

令和 元年 6 月 11 日現在

機関番号：82626

研究種目：若手研究(B)

研究期間：2016～2018

課題番号：16K18082

研究課題名（和文）ナノワイヤにおけるフォノン熱輸送とひずみの関係の原子論的解析

研究課題名（英文）Atomistic study of strain effects on phonon thermal transport in nanowires

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・研究員

研究者番号：80636738

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）：次世代トランジスタの要となる部材であるナノワイヤを対象に、原子の集団運動、すなわち、フォノンとそれによる熱輸送とを原子スケールで解析し、ひずみの影響を調査した。まず、長さ無限のナノワイヤについて調べると、その熱輸送能力は圧縮ひずみで向上し、一方、引っ張りひずみで低下することが明らかになった。次に、現実のナノワイヤを想定して長さ有限の場合について調べると、長さ無限の場合とは異なる結果を得た。その結果はナノワイヤの接続先の構造に強く依存しており、普遍的な結論を得るには更なる調査が必要である。

研究成果の学術的意義や社会的意義

本研究は、ナノワイヤにおけるフォノン熱輸送とひずみの関係を完全に明らかにしようとする初めての試みであった。結果、ナノワイヤの熱輸送能力はひずみによって変化する可能性があることが分かった。その傾向はナノワイヤの長さが無限の場合には明快であり、ひずみによる熱制御への道も開かれるかに思えたが、実際に即した長さが有限の場合には、ナノワイヤの接続先の構造によるところが大きく判然としなかった。しかし、この事実は、熱輸送の評価に適切な接続先の構造は何か、という重要な課題を浮かび上がらせた。

研究成果の概要（英文）：We studied the strain effects on phonons, which are quanta of atoms' collective motion, and their thermal transport in silicon nanowires using an atomistic approach. First, we investigated such effects for nanowires with an infinite length and found that a compressive strain improves the thermal transport capability of the nanowires while a tensile strain reduces it. Next, finite-length nanowires were investigated as a more realistic case. The phonon thermal transport in such nanowires shows different dependence on the strain than that in infinite-length nanowires, which strain dependence strongly depends on the structure of the heat baths connected to the nanowires. To reach a universal conclusion, we need further investigation.

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 ひずみ 応力 ナノワイヤ 量子細線

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、トランジスタをはじめとする構成素子（デバイス）を微細化し、数多く集積することによって性能を高めてきた。一方、デバイスの密度とともに発生する熱の密度が増すと、熱による回路の性能や信頼性の低下が顕著になり、これの回避あるいは軽減が設計上の重要な課題と位置づけられるようになった。適切な対策の確立に向けて、近年は、デバイスにおける熱の発生や輸送といった熱に関する諸現象に対する理解が進むことへの期待が高まりをみせている。なお、トランジスタの微細化の過程では、ひずみによってキャリア輸送能力を高める技術も生まれ、現在は標準的に利用されている。しかし、ひずみが熱輸送に与える影響については不明な点が多い。そこで、本研究の実施者（以下、実施者）は、次世代のトランジスタと目されるナノワイヤ・トランジスタにおいて電流路となるシリコン・ナノワイヤを取り上げ、ナノワイヤにおける熱輸送に与えるひずみの影響を調べた。すると、ナノワイヤの熱輸送能力がひずみによって変化することが分かり、これを受けて、熱輸送とひずみ、両者の関係をつぶさに解明するべく本研究を実施するに至った。

2．研究の目的

シリコンに代表される半導体では、熱の多くは原子の集団運動、すなわち、フォノンによって運ばれる。ナノワイヤは体積に対して表面積が大きく、表面においてフォノンが頻繁に散乱されるため、その熱輸送能力はバルクに比べて著しく低い。ナノワイヤ・トランジスタにおいてはさらに、熱はけの悪い絶縁体によって表面を覆われるため、ナノワイヤ・トランジスタは熱がこもりやすく、熱の影響を強く受けるのではないかと危惧されている。ナノワイヤ・トランジスタの将来性に加えてこうした事情もあって、ナノワイヤに対し確度の高い熱輸送シミュレーションが求められている。その実現に向けて本研究では、ナノワイヤにおけるフォノンによる熱輸送について、ひずみの影響を次の段階を踏んで解き明かしていくことを目指した。

(1) 無限長ナノワイヤにおける一様ひずみの影響

本研究に先立って実施者は、無限に長いナノワイヤに対し、軸に平行なひずみ（軸ひずみ）を一様に加えた場合についてフォノン熱輸送に現れる影響を調べている。そこで、軸に垂直なひずみ（断面ひずみ）の影響も調べて先行研究を完全なものとし、任意のひずみに対するフォノン熱輸送の応答を明らかにする。

(2) 有限長ナノワイヤにおける一様ひずみの影響

長さ無限の仮定は、ナノワイヤにおけるフォノン熱輸送の一般的性質を調べる目的では容認される仮定である。しかし、得られる知見が現実の長さ有限のナノワイヤにそのまま通用するとは限らない。そこで、有限長ナノワイヤについても、無限長ナノワイヤの場合と同様に、一様ひずみがフォノン熱輸送に与える影響を明らかにする。

