The University of Osaka
Institutional Knowledge Archive

Title	モンテカルロ法による半導体中の熱輸送シミュレーションに関する研究
Author(s)	久木田, 健太郎
Citation	大阪大学, 2014, 博士論文
Version Type	VoR
URL	https://doi.org/10.18910/34463
rights	
Note	

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

https://ir.library.osaka-u.ac.jp/

The University of Osaka

博士学位論文

モンテカルロ法による半導体中の
熱輸送シミュレーションに関する研究

久木田　健太郎

2014 年 1 月

大阪大学大学院工学研究科

内容梗概

本論文は，筆者が大阪大学大学院工学研究科電気電子情報工学専攻量子電子デバイス工学コース集積機能デバイス領域にて行ったモンテカルロ法による半導体中の熱輸送シミュレーションに関する研究の成果をまとめたものであり，以下の 5 章で構成されている．以下各章ごとの概要を述べる．

第 1 章

本章では，本研究の導入として研究背景，過去の研究動向，並びに熱輸送モンテカルロ(MC)法における課題と本研究の目的について述べる．

第 2 章

本章では，熱輸送 MC 法の物理モデルやアルゴリズムに関する基本概念を解説すると共に，熱伝導率解析に対し高効率化を実現する新規アルゴリズムの導入，並びに物理モデル高精度化を行った結果について述べる．従来の MC 法では長い棒形の構造を用い，有限温度差中の熱流を求めることで熱伝導率の計算を行っていたが，フォノン平均自由行程よりも十分に長い構造を想定しなければならないため計算負荷が大きいことが欠点であった．さらに，従来法では近似化したフォノン分散モデルが適用されていたため，輸送特性に対しパラメータ任意性が存在することが問題であった．

本研究では MC 粒子に対する重み付与を工夫することで，1 粒子法による熱伝導率の算出を可能とし，従来法と比較して計算時間を大幅に軽減することができた．さらに現実的フォノン分散関係を適用してフォノン速度やエネルギー分布といった情報に対しての不確定性を取り除くことで，物理モデルの高精度化を図った．本シミュレータを用いて薄膜シリコン(Si)および Si ナノワイヤにおける熱伝導率の解析を行ったところ，実験値を再現するためには拡散的な界面散乱を考慮する必要性があることが分かった．

第 3 章

本章では，2 章で開発した熱輸送 MC シミュレータを，単純 Si 構造中の温度分布解析へと応用し，微細構造中の熱輸送に関する基本特性を調べた結果について述べる．半導体デバイス内部の温度解析はこれまで熱伝導方程式や熱回路等，フーリエ則に基づくものが主流であったが，フォノンの平均自由行程よりも小さな構造中では，その法則適用の前提条件が破綻するため，精度が疑問視される．

本研究では，Si 棒の両端に温度一定の熱浴を設けその長さを様々に変化させることで，拡散から弾道へと変化する熱伝導機構の遷移過程を調べた．その結果，デバイス長がフォノン平均自由行程(室温では約 100 nm)を下回ると熱伝導は弾道的特性を示し，フーリエ則が破綻することがわかった．また，弾道輸送領域においては，熱輸送特性は構造サイズやフォノン平均自由行程に依存せず分散から与えられる情報によって決定されること，したがってその振る舞いを正確にシミュレーションするためにはフォノン分散モデルの精度が特に重要となることを示した．

第 4 章

本章では，熱輸送 MC シミュレータをナノスケールトランジスタの解析へと応用した結果について述べる．現実的なデバイス構造を考慮した温度解析には，現在でもフーリエ則に基づくシミュレータが広く用いられており，MC シミュレータの適用事例はこれまでほとんど報告されていなかった。今回開発した熱輸送 MC シミュレータを用いれば，実際のデバイス構造中において，3 章で述べたような弾道輸送効果がどの程度重要となるのかを把握することができる．

本研究では，解析対象としてバルク Fin Field Effect Transistor (FinFET)を取り上げ，その直流通電時の発熱特性を解析した．その結果，フーリエ則を用いた場合と比較して，MC 法はより高温のホットスポット出現を予測することが明らかになった．要因を分析したところ，熱経路の断面積が急激に拡張する領域において特に弾道輸送の影響が顕在化し，フーリエ則が熱抵抗を過小評価することを示した．

第 5 章

本章では，本論文で取り上げる各研究の成果についてまとめた．

目 次

第 1 章　序論 **1**
1.1　研究背景 1
1.1.1　ナノスケール MOSFET 1
1.1.2　微細デバイス中の熱伝導解析の現状と課題 3
1.1.3　モンテカルロ法による粒子輸送解析 6
1.2　本研究の位置づけと論文構成 7

第 2 章　フォノン輸送解析のための モンテカルロシミュレータの開発 **13**
2.1　はじめに 13
2.2　物理モデル 14
2.2.1　フォノン分散関係 14
2.2.2　フォノン状態密度と群速度の計算 17
2.2.3　比熱の計算 19
2.3　モンテカルロシミュレーション 21
2.3.1　モンテカルロ粒子の定義と初期状態決定 21
2.3.2　自由走行と散乱 24
2.3.3　熱伝導率の計算方法 27
2.4　熱伝導率のシミュレーション結果と考察 30
2.4.1　バルクシリコンの熱伝導率 30
2.4.2　シリコン薄膜の熱伝導率 33
2.4.3　シリコンナノワイヤの熱伝導率 38
2.4.4　フォノン分散関係の影響についての考察 41
2.5　まとめ 45

第 3 章　熱伝導に対する準弾道輸送効果の解析 **51**
3.1　はじめに 51
3.2　MC 法による熱伝導解析方法 53
3.2.1　温度分布の算出方法 53
3.2.2　熱浴槽の設定方法 54
3.2.3　熱源の作成方法 56
3.3　温度勾配下の熱伝導特性解析 58
3.3.1　拡散極限と弾道極限における解析解 58
3.3.2　シミュレーションの妥当性の確認 60
3.3.3　バルク Si における熱抵抗のサイズ依存性 62
3.3.4　薄膜 Si における熱抵抗のサイズ依存性 68

3.4 過渡応答熱伝導解析 70
3.4.1 シミュレーション構造 70
3.4.2 シミュレーション結果 71
3.5 まとめ 74

第 4 章 ナノスケールデバイスの熱特性解析 77
4.1 はじめに 77
4.2 FinFET における熱特性解析 79
4.2.1 シミュレーション構造 79
4.2.2 シミュレーション結果 80
4.2.3 フーリエ則と MC 法の計算結果に関する考察 83
4.2.4 今後の課題 89
4.3 まとめ 92

第 5 章 結論 95

付 録 A フーリエの法則と熱伝導方程式 99
A.1 フーリエの法則 99
A.2 熱伝導方程式の導出 100

付 録 B シミュレーションフロー 103

謝辞 107

研究業績 109

第1章　序論

1.1　研究背景

1.1.1　ナノスケール MOSFET

現在，パーソナルコンピュータを中心とする様々な電子機器には集積回路が用いられており，近年その進歩は著しい．集積回路の性能はチップに搭載される半導体デバイスの微細化・高集積化を行う事で向上させることができるため，これまで半導体デバイスの微細化が精力的に進められてきた．この半導体デバイスの中で最も代表なものとして知られているのが MOSFET (Metal Oxide Semiconductor Field Effect Transistor) である．図 1.1 にその代表的な構造を示す．これまで用いられてきた MOSFET は図 1.1(a) のような平面型バルク構造を有していたが，近年では微細化の進展に伴い，そのスケールは数十 nm オーダーになっている．ところが従来の平面型構造をこういった領域まで微細化すると，OFF 動作時のリーク電流が増大し，スイッチング特性が劣化する [1]．これはデバイスの縮小化に伴い閾値電圧が低下し，短チャネル効果が顕在化するためである．この現象はチャネル長縮小化に伴ってドレイン電界の影響力が増大することでドレイン領域における空乏層が拡大し，ソース領域の空乏層と接合することに起因しており，障壁低下効果 (Drain-Induced-Barrier-Lowering:DIBL) と呼ばれている．したがってゲート電極によるポテンシャル制御性は微細化に伴い，低下する [2]．

そのため，微細構造においてゲート電極によるスイッチング制御性を強化するため様々な方策が検討されてきた．その方法として現在注目を集めているのが図 1.1(b) に示すような UTB (Ultra Thin Body) -SOI(Silicon on Insulator) MOSFET [3] などの超薄膜構造や，Fin Field Effect Transistor (FinFET)，トライゲート等といった立体型構造 [4] の導入である．

従来型バルク構造では，短チャネル効果抑制のためチャネル中不純物濃度を高める方策が取られ

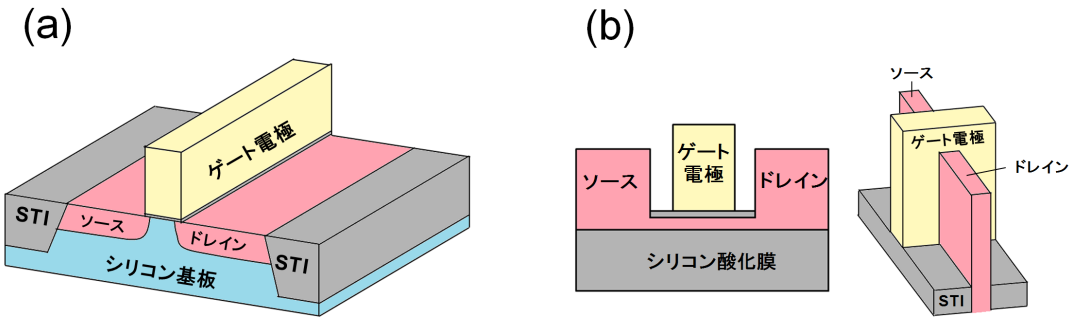

図 1.1: MOSFET デバイス構造．(a) 従来型バルク MOSFET．(b) 新構造 MOSFET．左に UTB-SOI MOSFET，右に FinFET を示す．図中 STI とは Shallow Tranch Isolation のことであり，素子分離のための絶縁膜である．

ていた．しかし，これはチャネル移動度の低下に繋がり，さらに不純物揺らぎによるしきい値電圧ばらつき等も増大させる [5]．そこで登場したのが UTB-SOI MOSFET である．このデバイスでは SOI 層厚により空乏層深さが決まるため，不純物濃度を上げることなく短チャネル効果を抑制し，リーク電流を低減することができる [6]．さらにこの薄膜チャネル中のキャリアを複数のゲートで制御する構造が FinFET やトライゲート等といった立体型構造である．これは薄膜構造を基板に垂直方向に配置し，さらにチャネルをゲートで包みこむことによりゲート制御性を高めた構造である．シングルゲート構造 MOSFET と比較すると短チャネル効果耐性が高く，加えてチャネルの無ドープ化 [7] が可能であることから，より微細化に適した構造として導入が期待され，すでに 2012 年，プロセッサ向けに実用化された [8]．さらに数ナノメートル領域のデバイスの微細化を目指すべく，GAA(Gate All Around) やナノワイヤ等といった構造の導入 [9,10] も将来的に検討されているところである．

ところが上述のような新構造 MOSFET は従来と比較すると熱伝導性の悪い材料に囲まれた構造を有しており，さらにチャネルが非常に薄いために，内部で発生したジュール熱が基板へと散逸しにくい．さらに，このようなナノ構造においてはソースからの注入電子はチャネル中で散乱を受けることなく高エネルギーを維持したままドレイン端まで到達する．このため，局所的に熱がこもることで格子温度の上昇が起こりやすくなり，いわゆるホットスポットと呼ばれる高温域がデバイス内に形成される．これが自己発熱効果と呼ばれる現象である．こうした格子温度の上昇は電子-フォノン散乱を促進させることから，チャネル移動度の低下をもたらすことが懸念される [11,12]．図 1.2 に示すように微細化の進展に伴い，デバイスのドレイン領域に形成されるホットスポットでの発熱密度の値は年々指数関数的に増加しており，近年では 10 TW/cm^3 以上に達しているとの見積りがある [11,13,14]．したがってデバイス内部で生成される熱をどのように排出するのかが今後重要な課題となる．

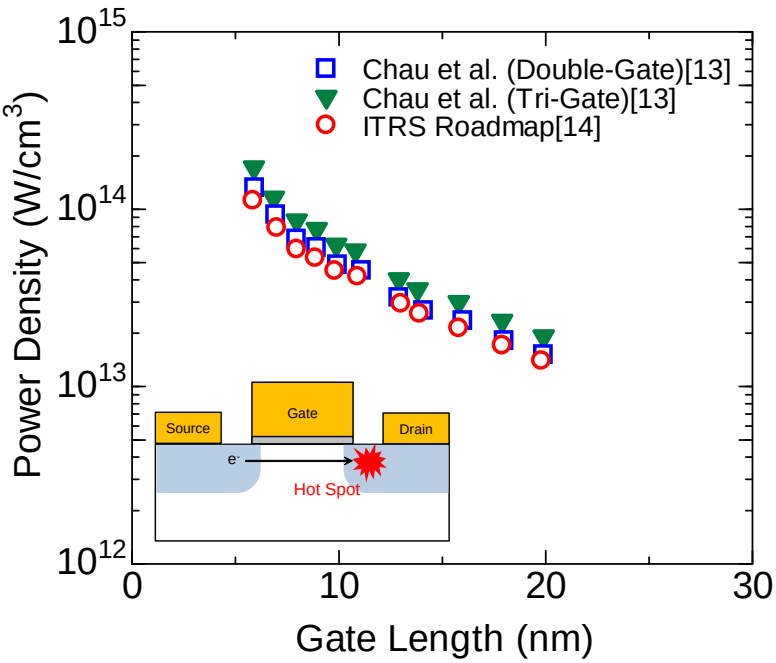

図 1.2: 定常電流によりドレイン内部に発生するホットスポットの発熱密度．ゲート長微細化に伴う理論予測値 [13,14] を示した．

一方，熱伝導特性を正確に把握することは熱電変換材料の分野においてもまた重要である．熱電変換材料では材料素子の両端に温度差を与えることで温度勾配と電界が相互変換されるゼーベック効果やペルチェ効果を利用する．この時，熱電変換効率の高さを表す熱電性能指数は材料の持つゼーベック係数と電気伝導率に比例する一方，熱伝導率には逆比例する．一般的にゼーベック係数が高い材料ほど電気伝導率が低く，この両者はトレードオフの関係にあることが知られている．そのため，熱電性能指数を向上させる試みは，素子の熱伝導率を低減させる手法によるものがもっぱらである [15]．最近ではナノ構造を利用して電気伝導性を維持しつつ選択的に熱伝導率を低下させることにより，高性能指数を有す熱電変換素子を目指す試みが行われている．特にシリコン (Si) 量子細線による高熱電性材料の実現 [16,17] は，集積回路との親和性との観点から最も着目されている分野の一つである．例えばこれをチップ上に形成することでペルチェ冷却を行い，回路が生成した熱を除去するという応用が期待できる．

1.1.2 微細デバイス中の熱伝導解析の現状と課題

新構造 MOSFET の短チャネル効果による電流電圧特性への影響については多くの詳細な研究が報告されている [1,3,4]．一方で，熱伝導特性についてはほとんど調べられていないのが現状である．こうしたナノデバイス構造中の温度分布を直接的に測定することは大変困難であるため，デバイスの熱伝導特性を高精度に予測する熱伝播シミュレーションが特に重要となってくる．表 1.1 に代表的な熱伝搬解析手法とその特徴についてまとめた．これまでデバイス構造中の熱伝導特性解析に主として用いられてきた方法は，熱伝導方程式や熱回路モデルに基づくものであった [18–20]．これらはフーリエ則と呼ばれる熱伝導の基本法則に立脚したもので，物体内に温度差があるとき，高温域から低温域へと伝わる熱の流束はその箇所の温度勾配に比例すると仮定されてきた．ところがこれはマクロな視点において熱流を現象論的に記述した手法であるため，熱を格子振動という観点で捉えた際の物理的精度には疑問が生じる．しかしながら，これらの解析を行うのに必要な計算負荷は軽く，対象とする構造を現実的デバイススケールへ拡張しやすいという利点を持っていた．

一方で，熱伝導解析の精度を最も高めた手法の１つとして分子動力学法が挙げられる [21]．これはニュートン力学に基づいて原子ひとつひとつの位置や運動を解く手法であり，第一原理的に熱伝導を取り扱うことができる．この手法は高精度な解析が見込める一方で，解析に必要とされる計算負荷が非常に重いため，膨大な計算時間を必要とする．そのため解析対象である構造を拡張しにくく，現在は数 nm スケールのナノ構造領域に解析対象が限られている [22]．

現在精力的に開発が行われている FinFET や UTB-SOI MOSFET で十分なゲート制御性を保つため求められるボディ膜厚はそれぞれ L_g，$L_g/3$ 程度 (L_g はゲート長) であるといわれている [23]．したがって，これらのデバイスがターゲットとする L_g を考えると，数 10 nm 以下の極めて薄い Si 中の熱伝導を取り扱うことがシミュレーションに求められる．熱伝導解析の精度の重要性を議論するため，実際にフーリエ則により解析を行った例を示す．図 1.3 に示す UTB-SOI MOSFET 構造

表 1.1: 代表的な熱伝搬解析手法の種類と特徴

	熱伝導方程式 (フーリエ則)	分子動力学法
手法	偏微分方程式を有限要素法で解く	多体系の運動方程式を数値積分で解く
長所	計算負荷が軽い	物理的に高精度な解析が可能
短所	微細領域の解析精度が悪い	計算負荷が重い

を想定し，内部の自己発熱効果を文献 [18] で示された熱回路解析手法に従い簡易的に見積もった．境界条件としてソース (S)，ドレイン (D)，ゲート (G) 電極，および Si 基板を温度一定の熱浴と仮定，チャネルのドレイン端近傍を熱の発生源として素子内部の最大温度上昇 ΔT を求めた．解析結果を図 1.4 に示す．Si ボディ膜厚 t_{si} が薄くなるに従って自己発熱効果の影響が顕著に現れていることがわかる．なおここでは熱伝導率 κ としてバルク Si に対する値 (150 $\mathrm{Wm^{-1}K^{-1}}$) のほか，図 1.5 に示す膜厚依存性を考慮した Si 無限平板に対するモデル式 [24, 25] を用いた場合を比較した．

薄膜領域における自己発熱効果の影響は単に熱伝導経路の断面積減少による熱抵抗の上昇に起因するのみではなく，κ 低下の影響を強く受け，またその予測値は κ に対するモデル選択にも大きく依存することが着目すべき点である．このように薄膜領域に発生するホットスポットの温度見積もりは未だ不確定性が強く，デバイスの性能信頼性予測に与える影響は無視できない．

特に最新の UTB-MOSFET や FinFET などの新構造デバイスにおいてはゲート長 20 nm 以下の微細化を目指していることから，自己発熱効果の影響を予測する際に高精度な κ の値を用いることが極めて重要となる．しかし，図 1.5 に示す通り薄膜 Si における κ 実測値に対する報告 [26–29] は $t_{\mathrm{si}} > 20$ nm の領域に限られており，ナノデバイスで使用される超薄膜域での熱伝導特性については未だ不明な点が多いのが実状である．

系のサイズの縮小化に伴う κ の低減はフォノンと界面が衝突する，いわゆるフォノン-界面散乱の影響が顕在化することに起因する．このフォノン-界面散乱に関する研究は解明されていない点が多く未発展な分野である．これまでフォノン-界面散乱に対しスネルの法則に従う反射と等価を利用した Acoustic Mismatch Model [30] や，フォノンの方向性を無視して拡散的界面を経験的に取り扱う Diffusive Mismatch Model [31] 等といったモデルが提案されてきたが，いずれも現象論的モデルであり，界面散乱機構の本質的な理解には程遠い．

