におけるフォノンの情報を、三次元が基本であるデバイス・シミュレーションに直接反映させる方法についても検討した。

4．研究成果

フォノンの各モードに対し、温度を考え、基準となる温度との差から定まる余剰エネルギーが群速度に従ってデバイス中を伝搬するものとして熱輸送を定式化した。図1に示す Silicon-on-insulator (SOI) 電界効果トランジスタ (MOSFET) について発熱の様子をシミュレーションした

結果を図2および図3に示す。SOIにおける熱輸送についてのみフォノンによるものと考え、ほかの領域ではフーリエの法則にしたがうものとした。なお、SOIにおけるフォノンはバルクSiにおけるそれで近似し、音響フォノンについては100モードまで、光学フォノンについては78モードまで集約した。これは、SOIにおける熱輸送をシミュレーションするために178本の方程式を解いたことを意味する。集約前の各モードの群速度等は格子動力学法を用いて計算した。また、電流で生じる熱、いわゆるジュール熱は、一度すべてが光学フォノンに渡り、それから音響フォノンへの状態遷移で音響フォノンに渡るとした。この散乱過程の緩和時間は10psとした。関連して、音響フォノン間散乱の緩和時間は50ps、光学フォノン間散乱の緩和時間は10psとした。図3(a)の温度分布を見ると、ドレイン領域入口が高温になっており、ホット・スポットが形成されていることが分かる。SOIにおける熱輸送にもフーリエの法則を適用してみたところ、熱伝導率をどのように変えても、同様の温度分布を得ることはできなかった。ホット・スポットに注目すると、熱伝導率が高い場合にはそもそも形成されず、低い場合には形成されても輪郭がぼやけていた。これは、フーリエの法則では熱が過度に伝わってしまうことを示唆している。フォノンはモードごとに伝搬する方向と速さが決まっているため、熱伝導はより制限された、また、図3(b)および(c)に示されるように重層的なものになる。ゆえに、デバイスの正確な熱シミュレーションに向けては、フーリエの法則では不十分であり、フォノンが熱を運ぶという微視的描像に立脚してフォノンの伝搬からシミュレーションする必要があると結論できる。

(1) フォノン・モードを集約する際には、類似度の指標として二つのモードの群速度 v 、 w で定まる $|v-w|/\sqrt{|v||w|}$ を用い、小さな値を示す複数のモードをまとめて一つのモードにした。より単純な指標として $v \cdot w$ も考えられるが、この場合、近い方向に伝搬するモードがすべてまとめられ、全体的に群速度が小さくなってしまふ。熱伝導の時間発展をシミュレーションする場合、これは問題になる。そこで、群速度の大きさも類似度に反映した。なお、モード数を最終的にいくつまで減らしてよいのかについては、結論が得られなかった。Impulse TCADでは方程式をハード・コードしておらず、必要な時に記号的に生成している。これにより、ユーザーによる方程式の追加など、高い柔軟性を実現しているが、空間計算量が非常に多くなってしまふ。モード数を増やしてもシミュレーション結果がほとんど変わらなくなったとき、必要最小限のモード数を決められるが、その前に計算機の限界に達してしまふ。これについては今後の課題としたい。

(2) 低次元材料におけるフォノンを再現するため、モード変換を扱える境界条件を開発した。その境界条件では、あるモードが界面に運んだエネルギーに対し、どのモードがどれだけの割合運び出すのかを細かく指定できる。ただし、その割合を適切に決めなくてはならず、そのためには界面でのフォノンの入出射をシミュレーションする必要があるが、本研究の範囲を大きく越えるので、ここでは単純に鏡面反射するように設定した。なお、透過率を指定することもでき、フーリエの法則に従う領域と接続することができる。図4に、一辺100nmの正方形断面を持つ長さ1 μm のSiとSiO₂のナノワイヤを接続し、Si側の端を300Kに、SiO₂側の端を400Kにした場合の温度分布を示す。なお、SiO₂ナノワイヤにおける熱伝導はフーリエの法則に