(3) 一様ではない現実的なひずみの影響

最後に、ナノワイヤ・トランジスタを想定し、その中でナノワイヤに加わる非一様なひずみについて、フォノン熱輸送への影響を明らかにする。

なお、不本意ながら、本研究の実施期間内に(3)に取り組むことはできなかった。これについては今後の課題としたい。以下、(1)および(2)について報告を続ける。

3．研究の方法

ナノワイヤを含むナノ構造における物理現象に対しては、より大きな構造を対象に慣習的に使われてきた理論が通用しないことも多い。そこで本研究では、原子論に基づく手法をもってナノワイヤにおけるフォノン熱輸送を調べた。基本的な手順としては、まず、調査対象とする構造の原子モデルを作製し、次に、格子動力学法を用いてフォノン状態を計算する。すると、フォノンのエネルギーと波数の関係、すなわち、分散関係が分かる。分散関係からは、構造の端から端までフォノンがどのように伝わるかという情報が、透過係数として得られる。最後に、熱コンダクタンスや熱伝導率といった熱輸送能力を表す物理量を、Landauer 理論に従って分散関係や透過係数から計算することで、フォノン熱輸送を数値的に評価した。これは、先行研究にて採用した手法である。前述の目的を達成するためには、一連の手順に修正や改良を加える必要があった。その詳細について以下で説明する。

(1) 無限長ナノワイヤにおける一様ひずみの影響解明

この目標に向けては、断面ひずみの加わったナノワイヤの原子モデル作製法を新たに開発した。分散関係の計算に用いる格子動力学法は各原子に作用する力の和が0であることを要求す

るため、原子モデルの作製においてはこれを満たすように各原子の位置を調整する必要がある。この過程において、表面原子に人為的に力を加えることで断面ひずみをナノワイヤに導入した。ただし、加える力の向きや大きさの決定が難しく、原子再配置の進展に合わせて調整する必要もあり、適用できるのは対称性の高いナノワイヤに限られる。そこで、不動原子によって作製した型枠にナノワイヤをはめて原子位置を調整するという別の作製法も開発した。この作製法には、加えるひずみ量を事前に決められるという利点がある。

(2) 有限長ナノワイヤにおける一様ひずみの影響解明

長さが有限の場合、格子動力学法では構造の固有振動数が得られるだけで、そこから透過係数といったフォノンの輸送に関する情報を引き出すことはできない。そこで、非平衡グリーン関数法によって透過係数を計算した。

4. 研究成果

(1) 無限長ナノワイヤにおける一様ひずみの影響

断面を一辺約 3 nm の正方形とし、軸方位を[100]とする無限長シリコン・ナノワイヤについて、印加する断面ひずみを変えながら計算した熱コンダクタンスを図 1 に示す。これは、実施者の知る限り、ナノワイヤにおけるフォノン熱輸送に与える断面ひずみの影響を評価した初めての事例である。図の横軸は断面積の変化率を表しており、負の値が圧縮ひずみ、正の値が引っ張りひずみに対応する。図から、ナノワイヤの熱輸送能力は圧縮ひずみで向上し、引っ張りひずみで低下することが分かる。この傾向は、先行研究において軸ひずみの場合に見られた傾向と同じである。なお、図は型枠を用いて断面ひずみを印加した場合の結果であるが、表面に力を加えて印加した場合にも同様の結果が得られた。また、こうした変化の原因を探ると、直接の原因はフォノンの群速度にあると分かった。フォノン群速度は圧縮ひずみで上昇し、引っ張りひずみで低下しており、この変化がそのまま熱輸送能力に反映されている。