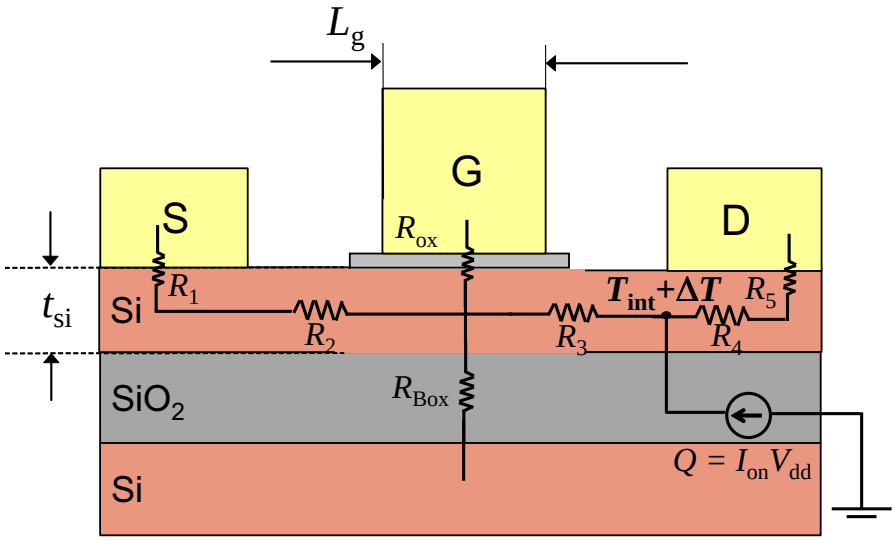

図 1.3: UTB-SOI MOSFET の断面図と自己発熱効果を解析するための等価熱回路モデル [18]．t_{Si} は Si ボディ膜厚，L_{g} はゲート長，R_{ox} はゲート酸化膜，R_{Box} は Si-BOX 層，R_1〜R_5 は Si ボディ膜厚における各部の熱抵抗値，T_{int} は初期条件として与えたドレイン端の温度，ΔT は温度上昇値を示している．

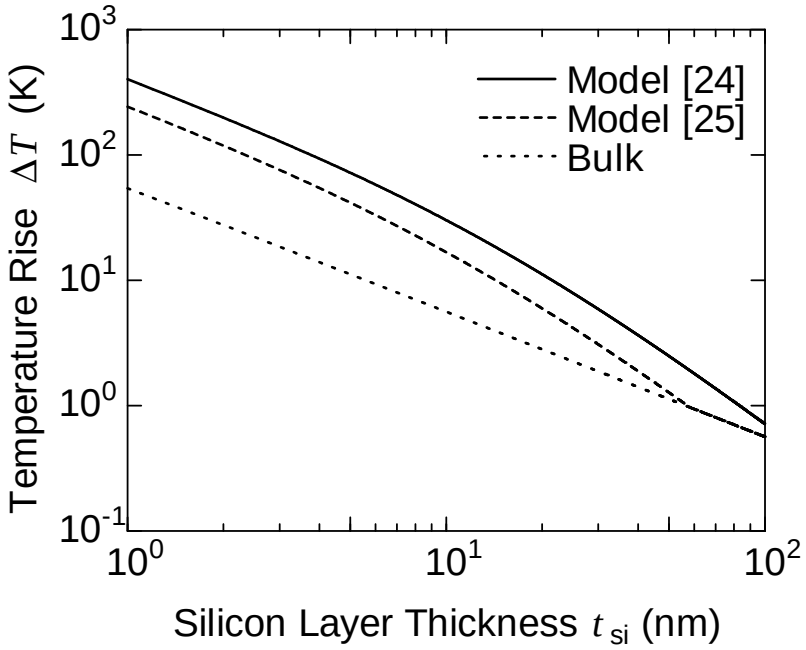

図 1.4: UTB-SOI MOSFET デバイス内部における最大温度上昇の Si 膜厚依存性の解析結果．Si ボディにおける熱伝導率 κ は Si 無限平板に対するモデル [24, 25] を用いた．

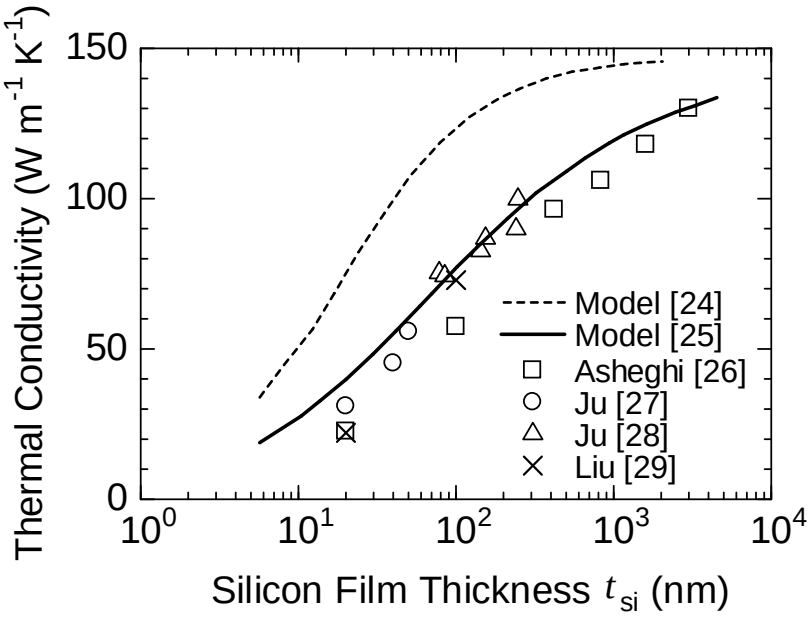

図 1.5: 薄膜 Si における熱伝導率 κ のモデル式 [24, 25] と実験値 [26–29] ととの比較．

1.1.3 モンテカルロ法による粒子輸送解析

以上に述べたような熱解析を現実的デバイススケールにおいて実施するため，本研究では高精度な熱伝播解析を実現する計算手法に着目した．ボルツマン輸送方程式によるフォノン輸送解析は分子動力学法ほどの計算負荷を必要としないため対象とする構造を現実的スケールへと拡張することが容易であり，さらにフォノンの運動に関する様々な物理機構を組み込みやすいことから解析精度を高めやすい．故に精度と拡張性の兼ね合いより，実用性に期待が持てる熱伝搬解析手法と言える．このボルツマン輸送方程式を直接解く手法にモンテカルロ (MC) 法がある．

MC 法とは，乱数を用いてシミュレーションを多数試行することにより，統計的に近似解を得る手法の総称のことである．図 1.6 に，応用例の 1 つである粒子 MC シミュレーションの概念図を示す．ある時間間隔において粒子の持つ物理量，例えば運動方向，走行時間，エネルギー等といった情報を所望の確率分布関数に従って乱数で決定し付与していく．さらに，これを繰り返すことにより粒子のランダムな振る舞いを時間的に追跡する．このようにして統計的平均値より輸送特性を算出することができる．この MC 法による粒子シミュレーションは古くはまず初めに Ulam, Neumann らにより原爆開発計画の中で，核分裂性物質中の中性子拡散の様子を調べるために発明された [32]．1966 年，MC 法は Kurosawa により半導体中の電子輸送へと初めて応用された [33]．この電子輸送 MC シミュレーションは，実空間と共に運動量空間においても電子の追跡を行い，外場からの力による自由走行，並びに散乱による運動量変化の繰り返しでキャリア運動を記述したものである．その後，1976 年 Jacoboni により分子動力学法との結合 [34]，さらに Shichijo と Hess による現実的エネルギーバンド構造の組み込み等 [35] 様々な高精度化が施され，キャリア輸送の分野で非常に有用な解析手法となり発展を遂げている．一方で，粒子 MC シミュレーションの熱輸送への応用は 1994 年の Peterson の研究に端を発する比較的新しい領域である [36]．微細化に伴いナノスケールデバイスの熱伝搬特性への関心は高まってきており，今後その有用性が高まる事が考えられる．

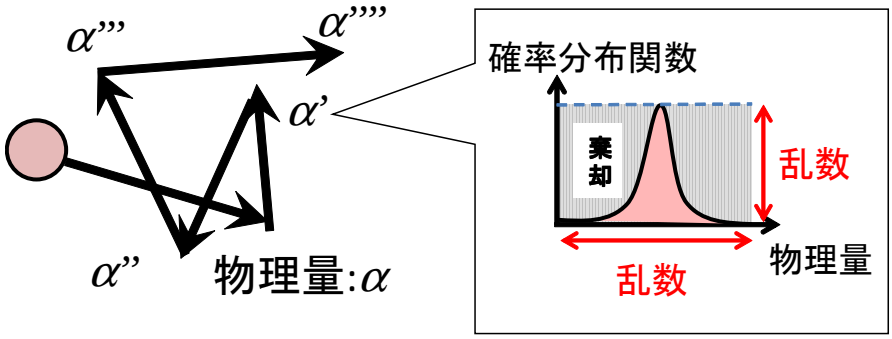

図 1.6: MC 法による粒子シミュレーションの概念図．任意の確率分布関数により付与された物理量によりある時間間隔における粒子の挙動を決定する．

1.2 本研究の位置づけと論文構成

本論文は，筆者が大阪大学工学研究科電気電子情報工学専攻集積機能デバイス領域博士後期課程所属時に行った，MC 法による半導体中の熱輸送シミュレーションに関する一連の研究成果 [37–40] をまとめたものである．

MOSFET のさらなる微細化に向け，新構造の導入と共にその熱特性への関心が高まっていることは先述の通りである．その際，現実的スケールにおいて高精度な解析を実現する手法として熱輸送 MC シミュレーション (図 1.7) によるボルツマン輸送方程式を直接解く手法が有望視されるが，一方で熱輸送 MC 法は歴史が浅く未発達な分野であり，次のような課題を抱えていた．まず熱伝導率等，材料における熱拡散輸送特性を表す物理量の計算に対して，図 1.7(a) のような構造を仮定することが多いが，高/低温領域間の距離を十分確保する必要があるため，多大な計算時間を要した．また，図 1.7(b) に示すようにフォノン分散モデルに対し結晶方位 ⟨100⟩ のみを考慮した近似化が施されていたため [41]，輸送特性に対しパラメータ任意性が存在することが問題であった．さらに，その用途は現実的デバイス構造ではなく例えば図 1.7(a) に示したような棒形の単純構造のみの温度解析に限定されていたため，MC 法が持つ高い構造任意性を活かしたシミュレーションがなされていなかった．

図 1.8 に論文構成を示す．本研究では上述の過去の熱輸送 MC が抱える諸問題に対して，次のようにして解決を試みた．まず，熱伝導率解析に対し，新たに一粒子法を適用することで計算時間の軽減を行った．次にフォノン分散関係に対し高精度なモデルを適用し，薄膜，ナノワイヤ構造における熱伝導率の計算を行った．(2 章) [37,38]．さらに温度解析へと応用し，微細構造中の熱輸送に関する基本特性を調べ，高精度な分散モデルの必要性について検証した (3 章) [39]．最後に単純構造への用途に限られていたシミュレータを現実的デバイス構造へと拡張し，熱伝導特性の解析を行った (4 章) [40]． 5 章では結論と題して各章での研究成果についてまとめ，さらに今後の研究課題を述べた．

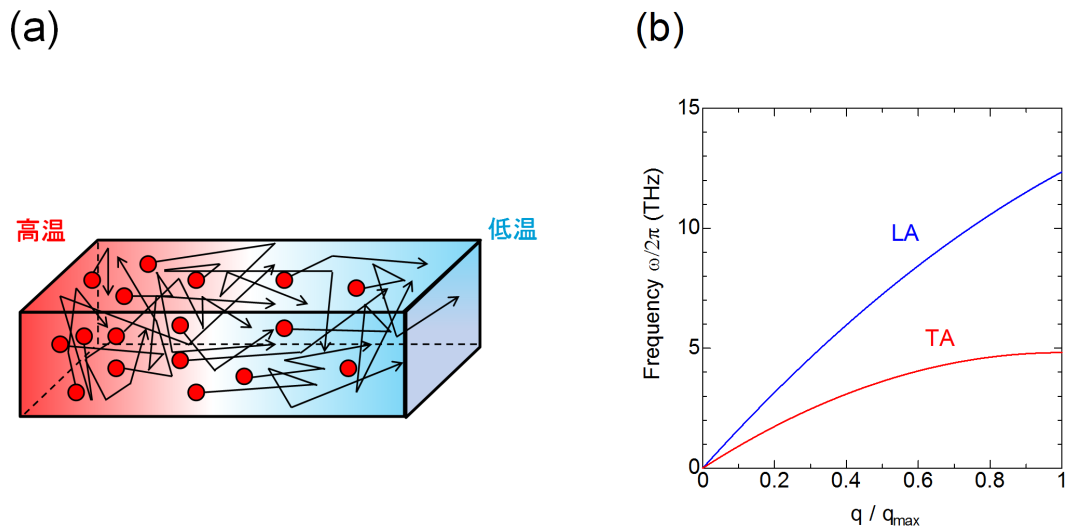

図 1.7: 熱輸送 MC 法の概要．(a) 温度勾配を与えた棒形構造内部の熱を運ぶ粒子 (フォノン) の挙動解析の概念図．(b) 結晶方位 ⟨100⟩ に対する縦波音響 (LA)，横波音響 (TA) モードに対するフォノン分散関係 [41]．$q_{\max}$ は Si 第 1 ブリルアンゾーンにおける最大フォノン波数，q はゾーン内の任意の波数を示す．

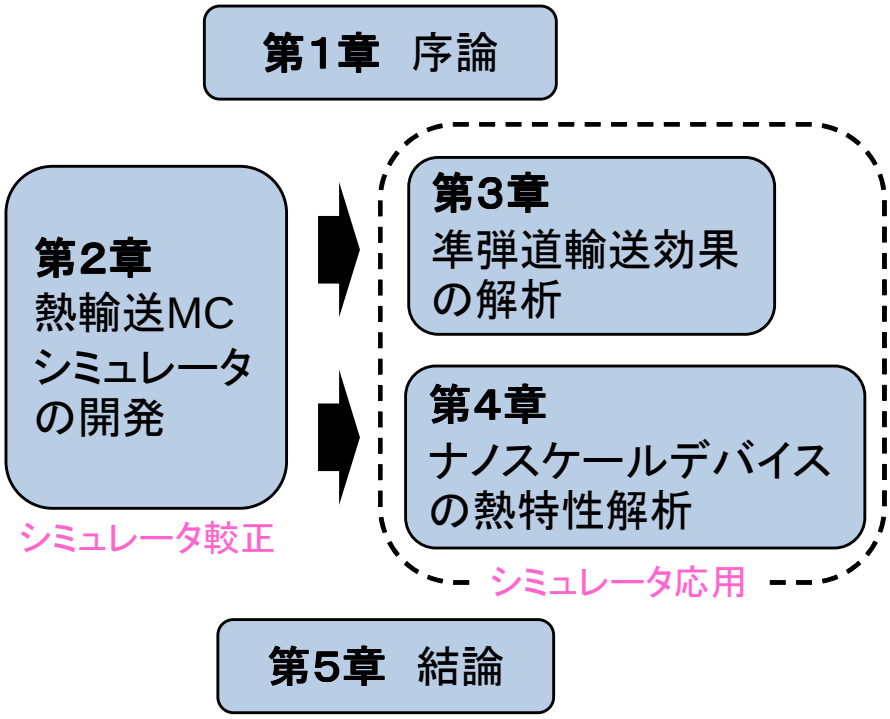
第1章　序論
第2章
熱輸送MC
シミュレータ
の開発
シミュレータ較正
第3章
準弾道輸送効果
の解析
第4章
ナノスケールデバイス
の熱特性解析
シミュレータ応用
第5章　結論

図 1.8: 論文構成.

参考文献

[1] V. Subramanian, B. Parvais, J. Borremans, A. Mercha, D. Linten, P. Wambacq, J. Loo, M. Dehan, N. Collaert, S. Kubicek, R. J. P. Lander, J. C. Hooker, F. N. Cubaynes, S. Donnay, M. Jurczak, G. Groeseneken, W. Sansen, and S. Decoutere, " Device and circuit-level analog performance trade-offs: a comparative study of planar bulk FETs versus FinFETs, "IEDM Tech. Digest 2005, 36.5.

[2] C. C. Hu, *Modern Semiconductor Devices for Integrated Circuits* (Pearson; International, London, 2009).

[3] Y. K. Choi, K. Asano, N. Lindert, V. Subramanian, T. J. King, J. Bokor, and C. Hu, " Ultra-thin body SOI MOSFET for deep-sub-tenth micron era, "IEDM Tech. Digest 1999, 3.7.

[4] D. Hisamoto, W. C. Lee, J. Kedzierski, H. Takeuchi, K. Asano, C. Kuo, E. Anderson, T. J. King, J. Bokor, and C. Hu, " FinFET-a self-aligned double-gate MOSFET scalable to 20 nm, "IEEE Trans. Electron Devices **47**, 2320 (2000).

[5] Y. Taur and T. G. Ning, *Fundamentals of Modern VLSI Devices* (Cambridge University Press, Cambridge, 2013).

[6] L. Chang, K. J. Yang, Y.-C. Yeo, Y.-K. Choi, T.-J. King, and C. Hu, " Reduction of direct-tunneling gate leakage current in double-gate and ultra-thin body MOSFETs, "IEDM Tech. Digest 2001, 5.2.

[7] Y. X. Liu, K. Endo, S. O'uchi, T. Kamei, J. Tsukada, H. Yamauchi, Y. Ishikawa, T. Hayashida, K. Sakamoto, T. Matsukawa, A. Ogura, M. Masahara, " On the gate-stack origin threshold voltage variability in scaled FinFETs and multi-FinFETs, "VLSI Tech. Digest 2010, 101.

[8] C. Auth, C. Allen, A. Blattner, D. Bergstrom, M. Brazier, M. Bost, M. Buehler, V. Chikarmane, T. Ghani, T. Glassman, R. Grover, W. Han, D. Hanken, M. Hattendorf, P. Hentges, R. Heussner, J. Hicks*, D. Ingerly, P. Jain, S. Jaloviar, R. James, D. Jones, J. Jopling, S. Joshi, C. Kenyon, H. Liu, R. McFadden, B. McIntyre, J. Neirynck, C. Parker, L. Pipes, I. Post, S. Pradhan, M. Prince, S. Ramey, T. Reynolds, J. Roesler, J. Sandford, J. Seiple, P. Smith, C. Thomas, D. Towner, T. Troeger, C. Weber, P. Yashar, K. Zawadzki, and K. Mistry, " A 22nm High Performance and Low-Power CMOS Technology Featuring Fully-Depleted Tri-Gate Transistors, Self-Aligned Contacts and High Density MIM Capacitors, " VLSI Tech. Digest 2012, 131.

[9] N. Singh, A. Agarwal, L. K. Bera, T. Y. Liow, R. Yang, S. C. Rustagi, C. H. Tung, R. Kumar, G. Q. Lo, N. Balasubramanian, and D. L. Kwong,“ High-Performance Fully Depleted Silicon Nanowire (Diameter ¡ 5 nm) Gate-All-Around CMOS Devices, ”IEEE Electron. Dev. Lett. **90**, 233110 (2007).

[10] H. Minari, T. Zushi, T. Watanabe, Y. Kamakura, S. Uno, and N. Mori,“ Impact of oxidation induced atomic disorder in narrow Si nanowires on transistor performance, ”VLSI Tech. Digest 2011, 122.

[11] J. A. Rowlette, and K. E. Goodson,“ Fully Coupled Nonequilibrium Electron-Phonon Transport in Nanometer-Scale Silicon FETs, ”IEEE Trans. Electron Devices **55**, 220 (2008).