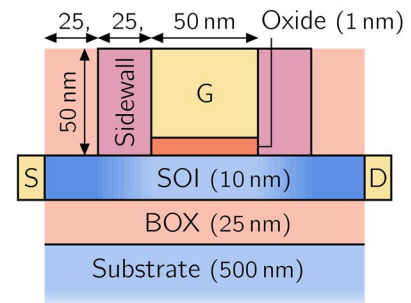


図1: SOI MOSFETの構造

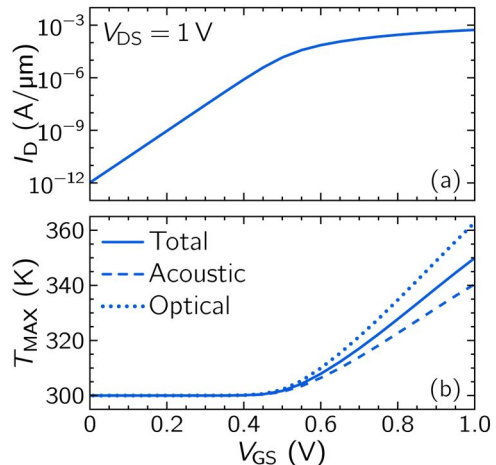


図2: (a) ドレイン電流、(b) SOIにおける最高温度のゲート電圧依存性。

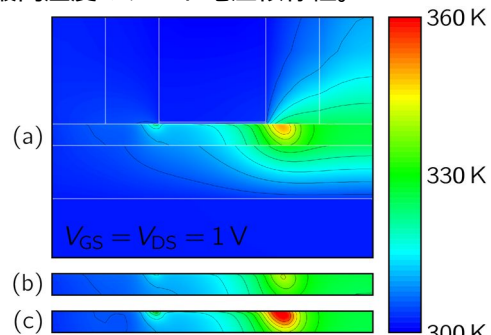


図3: (a) 温度分布、(b) 音響、(c) 光学フォノン温度のSOIにおける分布。

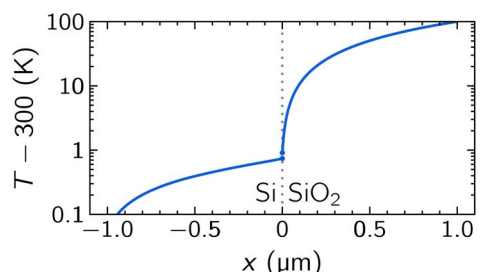


図4: Si/SiO₂ ナノワイヤの中心軸上の温度分布。

従うものとし、Si-SiO₂界面におけるフォノンの透過率は0.5とした。図から、異種材料界面で起こる温度の跳びを再現できていることが分かる。また、界面熱抵抗を計算したところ $1.518 \times 10^{-9} \text{m}^2\text{K/W}$ であり、第一原理計算の結果に近い値であった。これを受けて、前述の SOI MOSFET のシミュレーションでも、SOI と絶縁膜との界面におけるフォノン透過率は0.5にした。

低次元材料におけるフォノンの情報を三次元のフォノン熱輸送シミュレーションに直接反映させる方法についても検討した。簡単な方法としては、バルクにおけるフォノンを用いたままで各モードの群速度を一定割合減じるというものがある。これは、界面におけるモード変換で縦波フォノンと横波フォノンが混ざる結果、群速度が総じて落ち、また、その程度が概ね一定であるという事実に基づく。進んだ方法としては、低次元材料におけるフォノンの波動関数をバルクにおけるそれで展開するというものが考えられる。この方法の検証については、研究期間内に実施することができなかったため、今後の課題としたい。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計2件（うち査読付論文 2件／うち国際共著 0件／うちオープンアクセス 0件）

1. 著者名 Hattori Junichi、Ikegami Tsutomu、Fukuda Koichi	4. 巻 60
2. 論文標題 Technology computer-aided design simulation of phonon heat transport in semiconductor devices	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Japanese Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 SBBA03(1～7)
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.35848/1347-4065/abe3d4	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Hattori Junichi、Fukuda Koichi、Ikegami Tsutomu、Chang Wen Hsin	4. 巻 62
2. 論文標題 Temperature rise effects on static characteristics of complementary FETs with Si and Ge nanosheets	5. 発行年 2023年
3. 雑誌名 Japanese Journal of Applied Physics	6. 最初と最後の頁 SC1025(1～7)
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.35848/1347-4065/acae61	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計6件（うち招待講演 0件／うち国際学会 2件）

1. 発表者名 服部 淳一、池上 努、福田 浩一
2. 発表標題 フォノン熱輸送のTCADシミュレーションにおけるモード変換の実装方法の検討
3. 学会等名 第81回応用物理学会秋季学術講演会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 Hattori Junichi、Ikegami Tsutomu、Fukuda Koichi
2. 発表標題 TCAD Simulation of Phonon Thermal Transport in a Semiconductor Device
3. 学会等名 2020 International Conference on Solid State Devices and Materials (SSDM)（国際学会）
4. 発表年 2020年

1．発表者名 服部 淳一、池上 努、福田 浩一
2．発表標題 MOSFETにおける音響および光学フォノン輸送のTCADシミュレーション
3．学会等名 第68回応用物理学会春季学術講演会
4．発表年 2021年

1．発表者名 服部 淳一
2．発表標題 ひずみシリコン量子細線の熱輸送特性評価における熱浴寸法の影響
3．学会等名 第82回応用物理学会秋季学術講演会
4．発表年 2021年

1．発表者名 服部 淳一、福田 浩一、池上 努、張 文馨
2．発表標題 SiとGeナノシートを用いた相補型電界効果トランジスタの温度依存性
3．学会等名 第83回応用物理学会秋季学術講演会
4．発表年 2022年

1．発表者名 Hattori Junichi、Fukuda Koichi、Ikegami Tsutomu、Chang Wen Hsin
2．発表標題 Temperature Effects on Static Characteristics of Complementary Field Effect Transistors with Si and Ge Nanosheets
3．学会等名 2022 International Conference on Solid State Devices and Materials (SSDM) (国際学会)
4．発表年 2022年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

-

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
--	---------------------------	-----------------------	----

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------