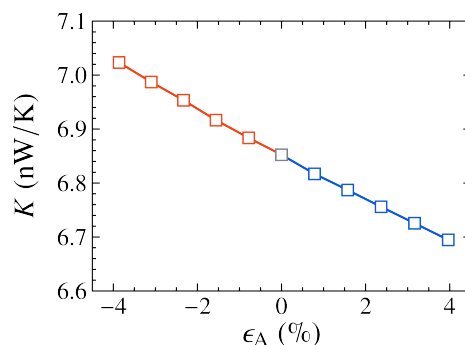


図 1：長さ無限のシリコン・ナノワイヤにおける熱コンダクタンスと断面ひずみの関係

(2) 有限長ナノワイヤにおける一様ひずみの影響

断面を一辺約 1 nm の正方形、軸方位を[100]、長さを約 2 nm とするシリコン・ナノワイヤについて評価した、熱コンダクタンスと軸ひずみの関係を図 2 に印で示す。同じ図には、長さ無限の場合の結果も × 印で示してある。両者を比べると、ひずみの影響は長さ有限の場合の方が大きいと分かる。また、長さ無限の場合には、圧縮ひずみによって熱輸送能力は向上するが、長さ有限の場合には、引っ張りひずみと同じく低下するという違いも認められる。これらの差異は、ナノワイヤが長くなるにつれて縮小していくと想像されるが、実際には拡大していった。長さ無限の場合の結果を再現するべく調べを進めた結果、ナノワイヤに接続する熱浴にもナノワイヤと同じひずみを印加することで再現できると分かった。これは、長さ無限の仮定が現実にはどのような状況を指しているのかを示す重要な発見である。同時にこれは、ナノワイヤの熱輸送能力が熱浴によって左右されることも示唆している。そこで、ナノワイヤと同じく一辺約 1 nm の正方形を断面としていた熱浴を大きくした上で、シリコン・ナノワイヤにおける熱コンダクタンスと軸ひずみの関係を調べると、図 3 に示す結果を得た。熱輸送能力は予想通り熱浴の大きさによって変化している。一方、ひずみの影響は熱浴が大きくなるとほとんど見えなくなっている。ナノワイヤ・トランジスタをはじめとするナノワイヤ・デバイスにおいて、熱浴に相当する部分は非常に大きいことから、この結果をもってフォノン熱輸送に与えるひずみの影響は現実には非常に小さいと結論することもできるが、熱浴の影響について更に調べを進める必要があると考える。これは今後の課題である。

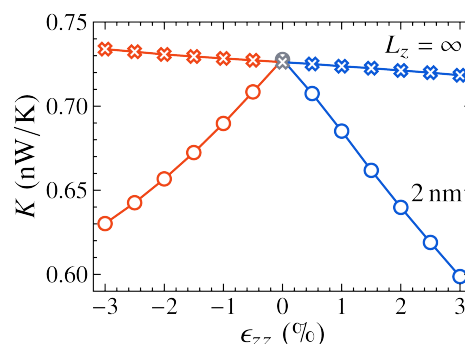


図 2：長さ (L_z) 約 2 nm のシリコン・ナノワイヤにおける熱コンダクタンスと軸ひずみの関係

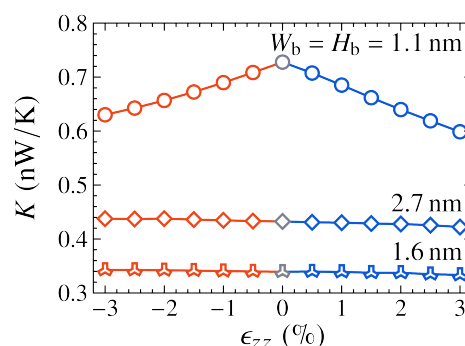


図 3：図 2 と同じ。ただし、熱浴の大きさ ($W_b \times H_b$) を変えて計算した

5 . 主な発表論文等

〔雑誌論文〕(計1件)

Vladimir Poborchii、森田 行則、服部 淳一、多田 哲也、Pavel I. Geshev、Corrugated Si nanowires with reduced thermal conductivity for wide-temperature-range thermoelectricity、Journal of Applied Physics、査読有、120 巻 15 号、2016 年 10 月、論文番号 154304。

〔学会発表〕(計7件)

服部 淳一、有限長シリコン量子細線における弾道的フォノン熱輸送に与えるひずみの影響、第 66 回応用物理学会春季学術講演会、2019 年 3 月。

服部 淳一、Vladimir Poborchii、多田 哲也、Acoustic phonon thermal transport in corrugated silicon nanowires、16th International Conference on Flow Dynamics (ICFD)、2018 年 11 月(招待講演)。

服部 淳一、シリコン量子細線における弾道的フォノン熱輸送に与える断面ひずみの影響、第 79 回応用物理学会秋季学術講演会、2018 年 9 月。

中島 佑太、内田 紀行、大石 佑治、町田 龍人、藤代 博記、服部 淳一、福田 浩一、前田 辰郎、ALD-Al₂O₃膜の熱輸送特性、第 65 回応用物理学会春季学術講演会、2018 年 3 月。

中島 佑太、内田 紀行、町田 龍人、藤代 博記、服部 淳一、福田 浩一、前田 辰郎、Ge デバイスに向けた熱輸送特性の評価、第 23 回電子デバイス界面テクノロジー研究会、2018 年 1 月。

中島 佑太、内田 紀行、町田 龍人、藤代 博記、服部 淳一、福田 浩一、前田 辰郎、NiGe/Ge コンタクト構造の熱輸送特性、第 78 回応用物理学会秋季学術講演会、2017 年 9 月。

服部 淳一、Vladimir Poborchii、多田 哲也、シリコン量子細線における音響フォノンによる弾道的熱輸送に与える波付け加工の影響、第 77 回応用物理学会秋季学術講演会、2016 年 9 月

〔その他〕(計2件)

服部 淳一、Vladimir Poborchii、多田 哲也、Acoustic phonon thermal transport in corrugated silicon nanowires、Proceedings of 16th International Conference on Flow Dynamics (ICFD)、2018 年 11 月、206 207 頁。

中島 佑太、内田 紀行、町田 龍人、藤代 博記、服部 淳一、福田 浩一、前田 辰郎、Ge デバイスに向けた熱輸送特性の評価、第 23 回電子デバイス界面テクノロジー研究会予稿集、2018 年 1 月、131 134 頁。