[12] R. Wang, J. Zhuge, C. Liu, R. Huang, D.-W. Kim, D. Park, Y. Wang,“ Experimental Study on Quasi-Ballistic Transport in Silicon Nanowire Transistors and the Impact of Self-Heating Effects, ”IEDM Tech. Digest 2008, 31.3.

[13] R. Chau, B. Doyle, M. Doczy, S. Datta, S. Hareland, B. Jin, J. Kavalieros, and M. Metz, “ Silicon nano-transistors and breaking the 10 nm physical gate length barrier, ”Proc. IEEE Device Res. Conf. 2003, 123.

[14] International Technology Roadmap for Semiconductors (ITRS) 2005 Update, 2005. [Online]. Available: http://www.itrs.net/Links/2005ITRS/Home2005.htm

[15] W. Kim, J. Zide, A. Gossard, D. Klenov, S. Stemmer, A. Shakouri, and A. Majumdar, “ Thermal Conductivity Reduction and Thermoelectric Figure of Merit Increase by Embedding Nanoparticles in Crystalline Semiconductors, ”Phys. Rev. Lett. **96**, 045901 (2006).

[16] A. I. Boukai, Y. Buninovich, J. Tahir-Kheli, J.-K. Yu, W. A. Goddard III, and J. R. Heath, “ Silicon nanowires as efficient thermoelectric materials, ”Nature **451**, 168 (2008).

[17] A. I. Hochbaum, R. Chen, R. D. Delgado, W. Liang, E. C. Garnett, M. Najarian, A. Majumdar, and P. Yang,“ Enhanced thermoelectric performance of rough silicon nanowires, ” Nature **451**, 168 (2008).

[18] E. Pop, R. Dutton, and K. Goodson,“ Thermal Analysis of Ultra-Thin Body Device Scaling, ” IEDM Tech. Digest 2003, 36.6.

[19] C. Fiegna, Y. Yang, E. Sangiorgi, and A. G. O'Neill, “ Analysis of Self-Heating Effects in Ultrathin-Body SOI MOSFETs by Device Simulation, ”IEEE Trans. Electron Devices **55**, 233 (2008).

[20] T. Takahashi, N. Beppu, K. Chen, S. Oda, and K. Uchida,“ Thermal-Aware Device Design of Nanoscale Bulk/SOI FinFETs: Suppression of Operation Temperature and Its Variability, ” IEDM Tech. Digest 2011, 34.6.

[21] X. L. Feng, “ Molecular dynamics simulation of thermal conductivity of nanoscale thin silicon films, ”Microscale thermophysical engineering **7**, 153 (2003).

[22] T. Zushi, Y. Kamakura, K. Taniguchi, I. Ohdomari, and T. Watanabe,“ Molecular Dynamics Simulation of Heat Transport in Silicon Nano-structures Covered with Oxide Films, ”Jpn. J. Appl. Phys. **49**, 04DN08 (2010).

[23] J.-P. Colinge, *FinFETs and Other Multi-Gate Transistors* (Springer, Berlin, 2007).

[24] A. Majumdar, “ Microscale Heat Conduction in Dielectric Thin Films, ”ASME J. Heat Trans. **115**, 7 (1993).

[25] A. J. H. McGaughey, E. S. Landry, D. P. Sellan, and C. H. Amon, “ Size-dependent model for thin film and nanowire thermal conductivity, ”Appl. Phys. Lett. **99**, 131904 (2011).

[26] M. Asheghi, M. N. Touzelbeav, K. E. Goodson, Y. K. Leung, and S. S. Wong,“ Temperature-Dependent Thermal Conductivity of Single-Crystal Silicon Layers in SOI Substrates, ”ASME J. Heat Trans. **120**, 30 (1998).

[27] Y. S. Ju “ Phonon heat transport in silicon nanostructures, ”Appl. Phys. Lett. **87**, 153106 (2005).

[28] Y. S. Ju, and K. E. Goodson, “ Phonon scattering in silicon films with thickness of order 100 nm, ”Appl. Phys. Lett. **74**, 3005 (1999).

[29] W. Liu, and M. Asheghi, “ Phonon-boundary scattering in ultrathin single-crystal silicon layers, ”Appl. Phys. Lett. **84**, 3819 (2004).

[30] R. E. Peterson and A. C. Anderson, “ Acoustic-mismatch model of the Kaptiza resistance, ” Phys. Lett. A **31**, 317 (1972).

[31] P. Reddy, K. Castelino, and A. Majumdar, “ Diffuse mismatch model of thermal boundary conductance using exact phonon dispersion, ”Appl. Phys. Lett. **87**, 211908, (2005).

[32] N. Metropolis, and S. Ulam,“ The monte carlo method, ”J. American Statistical Association **44**, 335 (1949).

[33] T. Kurosawa, Proc. 8th Int. Conf. Phys. of Semiconductors 1966, Kyoto.

[34] C. Jacoboni, Proc. 13th Int. Conf. Phys. of Semiconductors 1976, Roma.

[35] H. Shichijo and K. Hess, “ Band-structure-dependent transport and impact ionization in GaAs, ”Phys. Rev. B **23**, 4197 (1981).

[36] R, B. Peterson,“ Direct Simulation of Phonon-Mediated Heat Transfer in a Debye Crystal, ” ASME J. Heat Trans. **116**, 815 (1994).

[37] K. Kukita and Y. Kamakura, “ Monte Carlo simulation of phonon transport in silicon including a realistic dispersion relation, ”J. Appl. Phys. **114**, 154312 (2013).

[38] K. Kukita, I. N. Adisusilo, and Y. Kamakura, “ Monte Carlo Simulation of Thermal Conduction in Silicon Nanowires Including Realistic Phonon Dispersion Relation, ”Jpn. J. Appl. Phys. **53**, 015001 (2014).

[39] K. Kukita, I. N. Adisusilo, and Y. Kamakura, " Monte Carlo simulation of diffusive-to-ballistic transition in phonon transport, "J. Comput. Electr. publised online. DOI:10.1007/s10825-013-0511-6

[40] K. Kukita, I. N. Adisusilo, and Y. Kamakura, " Impact of quasi-ballistic phonon transport on thermal properties in nanoscale devices: A Monte Carlo approach, "IEDM Tech. Digest 2012, 17.5.

[41] S. Mazumder, and A. Majumdar, " Monte Carlo Study of Phonon Transport in Solid Thin Films Including Dispersion and Polarization, "ASME J. Heat Trans. **123**, 749 (2001).

第2章　フォノン輸送解析のための モンテカルロシミュレータの開発

2.1　はじめに

材料の熱伝導特性を表す指標として熱伝導率 κ があり，これは単位温度勾配中を単位断面積あたり通過する単位時間あたりの熱の流れとして定義されるものである．本研究では，まずこの熱伝導に関する基本物理量のシミュレーションについて検討を行った．熱伝搬解析を行う第一原理的手法として分子動力学法が挙げられ，フォノンの分散関係の影響や異種材料間の界面における熱伝導機構が厳密に組み込まれることが利点である [1]．しかし一方で，κ 等の材料の熱拡散特性解析を行うには，熱の拡散方向に対し十分に大きい構造を設ける必要があるため，大きな計算時間を要する難点があった．

そこで本研究では熱拡散特性の解析に MC 法を用いた．本手法を用いる利点を列挙すると，デバイス内部に形成されるフォノンの非平衡状態や非定常輸送の取り扱いが容易であること，様々な散乱過程を基礎的な物理機構に基づき導入しやすいこと，薄膜やワイヤ等の複雑な微細構造における界面の影響を反映しやすく構造任意性が高いこと等がある．さらに実デバイス構造を対象として考えた時に，精度と実用性を兼ね備えた手法として期待される．MC 法による熱輸送解析は 1994 年に Peterson らにより初めて報告された [2]．MC 法によるキャリア輸送解析 [3–5] と比較すると，未だその歴史は浅く発展途上の研究分野と言える．Peterson らによるフォノン輸送 MC シミュレーションはデバイモデルを仮定し，分散関係と分枝を考慮せず，また緩和時間も各粒子に対して一定値を仮定した簡易的なモデルを用いていた．2001 年，Mazumder らによりフォノン分散関係や分枝を考慮した包括的なフォノン MC シミュレータの機構が確立された [6]．彼らはこのシミュレータを用いて薄膜 Si，およびゲルマニウム (Ge) における室温付近の熱伝導率の測定値を再現した．2005 年には Lacroix らにより熱平衡状態を保持する散乱機構が導入され，デバイス長に依存した温度分布の遷移が確認された [7]．さらに同年には Chen らにより Si ナノワイヤにおける熱伝導率の解析も行われ，37 nm 以上のワイヤ径に対して測定値を良好に再現する結果を得ている [8]．2008 年，Jeng らは Si-Ge ナノコンポジット構造中の熱輸送解析を行い，熱電材料としての特性評価を行った [9]．さらに 2010 年，Mittal らは光学フォノンが熱伝導に与える影響を調べ，光学モードによる寄与が極薄膜内部において重要となってくることを示した [10]．2011 年には Wong らにより，構造内部に熱源を設けての温度解析が行われ，ナノスケール化に伴う古典的手法の精度低下が指摘された [11]．2012 年，Bera らはワイヤ径 22 nm 以下の Si ナノワイヤに関して，フォノン閉じ込め効果の影響が重要となってくることを示唆している [12]．さらに同年 Ramayya らにより，8 nm 以下のワイヤ径を持つ極細 Si ナノワイヤ中において，現実的界面ラフネスを仮定した際の熱伝導率が予測されている [13]．また，同年 McGaughery らは MC 法を用い，フォノン-フォノン散乱による平均自由行程の抽出を行い，構造内部にランダムに配置して振る舞うフォノンに対し境界散乱の導入を行った [14]．

しかし，これら過去の MC 法による解析においては，共通して近似化したフォノン分散関係が

適用されており，また同時に緩和時間等のモデル中に多くのフィッティングパラメータが含まれ，それらの自由度の高さが問題であった．また，熱伝導率の解析には通常，長い棒状の構造を仮定し両端に有限の温度差を与えて内部の熱流をモニターする手法が用いられてきた．しかし，この計算のためにはフォノンの平均自由行程と比較して十分に長い構造を想定しなければならないため，シミュレーションに必要な計算負荷が大きいことが欠点であった．

これらの諸問題に対し，本研究では熱伝導率の計算を高効率的に行うためのアルゴリズムについて検討した．さらにバンド計算から求めた現実的なフォノン分散関係を組み込み，パラメータの任意性をできるだけ抑制した高精度なフォノン MC シミュレータの開発を試みた [15,16].

2.2 物理モデル

2.2.1 フォノン分散関係

熱は微視的には結晶を構成する原子の振動エネルギーとして捉えることができる．この振動は原子間で独立ではなく，隣接原子に相互作用を及ぼしながらエネルギーが伝達される．結果として熱エネルギーは弾性波の形態を取りながら結晶中を伝搬していく．この弾性波を量子化したものがフォノンである．その伝搬を正確にモデリングするためには，結晶内における格子振動の角周波数 ω に対する波数ベクトル $\mathbf{q}$ の依存性を表すフォノン分散関係が重要な役割を担う．

今，格子定数 a の間隔で一次元的に原子が並ぶ構造を想定し，第 1 ブリルアンゾーンと呼ばれる

$$-\frac{\pi}{a} < q \leq \frac{\pi}{a} \tag{2.1}$$

なる q の範囲を定義する．ゾーン外部における格子振動の波数ベクトル q' は n を整数として $q' = q - 2\pi n/a$ と表現することができるが，s 番目の原子における平行位置からの変位を u_x とすると，隣接原子 $s+1$ 番目の原子との変位の比は

$$\frac{u_{s+1}}{u_s} = \exp(iqa) = \exp(i2\pi n)\exp[i(qa - 2\pi n)] = \exp(iq'a) \tag{2.2}$$

となることから格子上の全ての変位が第 1 ブリルアンゾーンにおける q の値を用いて記述可能であることがわかる．実際の結晶構造は 3 次元空間上にあり，Si における第 1 ブリルアンゾーンの範囲は図 2.1 に示すようになっている．

フォノン分散関係を計算により得るためには，振動の力定数を知ることが重要となる．一般的な手法においては，結晶中のイオン間の相互作用を種々のパラメータを含むモデルを用いて表現し，実験値を再現するように，パラメータの値を決定する．図 2.2 は，ボンドチャージモデル [17] を用いて計算したバルク Si の現実的なフォノン分散関係である．このモデルは振動の力定数として，イオン間の中心力ポテンシャル，イオン間に塊状に分布するボンド電荷とイオン間の中心力ポテンシャル，ボンド電荷間のクーロン相互作用，ボンドの曲げに対するパラメータを導入したものである．この計算結果の精度については中性子散乱実験との比較によって検証を行うことが可能であり，実験値を良好に再現することがわかっている [18,19]．Si は基本単位格子中に 2 つの原子を持つため，3 次元方向の原子の運動の自由度を考慮すると 6 つの振動モード (フォノン分枝) を有す．この分枝は低周波数領域における 3 つの音響フォノン分枝と高周波数領域における 3 つの光学フォノン分枝に種類分けされ，さらにそれぞれは 2 つの横波と 1 つの縦波モードに分類される．すなわち Si 結晶中におけるフォノン分枝は 2 つの横波音響 (TA) モードに 1 つの縦波音響 (LA) モード，さらに 2 つの横波光学 (TO) モードに 1 つの縦波光学 (LO) モードの計 6 つが存在する．

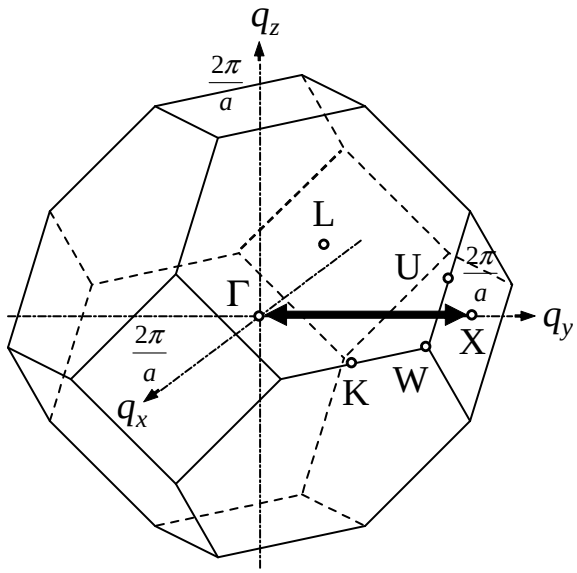

図 2.1: Si 結晶の第 1 ブリルアンゾーン．Γ，X，L，U，W，K はブリルアンゾーン内における対称点，両矢印は Γ-X 方向を示す．

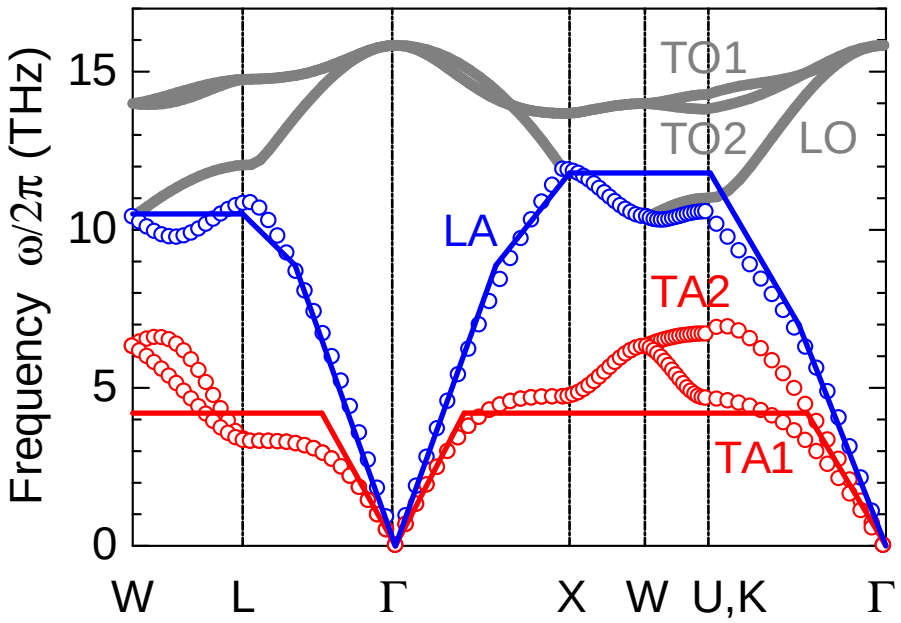

図 2.2: ボンドチャージモデル [17] で計算したバルク Si のフォノン分散関係 (印)．実線は音響フォノンに対して Γ–X 方向の分散を折れ線で近似したモデル [20] である．

一方，これまでのフォノン輸送 MC シミュレーションに関する報告では，例えば図 2.2 中の実線で示すような，熱輸送への寄与が高い音響フォノンのみを近似的に取り扱う分散関係が用いられてきた [20]．このモデルではフォノンの TA モードと LA モードが，図 2.1 に示すように第一ブリルアンゾーン中の Γ-X 方向に沿って折れ線でフィッティングされ，その分散関係を全方向にわたって等方的に適用する．また，TA モードに関して，$q/q_{\max} > 0.4$ ($q_{\max}$ は第 1 ブリルアン領域 (BZ) 内の ⟨100⟩ 方向の境界) の領域においては分散がなく，周波数が波数に依存せず一定となっている．Γ–X 方向に関しては，この近似モデルで比較的良好に分散関係がフィッティングされているが，特に U，K，あるいは W 点近傍に着目すると，TA モードに対する誤差が大きいことがわかる．以降では，この近似分散モデルのことを ⟨100⟩ モデルと表記する．

本研究の主目的はナノスケールデバイスにおいて高精度な熱解析を行うシミュレータを開発することであり，自己発熱効果による温度上昇を想定すれば，室温，あるいはそれ以上の温度域でのフォノン輸送特性のモデリングが重要となる．

フォノンはボーズ粒子であり，その分布は以下式で示されるボーズ=アインシュタイン統計分布関数に従うことが知られている．

$$n(\omega) = \frac{1}{\exp(\hbar\omega/k_B T) - 1} \tag{2.3}$$

ここで，$\hbar$ は換算プランク定数，k_B はボルツマン定数，T は格子温度である．図 2.3 に 3, 30, 300 K におけるボーズ=アインシュタイン分布を示す．3，30 K 時では低周波領域に限られていたフォノンの周波数分布が，300 K では広い範囲にわたって分布しており，その分布の裾は図 2.2 に示す TA フォノンの W, U, K 点近傍に及んでいることがわかる．そのため室温以上のフォノンを考慮するにあたって，W, U, K 点近傍付近における分散の影響が重要であると考えられる．したがって，ブリルアンゾーン全域を加味したフォノン分散関係の正確なモデリングが不可欠である．

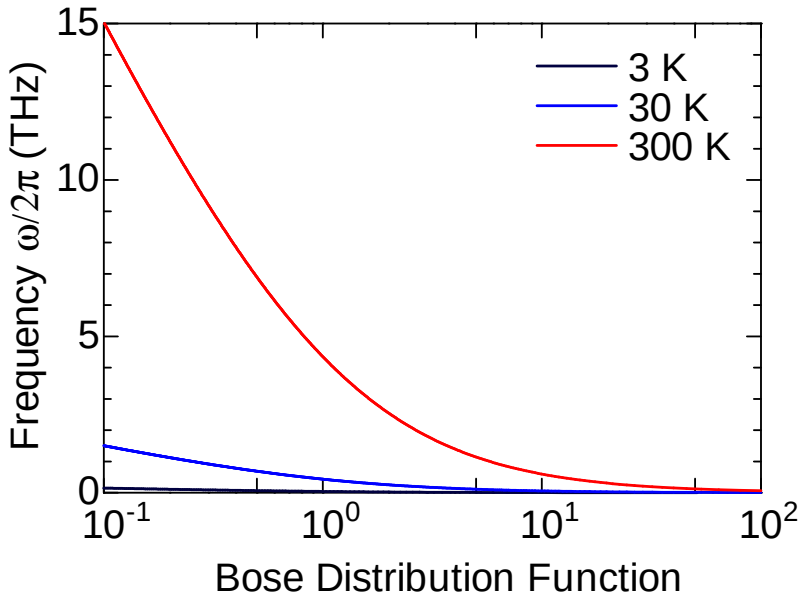

図 2.3: 3，30，300 K におけるボーズ-アインシュタイン分布．

2.2.2 フォノン状態密度と群速度の計算

MC シミュレーションでは，各粒子に対してフォノン周波数 ω を所望の分布関数に従うよう付与したり，ω に対応した群速度や散乱確率を返す手続きが無数に呼び出される．分散を得るための計算には相当の時間を要するため，呼び出す毎に逐一行うのは著しく計算負荷を増大させる．そのため本研究では，あらかじめフォノンの状態密度 (DOS) と群速度を図 2.2 のフォノン分散関係から計算し，それを周波数 ω と分枝 p の関数として参照テーブル化することで，MC シミュレータに取り入れた．そのため，q 空間第 1 ブリルアンゾーンを多数の 4 面体要素に分割して，各 4 頂点の周波数 ω の値をメモリに保存し，任意の $\mathbf{q}$ に対応する周波数 ω は各要素内部で線形補間することで求めた [21,22]．この時，分散の対称性を考慮することでメモリ使用量の削減ができる．分散内の符号反転による対称性は

$$\omega(q_x, q_y, q_z) = \omega(\pm q_x, \pm q_y, \pm q_z) \tag{2.4}$$

で表される．すなわち，第 1 ブリルアンゾーン内における $1/2^3$=1/8 の領域のみの分散関係をテーブル化するだけで全領域に対応させることが可能である．図 2.4 に 4 面体分割を行った 1/8-第 1 ブリルアンゾーンの一例を示す．

分枝 p に対するフォノン状態密度は，

$$\mathcal{D}_p(\omega) = \frac{1}{8\pi^3} \int_{\mathrm{BZ}} d^3q \; \delta(\omega_p(\mathbf{q}) - \omega) \tag{2.5}$$

から得ることができる．ここで，δ はディラックのデルタ関数を表す．フォノン群速度 $(= \nabla_{\mathbf{q}}\omega_p)$ は実際には $\mathbf{q}$ の関数であるが，本研究では q-空間中での等-ω 面上で平均化を施した群速度

$$\bar{v}_p(\omega) = \frac{1}{8\pi^3 \mathcal{D}_p(\omega)} \int_{\mathrm{BZ}} d^3q \; |\nabla_{\mathbf{q}}\omega_p| \; \delta(\omega_p(\mathbf{q}) - \omega) \tag{2.6}$$

を求めた．これらの積分値は 4 面体法 [23] により数値的に求めた．本計算にて Γ–X 方向のメッシュサイズを $0.01(2\pi/a)$ (a は Si の格子定数) としたところ，4 面体要素の数は積分領域 $q_x, q_y, q_z \geq 0$ の中で 2.4×10^7 個となった．

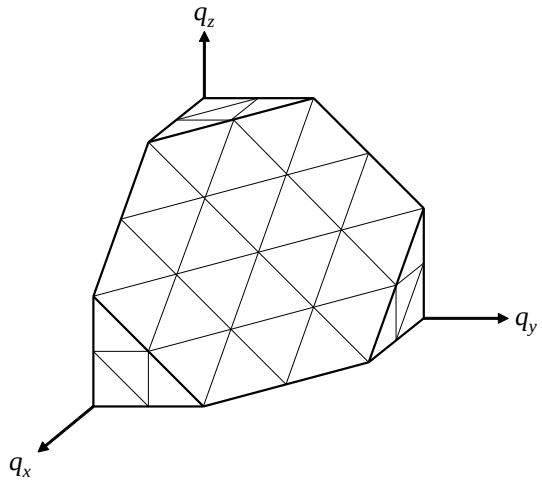

図 2.4: 1/8-第 1 ブリルアンゾーンにおける 4 面体分割．ここではメッシュサイズを $0.25(2\pi)$ と仮定し，四面体要素の個数として 44 個の場合を示した．

図 2.5 に式 (2.5) を用いて $\mathcal{D}_p(\omega)$ の周波数依存性を計算した結果を示す．⟨100⟩ 近似モデルは，現実的な分散モデルと比較して，DOS を小さく見積もる傾向にあることが分かる．これは，この近似が不完全であることを示唆している．特に，TA モードの 4–7 THz における DOS は ⟨100⟩ 近似モデルでは存在していないが，これは，U，K，W 点近傍における分散関係が適切に表現できていないことが原因である (図 2.2 を参照)．なお，⟨100⟩ 近似モデルでは，先に述べたように $q/q_{\max} > 0.4$ の領域において TA モードの分散が存在しない．実際には 4.2 THz($q/q_{\max} = 0.4$) に Van Hove 特異点と呼ばれるデルタ関数的な DOS が存在することになるが，このプロットでは省略した．さらに ⟨100⟩ 近似モデルにより計算された音響モードの 4 THz 以下の領域における DOS は現実的分散モデルと比較して，LA モードは良く一致している一方で，TA モードでは大きく過小評価されている．これは図 2.2 の Γ-L 方向において LA モードは良好にフィッティングされている一方で，現実的分散モデルにおける TA モードはより低周波で分散が平坦化していることに起因している．すなわち，⟨100⟩ 方向のみを考慮した近似化が DOS に与える影響は U，K，W 点近傍におけるモデリングの不完全さに留まらない．

さらに図 2.6 に式 (2.6) を用い，$\bar{v}_p(\omega)$ の周波数依存性を計算した結果を示す．⟨100⟩ 近似モデルによる計算結果は現実的な分散モデルと比較して，周波数全体にわたって群速度を大きく見積もっていることが確認できる．これは図 2.5 に示したように，近似モデルが分散のモデリングの不完全性により特に TA モードにおいて DOS を過小評価したことに起因する．すなわち，現実的分散モデルの DOS においてほとんどの TA フォノンが群速度の低い 4–7 THz の範囲に集中していることから，実際の群速度の値は小さくなると考えられる．

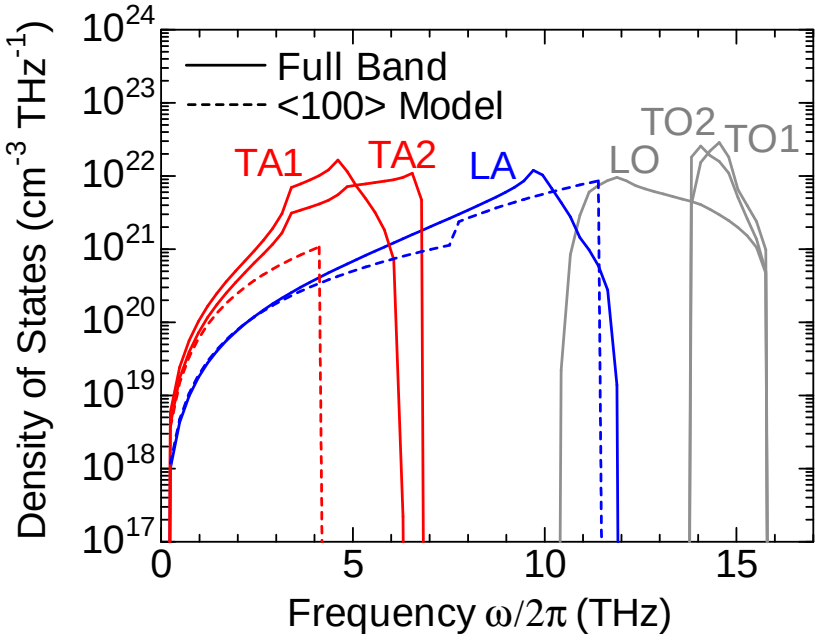

図 2.5: バルク Si におけるフォノン状態密度 $\mathcal{D}_p(\omega)$ の計算結果．フォノン周波数 $\omega/2\pi$ の関数としてプロットした．ボンドチャージモデル [17] に基づく分散関係から求めた結果 (実線) と ⟨100⟩ 近似モデル [20] による結果 (破線) を比較した．

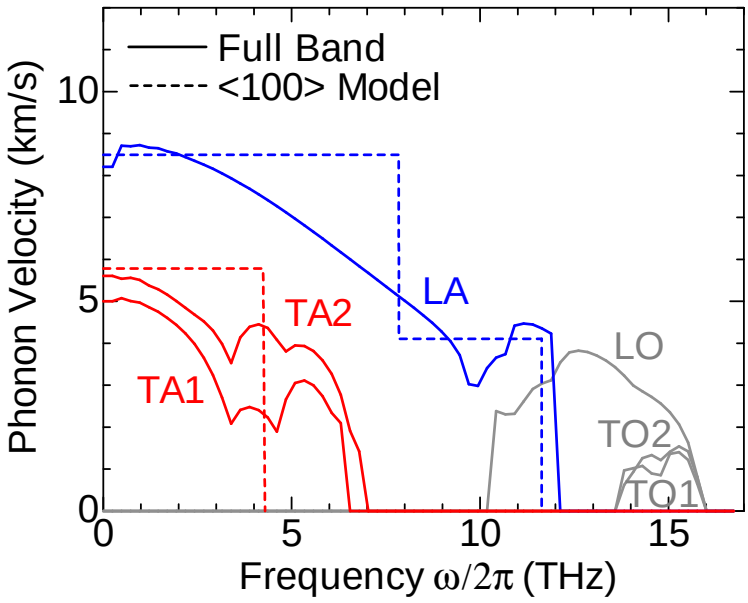

図 2.6: バルク Si におけるフォノン平均群速度 $\bar{v}_p(\omega)$ の計算結果．フォノン周波数 $\omega/2\pi$ の関数としてプロットした．ボンドチャージモデル [17] に基づく分散関係から求めた結果 (実線) と $\langle 100 \rangle$ 近似モデル [20] による結果 (破線) を比較した．

また，一般的に光学フォノンが熱輸送に与える影響は小さいことが知られている．その一因として挙げられるのは，図 2.6 に示すように光学フォノンの群速度は LO，TO モード共に音響モードと比較して低く，さらに図 2.3 に示したように光学フォノンの周波数領域においてボーズ分布が小さくなるためである．

2.2.3 比熱の計算

単位体積あたりの比熱 $C_V(T)$ はフォノン状態密度を ω で積分した次式によって求めることができる．

$$C_V(T) = \frac{1}{V}\frac{\partial U}{\partial T} = \sum_p \int d\omega c_v(\omega, p) \tag{2.7}$$

ここで，$c_v(\omega, p)$ は，モード p ごとに分解した比熱であり，

$$c_v(\omega, p) \equiv \hbar\omega \mathcal{D}_p(\omega)\frac{\partial n}{\partial T} \tag{2.8}$$

で与えられる．図 2.7 に図 2.2 で示した現実的分散モデル，及び $\langle 100 \rangle$ 近似モデルより計算した結果を示す．**2.2.2** にて述べたフォノン状態密度の時と同様に，TA モードにおける W，U，K 点近傍付近の分散モデリング精度が悪いため，$\langle 100 \rangle$ モデルは比熱を過小評価する．さらにここで着目すべき点は，光学モードによる寄与が大きい点である．図 2.3 で示した通り，ボーズ分布関数の値は高周波数領域になるほど小さくなる．しかし一方で，ボーズ分布は高周波数領域における温度微分値が相対的に大きく，結果的に光学モードの比熱への寄与は高くなる．

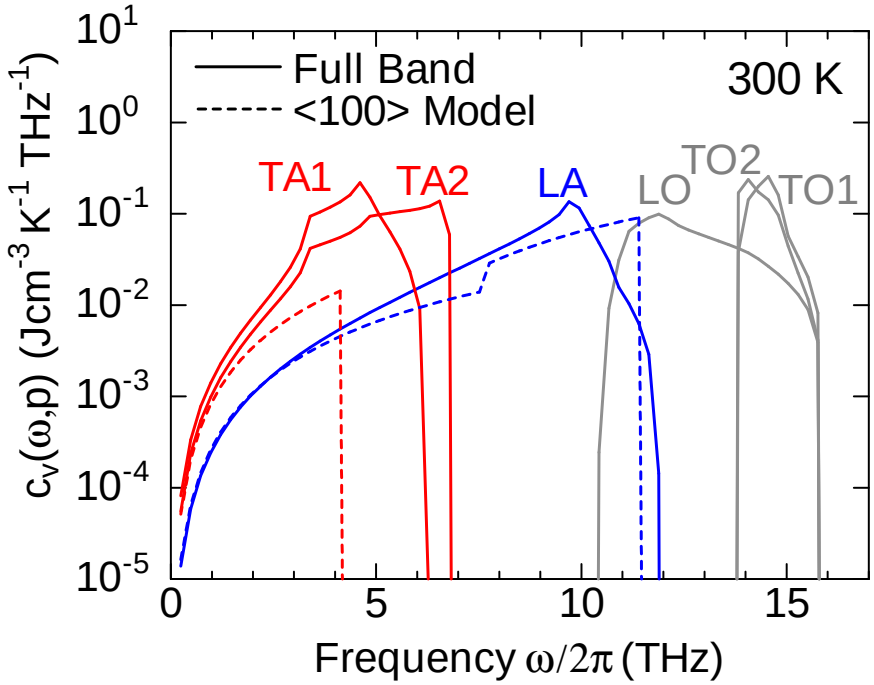

図 2.7: 格子温度 300 K を想定したバルク Si におけるフォノンモード比熱 $c_v(\omega, p)$ の計算結果．フォノン周波数 $\omega/2\pi$ の関数としてプロットした．ボンドチャージモデル [17] に基づく分散関係から求めた結果 (実線) と $\langle 100 \rangle$ 近似モデル [20] による結果 (破線) を比較した．

図 2.8 に $C_V(T)$ の計算結果を示す．ボンドチャージモデルにより求めた光学・音響を含むすべての分枝のフォノン状態密度を用いることで，実験値 [24, 25] を良好に再現することができ，現実的分散モデルの妥当性をここでも確認することができた．また，音響フォノンから求めた $C_V(T)$ の値はおおよそ全比熱の半分ほどの値であり，このことからも比熱に対する光学モードの寄与の大きさがわかる．さらに，図 2.8 では，現実的なフォノン分散モデルに加え，$\langle 100 \rangle$ 近似分散モデルで C_V を計算した結果もプロットしている．分散モデルの間で 2 倍以上もの開きが見られるが，これまで述べてきたように $\langle 100 \rangle$ 近似分散における TA モードの表現が不完全であることが原因である．熱伝導率は表式上は $C_V(T)$ に比例した値として定義されるため，比熱の過小評価が熱の拡散輸送特性に与える影響は大きい．$\langle 100 \rangle$ 近似では，実際には TA モードの $q/q_{\max} = 0.4$ において Van Hove 特異点によるデルタ関数的発散が存在する．しかし一方で図 2.6 の結果より $q/q_{\max} = 0.4$ における群速度の値はゼロとなる．すなわちこの周波数を持ったフォノンを仮定すると比熱には寄与する一方で，励起したフォノンは動くことができずに静止した状態となる．したがって，このフォノン自体は熱伝導に寄与しないと考えることができるため，本研究では DOS のデルタ関数成分を除外して考えた．

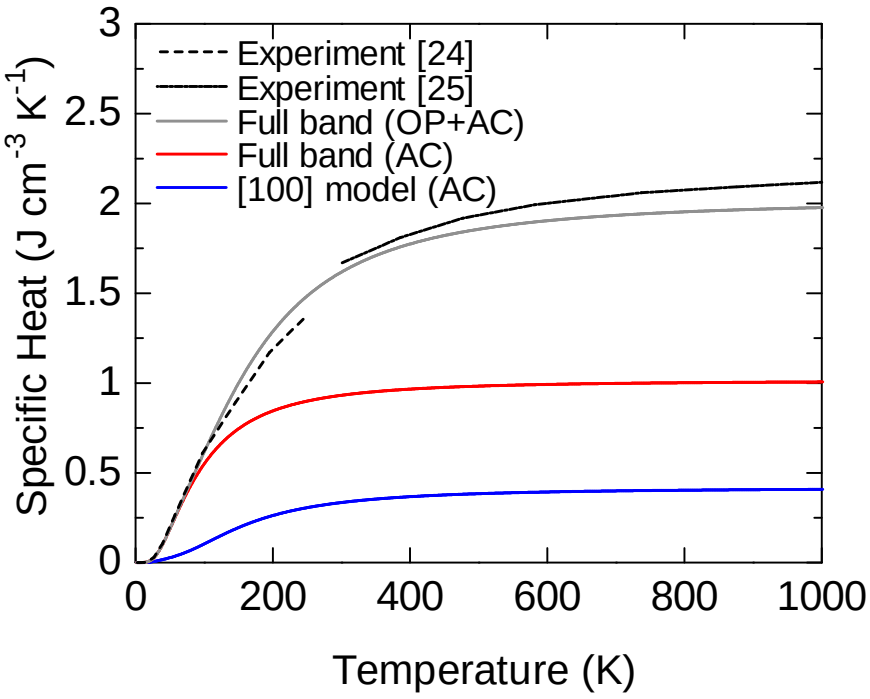

図 2.8: バルク Si における単位体積当たりの比熱 C_V を温度の関数として計算した結果．図 2.5 に示したフォノン状態密度をもとに求めた結果を低温域における実験値 [24] 並びに高温域における実験値 [25] と比較した．OP+AC は光学分枝と音響分枝，AC は音響分枝を周波数積分したものを示す．

2.3 モンテカルロシミュレーション

2.3.1 モンテカルロ粒子の定義と初期状態決定

MC シミュレーションでは，図 2.9(a) のようにフォノンを粒子でモデル化し，それら集団のブラウン運動を追跡することで，輸送特性を解析した．本研究では，MC 粒子は全て同一の熱エネルギー E^* を運ぶものと考える．すると，MC 粒子の個数 N^* は，

$$N^* = \frac{U}{E^*} \tag{2.9}$$

のように表される．ここで，U はシミュレーション系内に含まれるフォノンエネルギーの総和であり，DOS を用いて，

$$U = V \sum_p \int d\omega \hbar\omega \mathcal{D}_p(\omega) n(\omega) \tag{2.10}$$

と与えられる．ここで，V はシミュレーション系の体積である．

各 MC 粒子には，フォノンが進む向きを表す方向ベクトル $\mathbf{u}$，およびフォノンの状態，すなわち ω，p，位置 $\mathbf{r}$ の情報を付与した．初期状態における運動方向 $\mathbf{u}$ については，本研究では結晶の異方性は考慮せず，等方的に振る舞うものとして次式より決定した (図 2.9(b) 参照)．

$$\mathbf{u} = (\sin\theta\cos\varphi, \sin\theta\sin\varphi, \cos\theta) \tag{2.11}$$

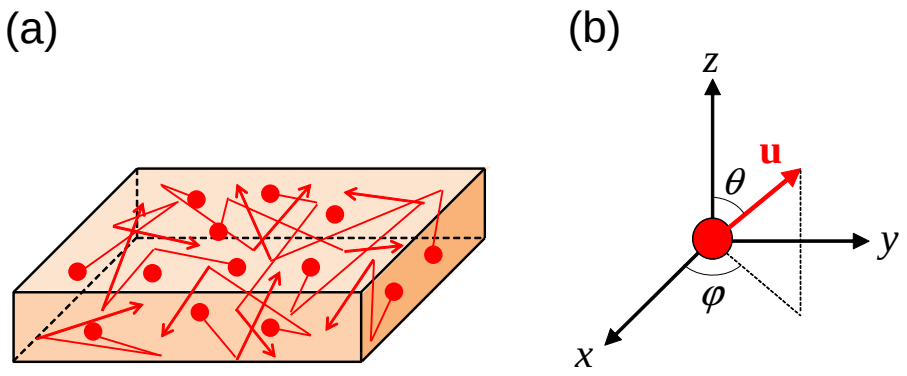

図 2.9: (a) フォノン MC シミュレーションの概念図．丸は MC 粒子であり，それぞれが $W(\omega)$ 個のフォノンを表現している．(b)MC 粒子の初期状態における運動方向 $\mathbf{u}$ の定義．式 (2.11) により決定した．

ここで，$\sin\theta = R_1$，$\cos\theta = 2R_1 - 1$，$\varphi = 2\pi R_2$ であり，R_1 と R_2 は $[0, 1]$ の一様乱数である．

MC 粒子 1 個が有するエネルギー E^* は，必ずしも現実のフォノンエネルギー $\hbar\omega$ と等しくなる必要はなく，複数のフォノンを合わせた仮想的な粒子と考える．結晶中に存在するフォノンの数は膨大であり，MC 粒子にフォノンを一対一で対応させることは計算負荷を多大に要するため現実的ではない．そのため，このように 1 個の MC 粒子が複数個のフォノンの集まりを表すと仮定することで計算負荷を大きく軽減させた．MC 粒子がそれぞれ何個のフォノンの集合体であるかは，次の重み関数により表現した．

$$W(\omega) = \frac{E^*}{\hbar\omega} \tag{2.12}$$

この式のようにフォノン周波数 ω に逆比例した重み関数を定義することで，全ての MC 粒子のエネルギーを一定値 E^* にすることができる．なお，過去のフォノン MC シミュレーションの報告 [2, 6–14] では，重みは一定の値として扱っていたが，本研究で上述のような重み関数を定義した理由については **2.3.3** にて詳細を述べる．

シミュレーションの開始時点において，温度 T を設定し熱平衡分布に従い MC 粒子を生成した．その際，フォノン状態 (ω, p) は，各 MC 粒子ごとに，次の確率分布に基づき乱数棄却法 [26] により決定した．

$$P(\omega, p) \propto \frac{\mathcal{D}_p(\omega)n(\omega)}{W(\omega)} \tag{2.13}$$

なお，MC 粒子の分布は上式 $P(\omega, p)$ に従うが，フォノン分布 $P'(\omega, p)$ に換算すると

$$P'(\omega, p) \propto \mathcal{D}_p(\omega)n(\omega) \tag{2.14}$$

となる．

式 (2.14) に従うフォノンエネルギー分布を図 2.10 に示す．これはシミュレーション初期状態において MC 粒子に与えられる分布関数を示したものである．300 K(図 2.10(a)) の場合に着目すると，高温時ではボーズ=アインシュタイン統計の裾が高周波数域まで拡張するため，LA モード，光学モードも熱伝導にある程度寄与する．一方で，低温時 (図 2.10(b)) における分布に着目すると，分布が低周波領域に限定されるため，LA モード，光学モードのフォノンが相対的に大きく減少する．特に光学モードは占有割合が小さい上，群速度（図 2.6）も低いため，熱伝導へはほぼ寄与しないと考えられる．

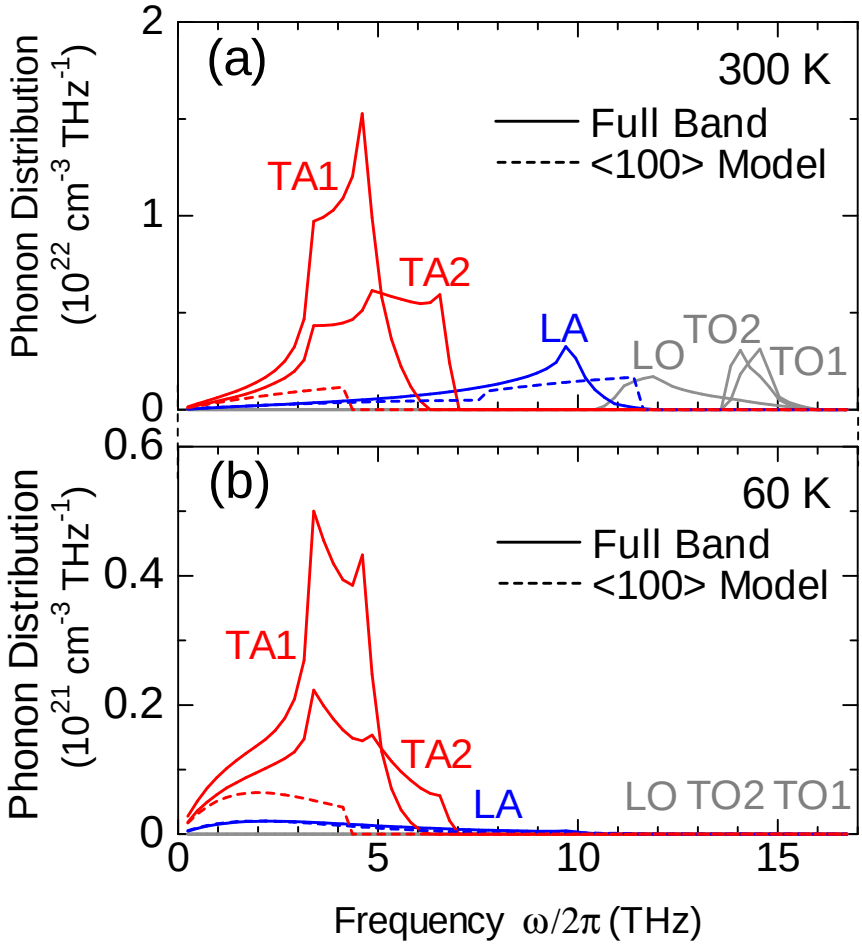

図 2.10: (a) 室温 300 K，および (b)60 K における熱平衡状態時のフォノンエネルギー分布関数 $P'(\omega, p)$．ボンドチャージモデル [17] に基づく分散関係から求めた結果 (実線) と ⟨100⟩ 近似モデル [20] による結果 (破線) を比較した．

図 2.5 に示した分散の近似化による状態密度の過小評価の影響はエネルギー分布にも顕著に現れている．特に 300 K 熱平衡状態 (図 2.10(a)) におけるフォノン分布は現実的分散モデルにおいては TA モードがほとんどを占める一方，分散を近似化すると LA モードの占有率が高くなることは注目すべき点である．⟨100⟩ 近似モデルによる分布は温度低下に伴い (図 2.10(b))，主要なフォノンが LA モードから TA モードへと変化するが，依然現実的分散モデルと比較すると LA モードの占有割合は大きい．したがって初期状態における熱平衡分布を与える際にもフォノン分散関係の精度が重要となってくることがわかる．

このように，第 1 ブリルアンゾーン内におけるエネルギー分布情報を周波数のテーブルとして各 MC 粒子に与えることにより，等方的運動シミュレーションを用いて，全ての結晶方向を加味した輸送特性の抽出が可能となる．

2.3.2 自由走行と散乱

フォノンの MC シミュレーションでは，各 MC 粒子の状態が時間的にどのように変化していくのかを追跡する．すなわち，付与された群速度に従って自由に走行させたのち，確率的に散乱を受けさせ，これらの過程を多数回繰り返す．本研究では，フォノン-フォノン散乱 (U)，フォノン-欠陥散乱 (d)，フォノン-境界散乱 (b) の 3 種類の散乱メカニズムを考慮した．図 2.11 に各種フォノン散乱メカニズムの概念図を示す．各散乱は独立事象であるものと仮定すると，全緩和時間 τ は次式で与えられる．

$$\tau^{-1} = \tau_{\mathrm{U}}^{-1} + \tau_{\mathrm{d}}^{-1} + \tau_{\mathrm{b}}^{-1} \tag{2.15}$$

フォノン-フォノン散乱では 3 フォノン過程であるウムクラップ (U) 過程を，今回は MC 粒子のフォノン周波数 ω，並びに運動方向を変化させることで 1 体散乱として模擬した．散乱確率として MC 粒子が持つ ω に依存した確率関数を仮定した．**2.3.1** で述べたようにフォノンの重みは周波数に応じて散乱前後で変化するため，3 フォノン過程によるフォノン増大や減少の効果が自動的に組み込まれる．厳密に 3 フォノン過程を MC シミュレーション上で再現するには，複数の MC 粒子を用いてそれぞれの位置情報を追跡し，波数変化や運動量変化等の相互作用を組み込まなければならない．さらに，この相互作用を正確に取り入れるためには，フォノンの波数に対する分布関数を考慮する必要がある．しかし，現実的な計算時間で MC シミュレーションを行うためには結晶内の実際のフォノン数と比較して大幅に少ない粒子数を用いることが重要である．このようなシミュレーションで得られる波数の分布関数は，波数幅と比較し大きく離散化したものしか得られず，連続した分布関数を得ることはできない．そのため 3 フォノン過程を厳密に導入することは，計算負荷の観点から困難である．MC 法が持つ利点は分子動力学法等と比較して計算負荷を抑えた熱輸送シミュレーションの実現であり，U 過程を高精度化することは本研究の目的にそぐわない．そのため，散乱機構はこのような単一 MC 粒子のみを考慮して確率的に発生するものと仮定した．

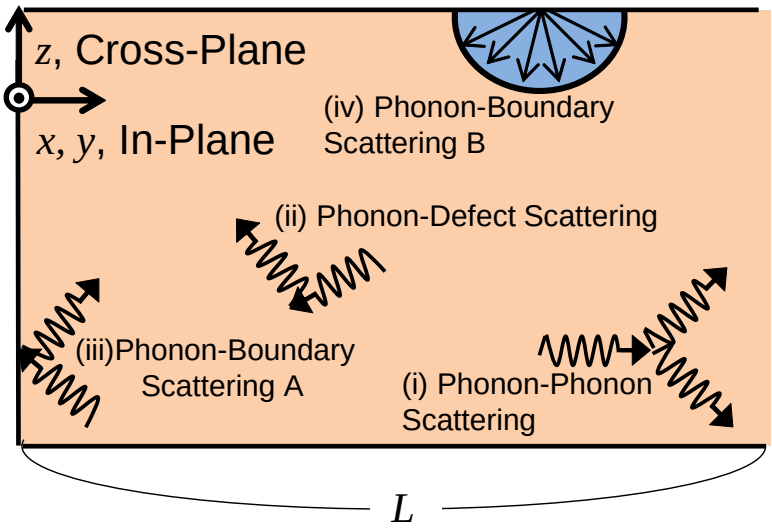

図 2.11: MC シミュレーションに導入したフォノン散乱機構の概念図．(i) フォノン-フォノン散乱．(ii) フォノン-欠陥散乱．(iii) フォノン-境界散乱 A．(iv) フォノン-境界散乱 B．

フォノン-フォノン散乱後の MC 粒子には，シミュレーション系内におけるエネルギー分布関数 $P'(\omega, p)$ を維持させるような新しい周波数 ω' を確率的に付与することで熱平衡状態を保持した．この散乱モデルではある微小時間で見ると非熱平衡状態を形成するが，長時間繰り返すことで所望の分布へと収束する．さらに，**2.3.1** で述べたようにそれぞれの MC 粒子のエネルギーは一定値 E^* に保たれるため，系内におけるエネルギー総量 U に時間的変動はない．散乱確率の大きさは分枝 p に依存する定数 A_p，χ_p，ξ_p を用いて，次式で与えた [20].

$$\tau_{\mathrm{U}}^{-1}(\omega, p) = A_p \omega^{\chi_p} T^{\xi_p} \exp\left(-\frac{B_p}{T}\right) \tag{2.16}$$

この式は物理的には，周波数が高いほどフォノン波数が大きくなり，U 過程による大きな波数変化が起きやすくなること，さらに系内における格子温度が高いほど，フォノン総数が増大し他のフォノンとの相互作用確率が上昇することを意味している．

厳密には，U 過程のみではなくノーマル (N) 過程も考慮する必要がある．これは波数変化 (運動量変化) を伴わず，フォノンの周波数のみを変化させる散乱過程である．この散乱は直接的には輸送特性を変化させないが，U 過程による散乱確率との兼ね合いにより間接的に影響を与えることが知られている [27]．実際に，N 過程を MC シミュレータに組み込むことは可能であり，過去に導入された例は多い．しかし，本研究では簡単のため U 過程の確率にその影響が実効的に反映されたものと仮定し，フォノン-フォノン散乱を全て U 過程のみで再現した．

フォノン-欠陥散乱確率については，弾性散乱を仮定し，散乱前後で $\mathbf{u}$ のみを変化させた．これは単結晶における不完全な原子結合によって，熱振動の伝搬方向が変動する過程である．散乱確率は定数 C を用いて次式によって計算した [20].

$$\tau_{\mathrm{d}}^{-1}(\omega) = C\omega^4 \tag{2.17}$$

フォノン-境界散乱については，今回，2 種類のアルゴリズム A, B を使い分けた．1 つ目は，上記散乱機構と同様，緩和時間に基づいて，確率的に散乱を生起させる方法 (以降フォノン-境界散乱 A と呼ぶ) であり，後述 **2.4.1** で述べるようにバルク熱伝導率の特に極低温領域での振る舞いを再現するために必要となる過程である．散乱確率は次式で与えられる [20].

$$\tau_{\mathrm{b}}^{-1}(\omega, p) = \frac{\bar{v}_p(\omega)}{FL} \tag{2.18}$$

ここで，L は系の特徴的長さ (試料の厚みなど)，また F は調整パラメータである [28]．2 つ目は，ナノ構造中における物質境界でのフォノン散乱を取り扱うために導入したものであり，実際に MC 粒子の位置を追跡しシミュレーション構造の境界に当たった際の反射の仕方で境界散乱を表現する方法 (以降フォノン-境界散乱 B と呼ぶ) である．この方法の詳細については，後程 **2.4.2** にて説明する．

自由走行によるフォノン位置の変化は次式のように与えられる．

$$\mathbf{r}(t + \Delta t) = \mathbf{r}(t) + \bar{v}_p(\omega)\mathbf{u}\Delta t \tag{2.19}$$

本研究では，計算時間ステップ Δt は定数とし，本節の末尾にて述べる手法を用いて設定した．自由走行を終えると，つぎは粒子を散乱をさせるか否かの判断を行う．もし散乱させる場合には，さらにどの散乱機構を選択するのか判断しなければならない．この決定には次の確率を参照した [7].

$$P_i = 1 - \exp\left(-\frac{\Delta t}{\tau_i(\omega, p)}\right) \tag{2.20}$$

ここで，i は U，d，または b をとり，一様乱数を用いることで，いずれかの散乱機構，あるいは散乱させないか (この確率は $1-\sum_i P_i$ となる) を決定した．もし，欠陥散乱や境界散乱が選択された場合には，ω は変化しないものとし (弾性散乱)，$\mathbf{u}$ のみを式 (2.11) に従って変化させた．一方，フォノン-フォノン散乱が選択された場合は，非弾性散乱であることから散乱前後でフォノン周波数 ω の再配置が行われ，散乱後の終状態 (ω', p') の決定については特別な配慮が必要となる．これには，次式で与えられる確率分布を参照した．

$$P_{\mathrm{Kirch}}(\omega', p') \propto \left[1-\exp\left(-\frac{\Delta t}{\tau_U}\right)\right] P(\omega', p') \tag{2.21}$$

これは，式 (2.13) に対してキルヒホッフ則とよばれる補正を施したものであり [7]，フォノン系をボースアインシュタイン分布に従う平衡状態に保つために必要となる措置である．図 2.12 にキルヒホッフ則の概念図を示す．フォノン-フォノン散乱直後における周波数分布に着目すると，微小時間においては熱平衡状態から外れた分布を形成する．そのため，分布を再び熱平衡状態に戻すためには散乱により減じた分布を補償するよう周波数を付与する必要がある．ある時間間隔 Δt で散乱されたフォノンの周波数分布は分布関数と確率関数の積で与えられるため，式 (2.21) に従い，散乱後に周波数分布が再配置される．図 2.13 に MC シミュレーションで得た音響フォノンの室温 300 K におけるエネルギー分布の時間推移を示す．フォノン分散関係として現実的分散モデルを適用した結果である．キルヒホッフ則を適用することにより，長時間における散乱過程を経ても，分布が正常に熱平衡状態を維持している様子が確認できる．

図 2.13($t = 1$ ns, 1 μs) に示したようにフォノン緩和時間 (~ 1 ps) に対し十分大きい時間スケールに関してはキルヒホッフ則による周波数再配置の妥当性を確認できる一方で，t がフォノン緩和時間スケールへと近づくとその精度が疑問視される．例えば，過渡応答特性を解析する際には数十 ps といった時間スケールでの精度が求められる．そのため計算時間ステップ Δt をシミュレーション時間 t_{sim} に対し以下式 (2.22) に従うよう決定することで精度向上を行った．

$$\begin{cases} \Delta t = t_{\mathrm{sim}}/100 \ (t_{\mathrm{sim}}/100 < \tau_{\mathrm{min}}) \\ \Delta t = \tau_{\mathrm{min}} \ (t_{\mathrm{sim}}/100 \geq \tau_{\mathrm{min}}) \end{cases} \tag{2.22}$$

ここで，τ_{min} は式 (2.15) で示した全緩和時間 τ が取りうる最小値である．本シミュレータにおけるキルヒホッフ則の過渡応答での妥当性については，**3.4** にて詳細を述べる．

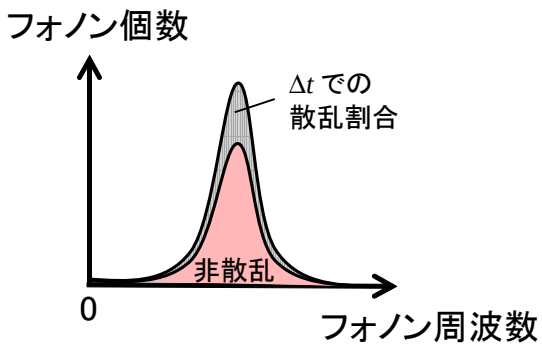

図 2.12: キルヒホッフ則 [7] の概念図．ある時間 Δt において散乱される図中斜線部分における分布関数が斜線部分を再び補完するように周波数の再配置が行われる．

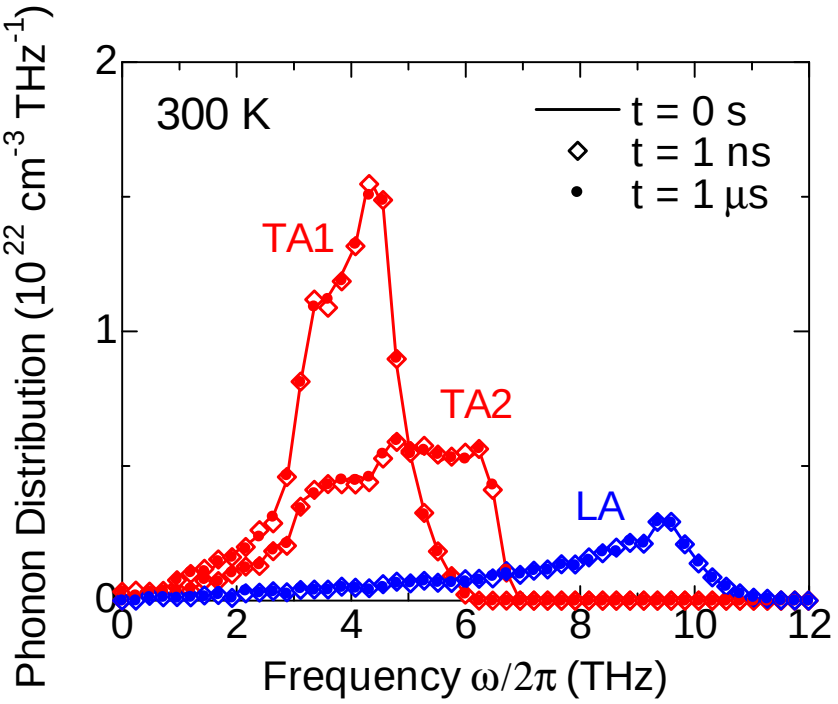

図 2.13: MC シミュレーション上におけるエネルギー分布関数の時間変化．300 K における $t = 0$ s, 1 ns, 1 μs の時のフォノンの周波数分布を示す．

2.3.3 熱伝導率の計算方法

本研究では，熱伝導特性を表す基本物理量として熱伝導率の計算を行った．熱伝導率は物理的には単位時間，単位温度勾配，単位断面積あたりに流れる熱の量を表したものである．これまでの熱輸送 MC シミュレーションでは熱伝導率 κ を直接的に計算するため図 2.14 のような構造を一般的に用いていた．これは構造中にそれぞれ高温と低温を維持する固定温度槽，すなわち熱浴槽を設け，その間の 1 次元方向に対する流束 q を測定することにより，フーリエ則 $q = -\kappa\nabla T$ から求める手法である．

熱浴槽では MC 粒子密度が保持されるように粒子の消失，生成が繰り返される．例えば高温熱浴槽における MC 粒子数を N_{h} とし，シミュレーション時間 Δt における MC 粒子数の変動を ΔN_{h} とおくと，流束は

$$q = \frac{E^{*}\Delta N_{\mathrm{h}}}{\Delta t S} \tag{2.23}$$

で与えられる．この時，S は熱伝達経路の断面積を表している．このシミュレーション手法では上記の値が時間的に収束するまで解析が行われる．

しかし，この手法にはいくつかの欠点が挙げられる．第 1 には詳細は 3 章にて述べるが，フーリエ則が成立するためには熱が拡散的に輸送される必要があり，そのためにはフォノン平均自由行程 (室温の Si ではおおよそ 100 nm) よりも十分に長いシミュレーション構造を用いなければならない．これには膨大な MC 粒子数を要し，さらに各 MC 粒子に対し長距離を伝導させる必要があるため，計算負荷が増大する．さらに，熱伝導率は温度に依存するパラメータであるため，ある温

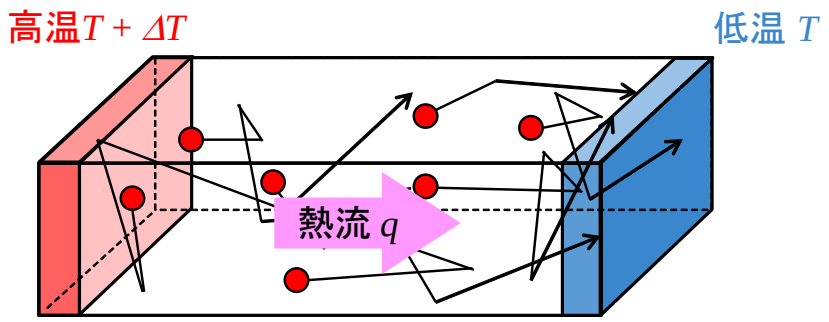

図 2.14: 過去の MC 法における熱伝導率計算に用いられてきた構造.

度点における熱伝導率を正確に解析するためには両端の熱浴層の温度差 ΔT はなるべく微小である必要がある．この時，微小温度差の熱浴層間を流れるフォノン数が非常に小さくなるため，輸送特性の収束値を統計的に得るには，多大な計算時間を必要とする．

そこで本研究では，新たに 1 粒子法を用いた熱伝導率の計算を提案する．1 粒子法では，熱伝導率は以下式から計算される [29].

$$\kappa = C_V \cdot D \tag{2.24}$$

ここで C_V は単位体積当たりの比熱，D は熱の拡散係数を表している．C_V は **2.2.3** で述べたようにフォノン分散から求めることができる．一方で D の値は MC 粒子の挙動を追跡することによって計算することができる．すなわちまず，ある初期座標に多数の MC 粒子を集中して配置し，それぞれの MC 粒子には **2.3.1** で述べた初期状態を与える．各 MC 粒子を無限空間内で自由に運動させ，その座標を時間 t にわたって追跡して得られる変位を平均化することで拡散距離 $\overline{L}$ を求め，

$$D = \frac{\overline{L}^2}{2t} \tag{2.25}$$

から D を算出する [26].

ここでなぜこの 1 粒子法が過去のフォノン MC シミュレーションの計算において使用されていなかったのかを述べる．過去の MC シミュレーションでは，各 MC 粒子が運搬するフォノンエネルギーの総和はそれぞれ異なっていた．これは，**2.3.1** で述べた MC 粒子に付与されるフォノン重み関数として固定値 W を採用していたためである．つまり i 番目の MC 粒子に与えられている周波数を ω_i とすると運搬するエネルギー E_i は

$$E_i = \hbar\omega_i W \tag{2.26}$$

で与えられる．この手法を用い，式 (2.24) により熱伝導率の計算を行うと，図 2.15 のように熱伝導率の時間的収束を得ることができない．これは MC 粒子に対して異なるエネルギー値を付与したことに起因する．フーリエ則に着目すると，拡散係数 D の値はフォノンではなくエネルギーの拡散に対して定義される量であるため，拡散係数は単位エネルギー当たりの伝導に対して求めなければならない．旧来の手法では，式 (2.26) のように各 MC 粒子が運ぶエネルギー値が異なるため，式 (2.24) を用いて単位エネルギーあたりの伝導特性を得ることが出来ない．そこで本研究で

は MC 粒子に与える重み関数を式 (2.12) のように与えることで各 MC 粒子が持つエネルギーを

$$E^* = \hbar\omega_i W(\omega_i) \tag{2.27}$$

のように一定の値とした．

式 (2.27) に従う重み定義を導入し，熱伝導率を計算した結果を図 2.15 に示している．上述の新規アルゴリズムを組み込むことで，収束性を得ることができ，1 粒子法を用いての熱伝導率計算が可能となった．1 粒子法での解析に必要なシミュレーション時間は高/低領域を用いて熱流をモニターする旧来の手法と比較すると約 10 分の 1 に相当し，大幅な計算時間の改善が達成できた．

過去の MC 法で用いられてきた手法にて図 2.14 のようなシミュレーション構造を想定した熱伝導率の計算を行う際，熱を拡散的に伝導させる必要があるため，フォノンの平均自由行程と比較して十分に長い構造を用いなければならない．これは，熱伝導率を解析するために予め対象とする材料におけるフォノンの平均自由行程の値を知る必要があることを意味する．一方で 1 粒子法は無限空間内を挙動する MC 粒子を追跡する手法であるため，計算前にフォノンの平均自由行程が既知の情報である必要はなく，また計算に際して構造の大きさを決定する過程が存在しない．そのため，様々な物質に対し，分散の情報さえ与えられれば即座に熱伝導計算を行うことができる．そのため 1 粒子法は計算ステップの観点からも効率的手法であると言える．

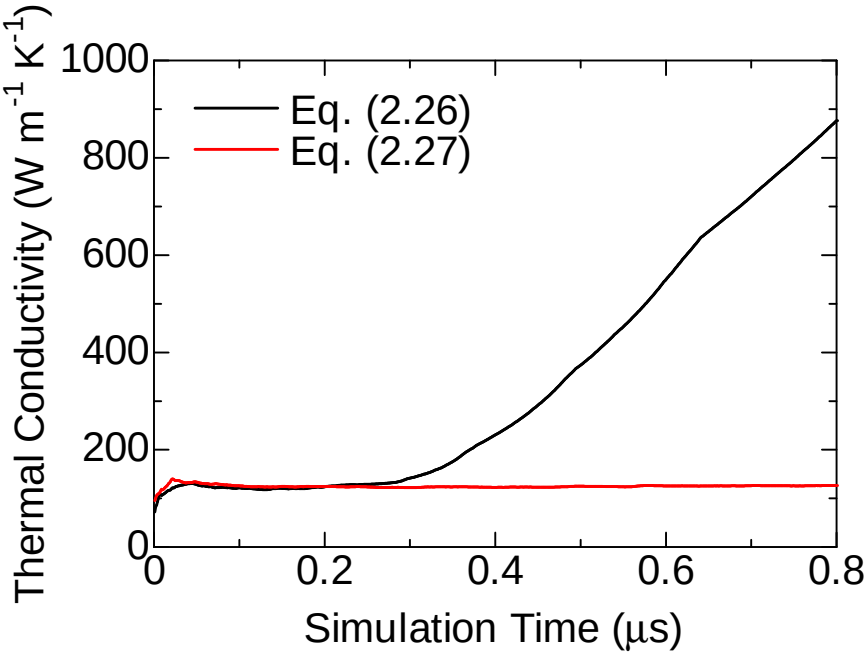

図 2.15: 1 粒子法 (式 (2.24)，式 (2.25)) による熱伝導率の時間収束性．MC 粒子に対し，それぞれ式 (2.26)(黒線)，式 (2.27)(赤線) に従う重み定義を導入した．

2.4 熱伝導率のシミュレーション結果と考察

2.4.1 バルクシリコンの熱伝導率

バルクシリコンにおける熱伝導率は以下のように C_V と 3 次元の拡散係数 ($D_{3\mathrm{D}}$) の積から求めた [29].

$$\kappa = C_V \cdot D_{3\mathrm{D}} \tag{2.28}$$

本研究では熱伝導率 κ を算出するにあたって，$C_V(T)$ に対する光学フォノンの寄与を無視した．つまり $C_V(T)$ として仮定したのは音響フォノン成分のみである．光学フォノンの影響を取り入れなかった理由は，群速度が小さく (図 2.6 参照) かつ，緩和時間が短い [30] ため，ほとんど熱伝導には寄与しないと考えられるためである．

MC 粒子のブラウン運動に伴う拡散係数は，一定温度 T の下で 1 粒子法に基づき，次式から計算した [26]:

$$D_{3\mathrm{D}} = \frac{1}{3N^* t_{\mathrm{sim}}} \sum_{i=1}^{N^*} \frac{(x_i - \bar{x})^2 + (y_i - \bar{y})^2 + (z_i - \bar{z})^2}{2} \tag{2.29}$$

ここで，$(x_i,\ y_i,\ z_i)$ は，時間 $t = 0$ から t_{sim} までの粒子 i の変位，また $(\bar{x},\ \bar{y},\ \bar{z})$ はそれらのアンサンブル平均である ($\bar{x} = \sum x_i / N^*$)．今回使用した粒子数は $N^* = 10,000$ であり，t_{sim} は収束が得られる十分な時間 (典型的には $\sim 1\ \mu\mathrm{s}$) を想定した．図 2.16 は，300 K における粒子 1 個の拡散軌跡の例である．頻繁な散乱を伴う運動に混じって，直線的に長い距離無散乱で運動する軌跡が

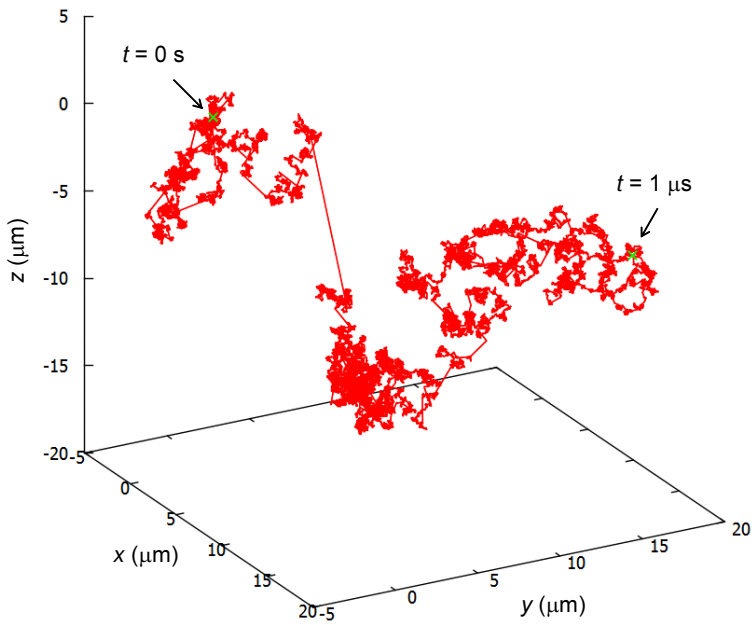

図 2.16: MC 粒子 1 個の運動軌跡を 1 μs の間追跡した結果 [15]．現実的分散モデルを適用し，温度は 300 K とした．

確認できる．これは，フォノンの平均自由行程 λ が，非常に幅の広いテイルを伴って分布していることを反映した結果と考えられる [31].

図 2.17 は，バルク Si の熱伝導率の温度依存性を MC シミュレータで計算した結果である．この時，式 (2.16)〜(2.18) 中に現れる各種散乱パラメータとして表 2.1 の値を用いた．⟨100⟩ 近似のフォノン分散関係を用いた場合，このモデルを用いた過去の文献 [20] と同じ散乱パラメータを用いることで，実験結果 [28] と良い一致を得られることを確認した．一方，現実的な分散モデルを用いた場合は，表 2.1 のようにパラメータ再調整を行うことで，同様に実験値の再現が達成できた．図 2.18 にそれぞれ 3 K，300 K の時のフォノン各種散乱確率のフォノンエネルギー依存性を示す．図 2.18(a) でもわかるように極低温領域では，フォノン-欠陥散乱やフォノン-境界散乱 A が輸送特性を決定する支配的要因となる．これらの散乱に加え，極低温では図 2.8 に示したように比熱が低下することで，熱伝導率の値が小さくなる．さらにフォノン-欠陥散乱やフォノン-境界散乱確率は温度に依存しないため，10〜30 K の領域へ温度が上がると比熱の上昇に伴い，熱伝導率の値が大きくなる．

さらに温度が 100 K 〜室温以上に達すると，図 2.8 のように比熱が飽和し，輸送特性はフォノン-フォノン散乱が支配する．図 2.18(b) からもそのことが確認できる．フォノン-フォノン散乱確率は式 (2.16) で示すように温度上昇に伴い，増大し続けるため，これ以上の温度領域では熱伝導率の値は低下する．

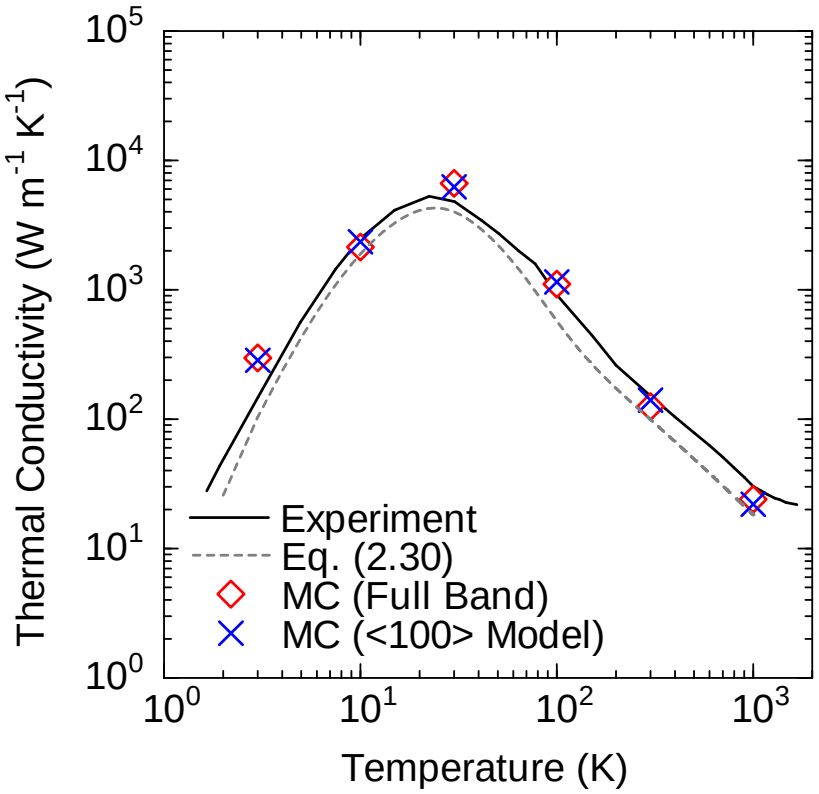

図 2.17: バルク Si の熱伝導率の温度依存性．MC シミュレーションの結果 (印) を実験値 (実線) [28] と比較した．破線は，式 (2.30) を用いて解析的に計算した結果である．

表 2.1: フォノンの緩和時間を求める際仮定したパラメータ値．バルク Si の熱伝導率を再現するためには，現実的フォノン分散モデルを用いた場合と ⟨100⟩ 近似モデルを用いた場合では異なる値を設定しなければならない．

Parameter	Full band	⟨100⟩ model [20]
A_{TA} ($\times 10^{-12}$ $\mathrm{s}^{\chi_{\mathrm{TA}}-1}\mathrm{K}^{-\xi_{\mathrm{TA}}}$)	1.05	0.7
A_{LA} ($\times 10^{-21}$ $\mathrm{s}^{\chi_{\mathrm{LA}}-1}\mathrm{K}^{-\xi_{\mathrm{LA}}}$)	4.5	3.0
B_{TA} (K)	0	0
B_{LA} (K)	0	0
χ_{TA}	1	1
χ_{LA}	2	2
ξ_{TA}	3.86	4
ξ_{LA}	1.36	1.5
C ($\times 10^{-45}$ s^3)	4.95	1.32
L (mm)	7.16	7.16
F	0.33	0.55

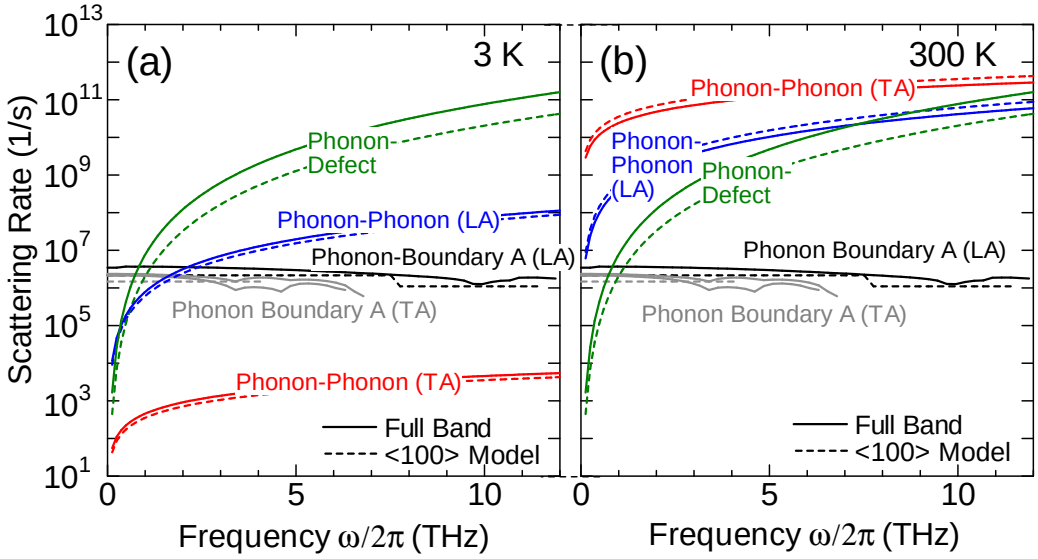

図 2.18: 表 2.1 でパラメータ定義した格子温度 (a)3 K，(b)300 K におけるフォノン-フォノン散乱，フォノン-欠陥散乱，フォノン-境界散乱 A の周波数依存性．

さらに図 2.17 では，MC 法による熱伝導率算出のプロセスの妥当性を検証するため，ボルツマン輸送方程式から求められる解析式 [20]

$$\kappa = \frac{1}{3}\sum_{p\in \mathrm{AC}}\int d\omega \bar{v}_p(\omega)^2\tau(\omega,p)c_v(\omega,p) \tag{2.30}$$

を用いて計算した結果もプロットした．ここで，p は音響モードのみに対して和を取るものとした．この時，ボルツマン輸送方程式で仮定した分散は $\langle 100\rangle$ 近似モデルであり，用いたパラメータは表 2.1 に示されるものである．$\langle 100\rangle$ 近似モデルによる MC シミュレーションの計算結果は，この理論式とよく一致しており，1 粒子法による算出は妥当なものであると考えられる．

一般的に熱伝導率は簡易的には

$$\kappa = \frac{1}{3}C_V\bar{v}^2\bar{\tau} = \frac{1}{3}C_V\bar{v}\bar{\lambda} \tag{2.31}$$

で示される式で表現することができる．この時，$\bar{v}$ はフォノンの平均群速度，$\bar{\tau}$ はフォノンの平均緩和時間，$\bar{\lambda}$ はフォノンの平均自由行程である．このうち，フォノン分散関係から決定することができる物理量は比熱 C_V とフォノン群速度 $\bar{v}$ である．本研究ではフォノン分散関係に基づきこれらの量を高精度に取り入れることで散乱確率をより正確に決定し，パラメータ任意性を排除できた．

2.4.2 シリコン薄膜の熱伝導率

MC シミュレーションを用いて薄膜 Si の熱伝導率計算を試みた．薄膜やワイヤ等といったナノ構造内における輸送特性はフォノンが境界に衝突した時のフォノン-境界散乱の影響が支配的となる．そのため，フォノンの平均自由行程が構造内部で大きく低下し，熱伝導率が小さくなる．

本研究では，フォノン閉じ込め効果による分散関係の変調効果 [32] は考慮せず，バルク Si の分散関係を用い，3 次元 MC シミュレータを用いて薄膜中の熱伝導解析を行った．図 2.19 にシミュレーション方法の概念図を示す．厚み方向 (z 方向とする) に t_{si} だけ離れた平行平板を導入し，これら 2 つの壁に挟まれた領域内のフォノンの運動を追跡した．平行平板内のある初期座標に配置した MC 粒子の時間発展を追跡しそれらの変位から，2 次元方向の拡散距離を求める．なお，フォノン散乱確率は **2.4.1** で較正した値をそのまま使用した．バルクの場合と同様，熱伝導率の値は関係式 $\kappa = C_V D_{\mathrm{2D}}$ から計算した．ここで，2 次元拡散係数は以下の式から求められる．

$$D_{\mathrm{2D}} = \frac{1}{2N^* t_{\mathrm{sim}}}\sum_{i=1}^{N^*}\frac{(x_i-\bar{x})^2+(y_i-\bar{y})^2}{2} \tag{2.32}$$

フォノンが境界の壁に当たったとき，透過は考慮せず完全に反射される弾性散乱を仮定した．その際，反射角をランダムな方向とすることで，拡散的な境界散乱を表現することができる．実際には，境界散乱は完全に拡散的に反射されるものと，鏡面的に反射されるものが存在する．鏡面的な散乱は反射前の散乱角を維持するため，熱伝導率の値を低下させない．従来の報告では，上記拡散的散乱に加え，鏡面散乱を一部付与することで実験値の再現を図り，境界散乱強度の調整を行ってきた [6,8]．

本研究では，境界散乱としてまず 100 % 拡散的な散乱を仮定した．その後，実験値との比較を行い，鏡面性の程度を検証した．拡散的な散乱機構を MC シミュレータ上で再現するものとして過去の文献では，しばしば散乱角 θ の決定に次式が用いられてきた [6,8]．

$$\cos\theta = R \tag{2.33}$$

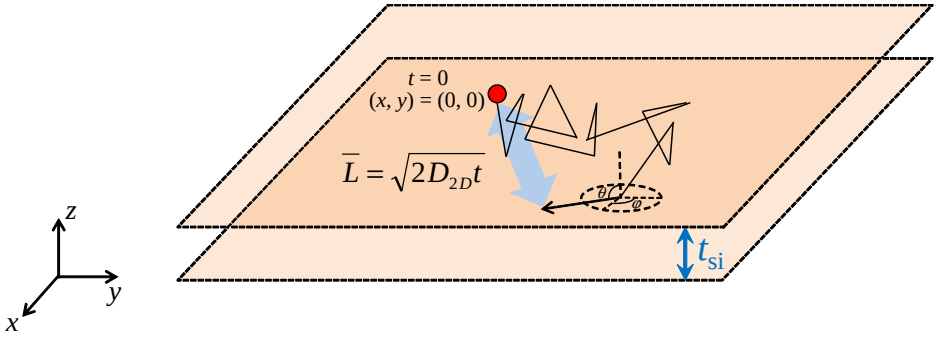

図 2.19: 薄膜 Si におけるフォノン MC シミュレーションによる熱伝導率解析の概念図．2 次元方向への拡散距離を 1 粒子法を用いて計算することで薄膜における拡散係数を算出する．

ここで，R は $[0,1]$ の一様乱数である．この方法では，境界のラフネスによるフォノンの拡散的散乱を図 2.20 (a) に示すように等方的な θ の生成で表現する．しかしながら，今回開発した MC シミュレータにこの反射アルゴリズムを適用したところ，図 2.21 (a) に示すようにフォノン分布 (= 温度分布) が自発的に不均一になるという，物理的に不適切な結果をもたらすことが分かった．

この困難を回避するため，図 2.20 (b) に示すような，ランバートコサイン則に基づく，より現実的な界面反射アルゴリズム [9,11,33] を今回導入した．この反射則は，他分野，たとえばコンピュータグラフィクスで荒れた面での光の反射を表現するとき [34] や，希薄な気体の管中の輸送を解析する際 [35] などに広く用いられている．完全な拡散的反射境界における反射強度は $\cos\theta$ に比例し，

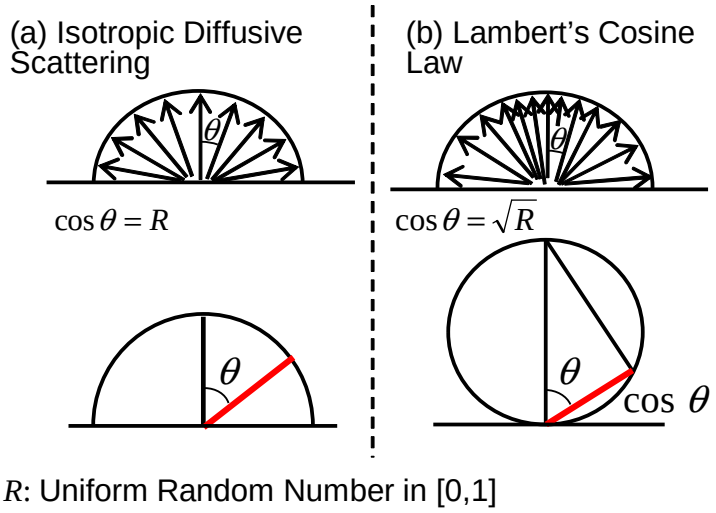

図 2.20: 境界におけるフォノンの拡散的反射モデルの概念図．(a) では反射角 θ を式 (2.33) に従ってランダムに決定．また，(b) では θ をランバートコサイン則とよばれる式 (2.34) で決定．θ の分布の強度は数の円内に示した赤線の長さに比例する．

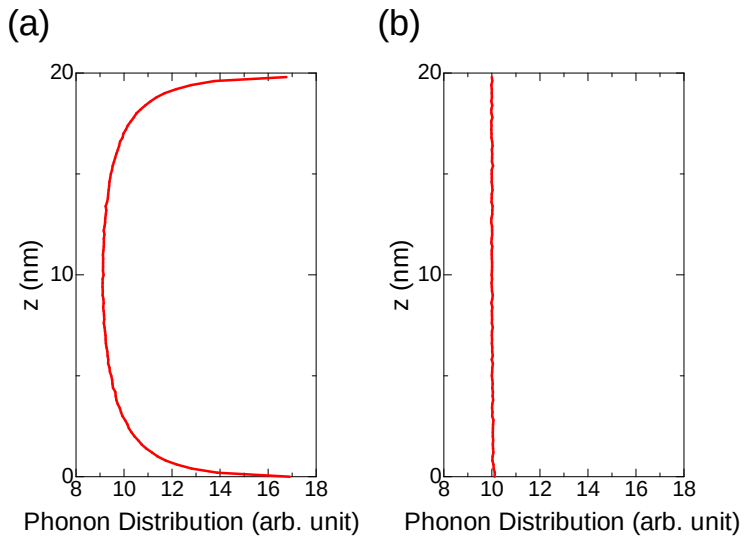

図 2.21: 厚さ $t_{\mathrm{si}} = 20$ nm のシリコン薄膜内部のフォノン密度分布のシミュレーション結果．(a) と (b) は，それぞれ式 (2.33) と式 (2.34) に基づき界面での拡散的反射を取り扱った場合に得られた結果である．

散乱角は式 (2.33) の代わりに

$$\cos\theta = \sqrt{R} \tag{2.34}$$

で決定される．このアルゴリズムを用いることで，図 2.21 (b) に示すように，膜内で一様なフォノン分布が得られることを MC シミュレーションで確認した．

図 2.22 は，シリコン薄膜の熱伝導率を厚さ t_{si} に対してプロットした結果である．比較のため，実験値 [36–39] も示している．実験値は Bonding and Etch back Silicon on Insulator (BESOI) 法で作製された SOI 中の Si 薄膜の熱伝導率を測定したものである．BESOI 法とは，Si 酸化膜上に直接 Si 薄膜を形成するのが困難なため，エッチストップ層を設けた Si ウエハと表面を酸化した Si ウエハの 2 種類を用いて SOI 作製を行う手法である．2 種類のウエハをボンディング熱処理し，さらに所望の位置に形成したエッチストップ層から上の部位を選択的に除去することで SOI 基板を作製する．こうすることで，スムースな界面を有する SOI 基板を作製することができる．実験では薄膜 Si 層中に p-シリコンドープ領域を形成することで熱源領域を設け，ヒーターから十分離れた箇所に金属（アルミニウム）を設置して温度抽出を行うことで，フーリエ則の式と比較して熱伝導率を算出している [36]．この時，金属部位における温度は 4 端子法を用いて抵抗と温度の関係から測定することができる．Si 酸化膜は Si と比較すると熱伝導率がおよそ 100 分の 1 と小さいため，膜厚を十分にとることでその部分への熱逃げを無視して考えることができる．

図 2.22 のように，MC シミュレーション上で薄膜の上下境界部分においてランバートコサイン則による完全な拡散的反射を仮定した場合，実験値で現れているような 20 nm の薄膜領域までの熱伝導率の膜厚依存性を良好に再現することができた．

一方，式 (2.33) に基づく境界反射を用いた場合には，膜厚減少に伴う κ の低下の挙動を正しく再現することができなかった．式 (2.33) を用いた場合，大きな散乱角 θ が生成される確率が高いため，膜厚方向のフォノン速度成分は小さくなる傾向にある．これが，粒子が境界に衝突する頻度を低下させ，その結果熱伝導率が高く見積もられるのである．フォノン境界散乱はナノ領域におい

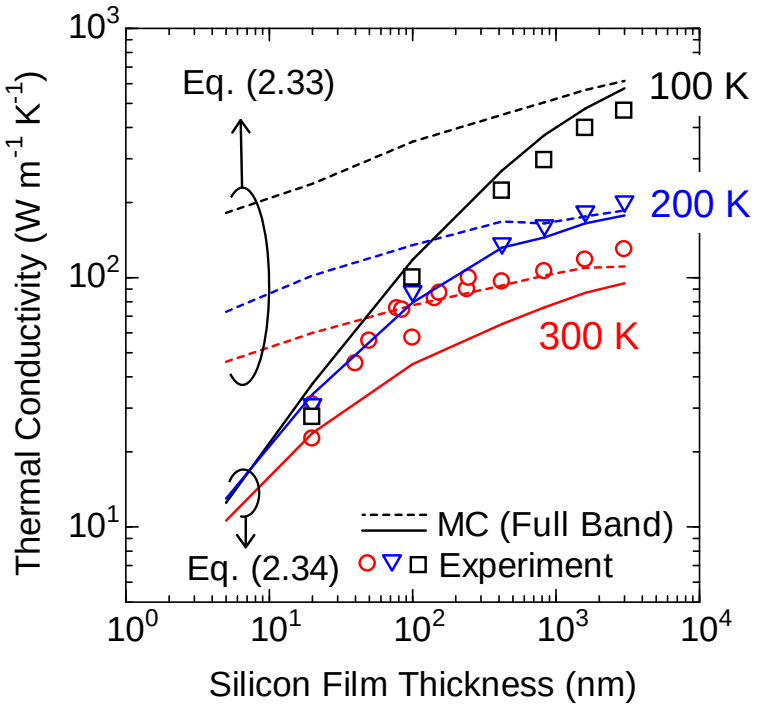

図 2.22: 薄膜 Si の熱伝導率の厚さ依存性．境界散乱のアルゴリズムとして式 (2.33) (破線) および式 (2.34) (実線) を仮定した場合の MC 法による計算結果を実験値 [36–39] と比較した．MC 法で想定した分散関係は現実的モデルである．

て κ を低下させる主要因であるので，その正確な取り扱いは極めて重要であるといえる．

図 2.23，図 2.24 は，それぞれ現実的分散モデル，⟨100⟩ 近似分散モデルを用いて薄膜 Si 中の κ の温度依存性をシミュレーションした結果である．ここでは，フォノン-境界散乱のアルゴリズムとして，ランバートコサイン則を適用し，100% 拡散的な反射を仮定している．現実的なフォノン分散モデルを用いることで，実験結果を良好に再現することができた．一方，⟨100⟩ 近似モデルでは，特に低温域における κ を小さく見積もりすぎる結果が得られた．この状況は，たとえば，界面散乱に完全な拡散的反射を適用する代わりに，一部鏡面的反射成分を混ぜる (確率的に生起させる) ことで改善することも可能である [6]．確かに極低温では，そのような物理的状況があり得るとの指摘もあるが [40]，ある程度の温度以上では (>∼ 30 K)，フォノン界面散乱は完全な拡散的反射であると考えられている．今回の MC シミュレーションの結果はこの考え方と一致するものである．本研究においてはフォノン分散関係に関するパラメータ任意性を除外したことで，フォノン境界散乱機構をより精密に評価できるようになったことを考えると，境界散乱は拡散的反射が支配的であると結論できる．

しかし，図 2.23 の結果をよく見ると，高温領域において計算結果はわずかに測定値を過小評価している．実際の散乱ではある界面ラフネスに対しフォノンが拡散的，あるいは鏡面的に反射されるかはフォノンの持つモードや，運動量に依存すると考えられる [41]．より厳密にシミュレートするにはこういった効果の導入が必要となってくる．鏡面散乱の付加は低温領域における熱伝導率値も上昇させるため，MC シミュレーション上にどう組み入れていくかが今後の検討課題といえる．

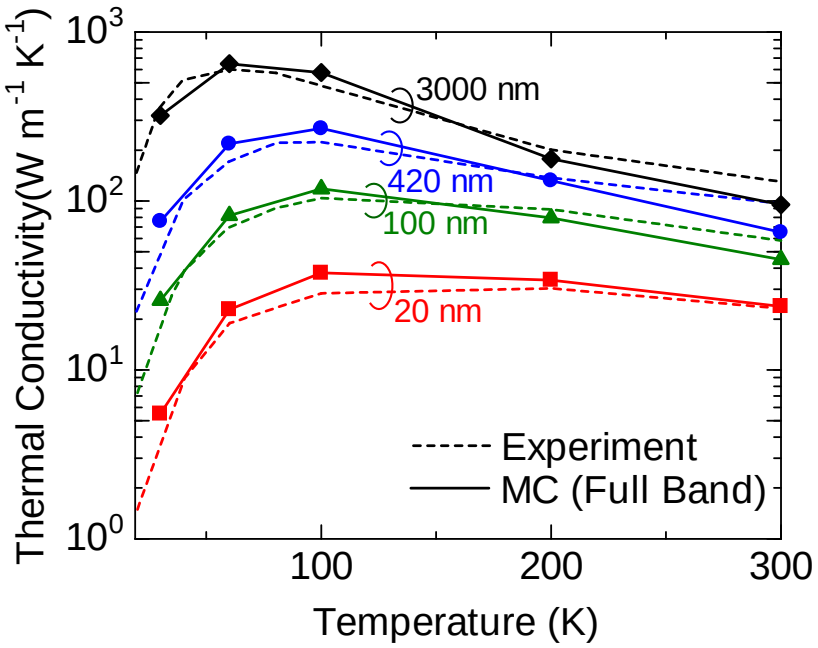

図 2.23: 薄膜 Si(膜厚 $t_{\mathrm{si}} = 20, 100, 420, 3000$ nm) の熱伝導率の温度依存性．現実的フォノン分散モデルを取り入れ MC シミュレータでの計算結果を実験値 [36–39] と比較した．

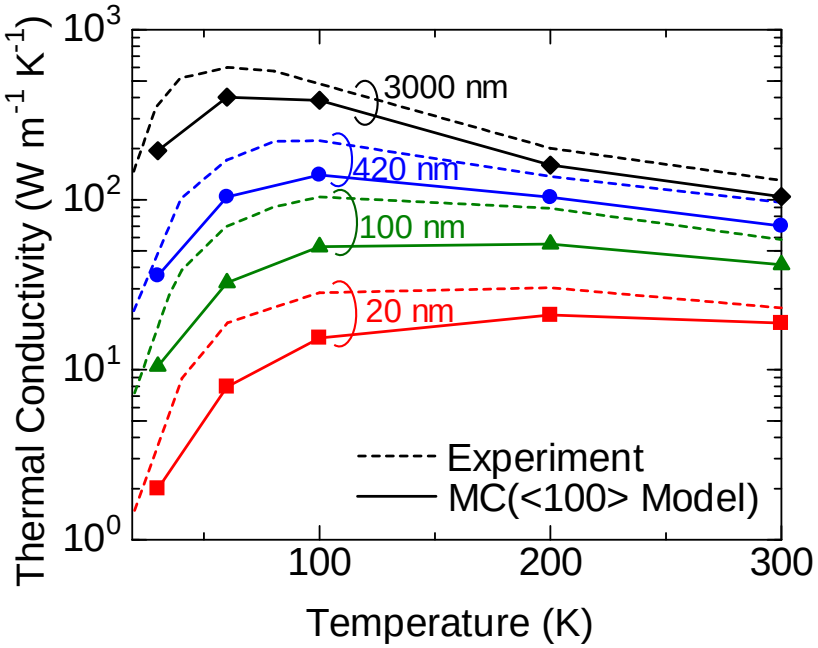

図 2.24: 薄膜 Si(膜厚 $t_{\mathrm{si}} = 20, 100, 420, 3000$ nm) の熱伝導率の温度依存性．⟨100⟩ 近似フォノン分散モデルを取り入れ MC シミュレータでの計算結果を実験値 [36–39] と比較した．

2.4.3 シリコンナノワイヤの熱伝導率

前節と同様のアプローチでシリコンナノワイヤの熱伝導率をシミュレーションした．図 2.25 にシミュレーション方法の概念図を示す．ワイヤの断面は円形と仮定し，直径 d_{si} の円柱内部におけるフォノンの運動を追跡することにより得られる 1 次元方向の拡散距離より拡散係数 D_{1D} を求める．熱伝導率の値は前節と同様 1 粒子法を用いて関係式 $\kappa = C_V D_{\mathrm{1D}}$ から計算した．この時，1 次元拡散係数は以下の式から求められる．

$$D_{\mathrm{1D}} = \frac{1}{2N^* t_{\mathrm{sim}}} \sum_{i=1}^{N^*} \frac{(x_i - \bar{x})^2}{2} \tag{2.35}$$

円筒壁面においては薄膜と同様にまず完全な拡散的反射 (ランバートコサイン則) を仮定して，MC 粒子を運動させて κ を計算し，その後鏡面性の付与を検討した．図 2.26 に Si ナノワイヤにおけるフォノンの密度分布をシミュレーションした結果を示す．ランバート則は Si ナノワイヤにおいても均一な密度分布を形成し，有効であることが確認できる．図 2.27，図 2.28 にシミュレーション結果と実験値 [42] の比較を示す．それぞれ現実的分散モデル，⟨100⟩ 近似分散モデルを適用して計算を行った結果である．

実験値は Vaper Liquid Solid(VLS) 法 [43] で作製された Si ナノワイヤの熱伝導率を測定したものである．VLS 法ではまず，触媒となる金等金属の微粒子を Si 基板表面に付着させる．ここに原料ガスを供給することで金属は合金へと変化し溶媒となる．さらに原料ガスを供給することで過飽和状態へと変化すると今度は Si 基板との間に半導体が核形成されていく．これにより表面状態が良好な Si ナノワイヤが成長していく．実際に本手法により作製されるワイヤの表面状態はスムースであることが SEM 写真等で確認できる [42]．作製した Si ナノワイヤを SiN を支柱としてブリッジ上に設置し，SiN 間上に形成した金属 Pt をヒーター，並びに温度制御層として用い，ワイヤに

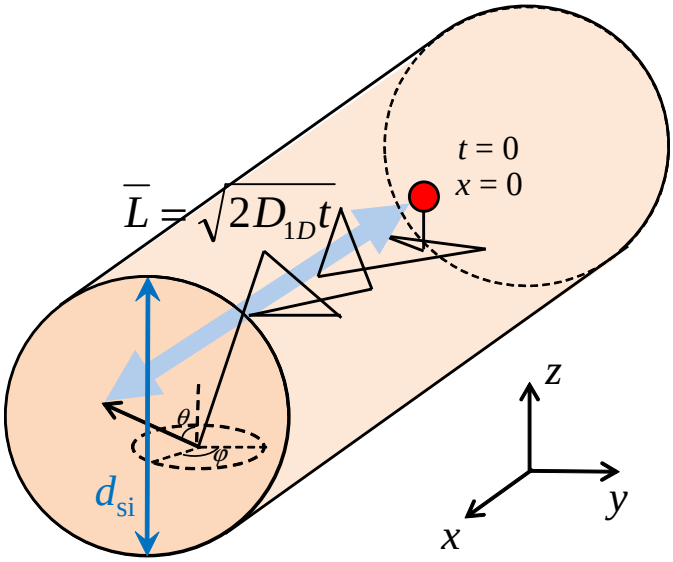

図 2.25: Si ナノワイヤにおけるフォノン MC シミュレーションによる熱伝導率解析の概念図．1 次元方向への拡散距離を 1 粒子法を用いて計算することで薄膜における拡散係数を算出する．

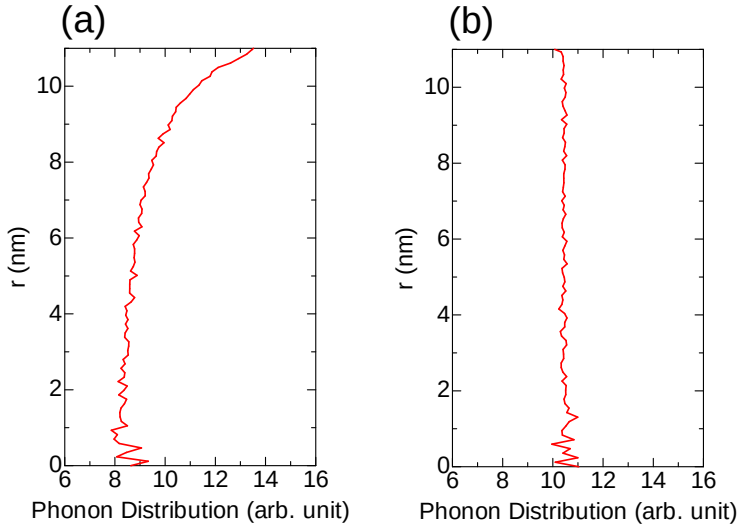

図 2.26: 直径 $d_{\mathrm{si}} = 22$ nm の Si ナノワイヤ内部のフォノン密度分布のシミュレーション結果．ワイヤ中心からの任意の位置座標 r における分布を円周値 $2\pi r$ で規格化した値を示している，(a) と (b) は，それぞれ式 (2.33) と式 (2.34) に基づき界面での拡散的反射を取り扱った場合に得られた結果である．

流れる熱流を測定することで熱伝導率を測定する．この時 Si ナノワイヤ中の熱流は既知の熱抵抗材料をワイヤ端に接続することで測定することができる [44].

図 2.27 に示されるように現実的分散モデルを用いた場合，直径 37 nm 以上のワイヤに関しては測定値と良好に一致する結果が得られた．一方これに ⟨100⟩ 近似分散モデルを適用した場合では，図 2.28 に示すように全体的に熱伝導率を過小評価する傾向が得られ，実験値を再現するためには鏡面散乱の付与が必要であることがわかった．以上より薄膜の時と同様，ワイヤに関してもフォノン境界散乱機構は拡散的反射が支配的であると考えることができる．図 2.29 はシミュレータで計算した径 37 nm の Si ナノワイヤにおける MC 粒子の軌跡をプロットしたものを示している．分散モデルとして現実的モデルを適用した．高温時では，ワイヤ内部における散乱が観測できるが，これはフォノン-フォノン散乱やフォノン欠陥散乱によるものだと考えられる．つまり，輸送特性はバルク散乱と界面による散乱の両者の影響により決定される．一方低温になると，散乱はほぼ境界のみで行われており，輸送特性は境界散乱が律速となる様子がわかる．

一方で，図 2.27 に着目すると最も細い径 22 nm のワイヤに関してはシミュレーション結果が値を高く見積もっている．この原因として考えられるのは，フォノンの持つ波動性が輸送特性にもたらす影響である．つまり細いワイヤではフォノンの閉じ込め効果が顕在化し，図 2.2 で示されるフォノン分散の縮退が解けることで，Γ 点近傍で平坦なモードが出現する．これによってフォノン群速度の値が低下する等の影響が現れると考えられている [45]．本研究で用いた分散はバルク中のものであるため，今後シミュレーションの高精度化に向けてこういった波動性の影響等新たな物理機構が熱伝導に与える影響について今後更なる検討が必要となる．

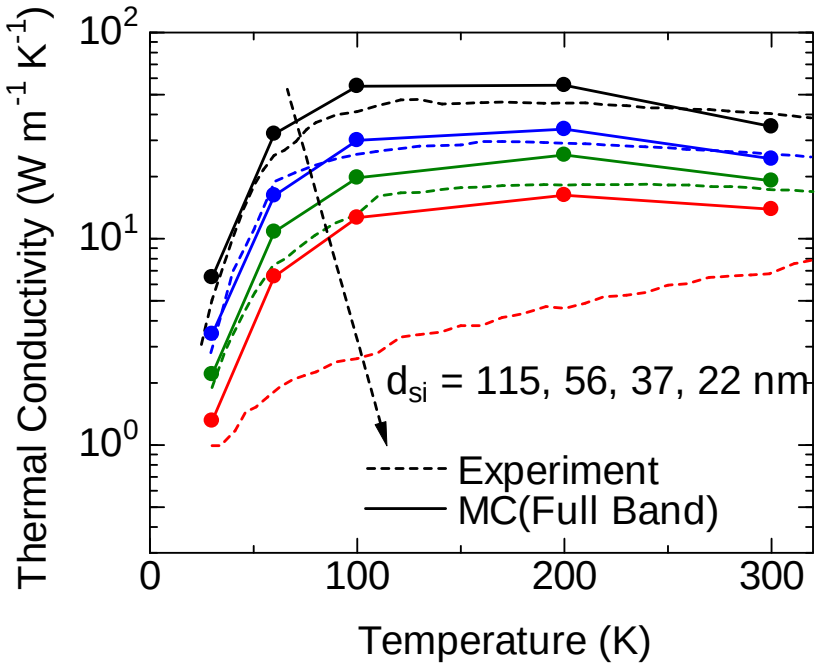

図 2.27: Si ナノワイヤ (直径 $d_{\mathrm{si}} = 22, 37, 56, 115$ nm) の熱伝導率の温度依存性．現実的フォノン分散モデルを取り入れ MC シミュレータでの計算結果を実験値 [42] と比較した．

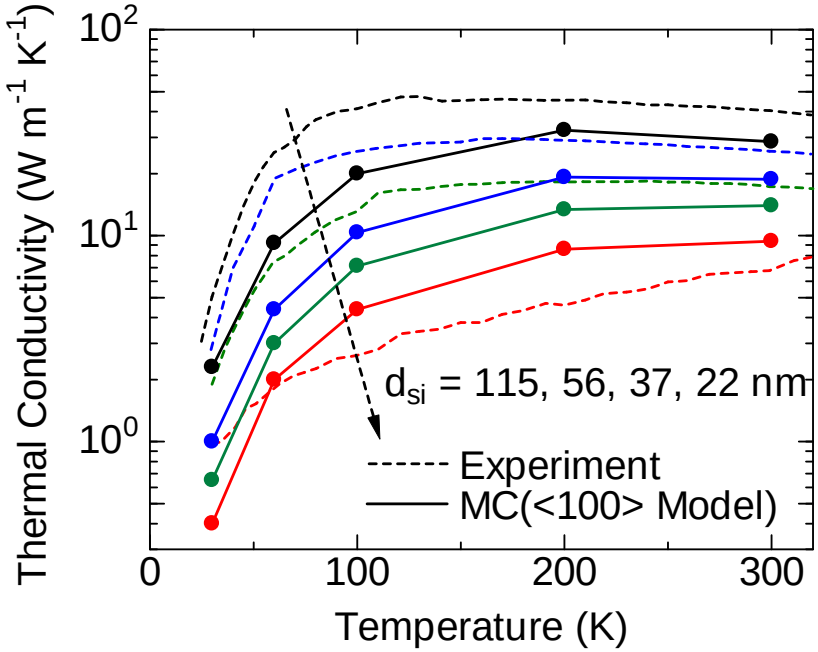

図 2.28: Si ナノワイヤ (直径 $d_{\mathrm{si}} = 22, 37, 56, 115$ nm) の熱伝導率の温度依存性．$\langle 100 \rangle$ 近似分散モデルを取り入れ MC シミュレータでの計算結果を実験値 [42] と比較した．

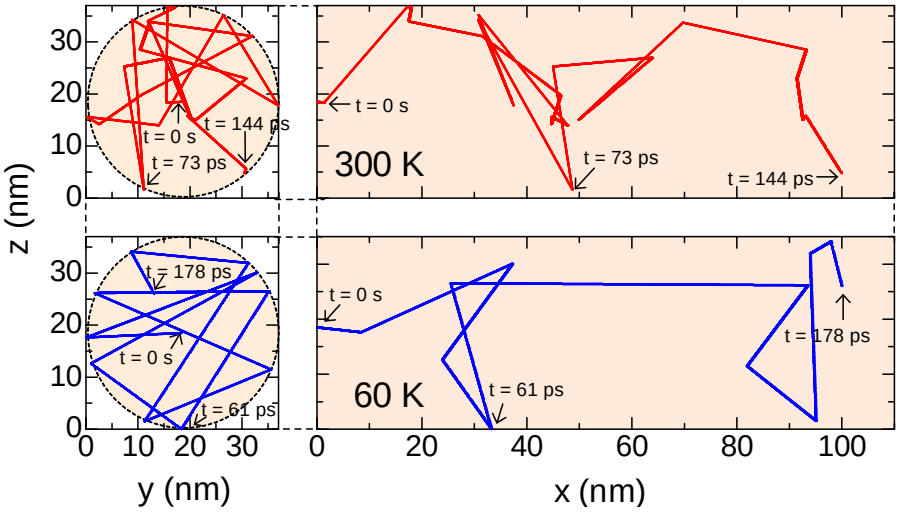

図 2.29: MC シミュレーションより得られる Si ナノワイヤ ($d_{\mathrm{si}} = 37$ nm) 中のフォノンの挙動．現実的分散モデルを適用した．それぞれ格子温度 300 K，60 K の場合を示す．

2.4.4 フォノン分散関係の影響についての考察

本研究の MC シミュレーションの結果をもとに，フォノン輸送特性に分散関係モデルの精度が与える影響について考察する．図 2.30 は，比熱の重みを考慮して平均化した音響 (AC) フォノンの群速度

$$\langle v \rangle = \frac{\sum_{p \in \mathrm{AC}} \int d\omega \bar{v}_p(\omega) c_v(\omega, p)}{C_V} \tag{2.36}$$

である．図 2.2 に示した現実的フォノン分散モデルと $\langle 100 \rangle$ 近似分散モデルを用いて計算した．さらに，この $\langle v \rangle$ を用いることで，次の関係式 [46] からフォノン平均自由行程

$$\langle \lambda \rangle = \frac{3\kappa}{C_V \langle v \rangle} \tag{2.37}$$

を求めた．この結果は図 2.31 に示す．

$\langle 100 \rangle$ モデルではフォノン群速度が高めに見積もられていることが分かる．これは，図 2.6 に示した $\bar{v}_p(\omega)$ の比較からも容易に推測できる．既に **2.4.1** で見たように，たとえ分散モデルにより $\langle v \rangle$ や C_V が異なっていたとしても，フォノンの緩和時間を調整することで正しい $\kappa(T)$ を出力するようシミュレータを調整することはできる．しかしながら，フォノンの平均自由行程は，両モデルで必ずしも一致するとは限らず，これは図 2.31 の結果を見ても明らかである．フォノンの平均自由行程が両分散モデルで大きく異なる理由は，図 2.30 に示すフォノン群速度の違いよりも，むしろ図 2.8 に示す比熱の違いによるところが大きい．$\langle 100 \rangle$ 近似分散モデルでは 2 分の 1 以上比熱が過小評価されることから，式 (2.31) 上で現実的分散モデルと同じバルク Si の熱伝導率を得るためには，フォノン平均自由行程を高く設定する必要がある．これが図 2.31 に両者の相違が現れた理由である．

薄膜，ワイヤといったナノ構造においてフォノン界面散乱が κ に対してどれほど影響するのかは，バルクのフォノン平均自由行程と系のサイズの比とに密接な関連があり [47]，図 2.23，図 2.24

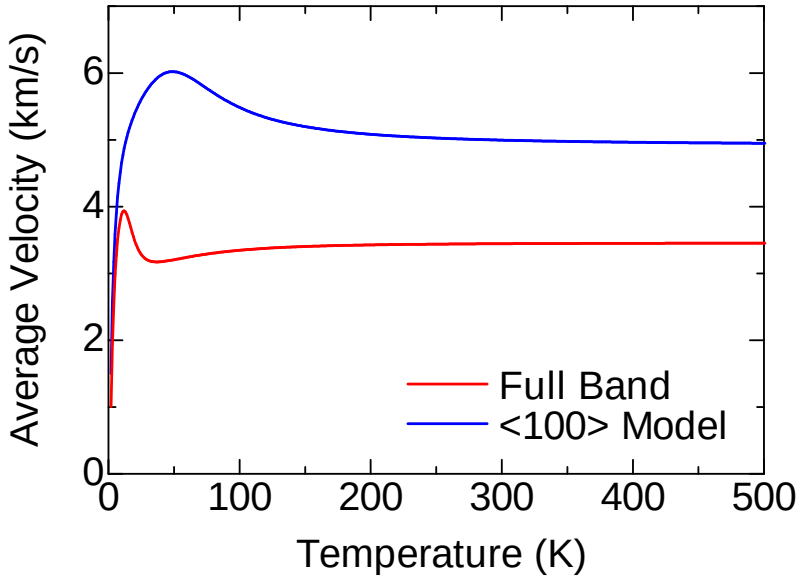

図 2.30: 式 (2.36) より計算した比熱の重みを考慮して平均化した音響 (AC) フォノンの群速度の温度依存性．現実的フォノン分散モデルと ⟨100⟩ 近似モデルを用いた場合について比較した．

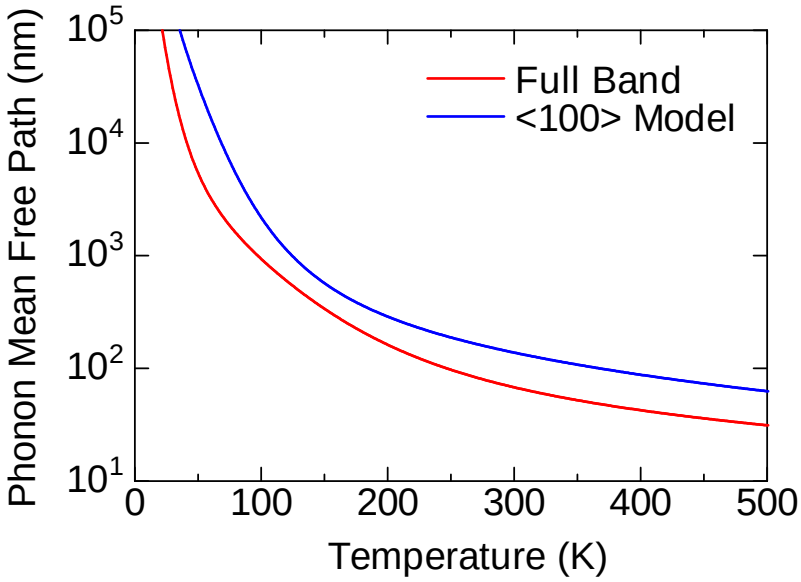

図 2.31: 式 (2.37) より計算したフォノン平均自由行程の温度依存性．現実的フォノン分散モデルと ⟨100⟩ 近似モデルを用いた場合について比較した．

および図 2.27，図 2.28 で確認された結果は，$\langle\lambda\rangle$ の違いによるものと解釈できる．この影響がナノ構造においてどの程度発現するかを知るためにはバルク中におけるフォノンの平均自由行程分布が役に立つ．そこでフォノン平均自由行程分布として以下式で示される単位平均自由行程あたりの熱伝導率 $\kappa(l)$ を考える．

$$\kappa = \int_0^\infty \kappa(l)dl, \quad \kappa(l) = -\frac{1}{3}\sum_{p\in\mathrm{AC}} c_v(\omega,p)\bar{v}_p(\omega)l\frac{d\omega}{dl} \tag{2.38}$$

これはフォノン平均自由行程 l で積分することでバルク Si の κ となる値であり，各平均自由行程における κ への寄与を示している．図 2.32，図 2.33 にそれぞれ 300 K，60 K の時のバルク Si におけるフォノン平均自由行程分布を MC シミュレータで計算した結果を示す．図に示されているように分散を近似化することで，長い平均自由行程を持つフォノン数を過大評価していることがわかる．バルク中におけるフォノン平均自由行程分布のテイルが長くなると，ナノ構造化した際，境界散乱により長い平均自由行程を持つフォノンがより多くカットオフされる．つまり $\langle 100\rangle$ 近似分散モデルを適用することで．このカットオフ成分が過大に見積もられることで，界面散乱の影響が顕在化しやすい．このため，分散を近似化すると狭い空間に閉じ込められたフォノン熱伝導率は，より顕著に低下するのである．

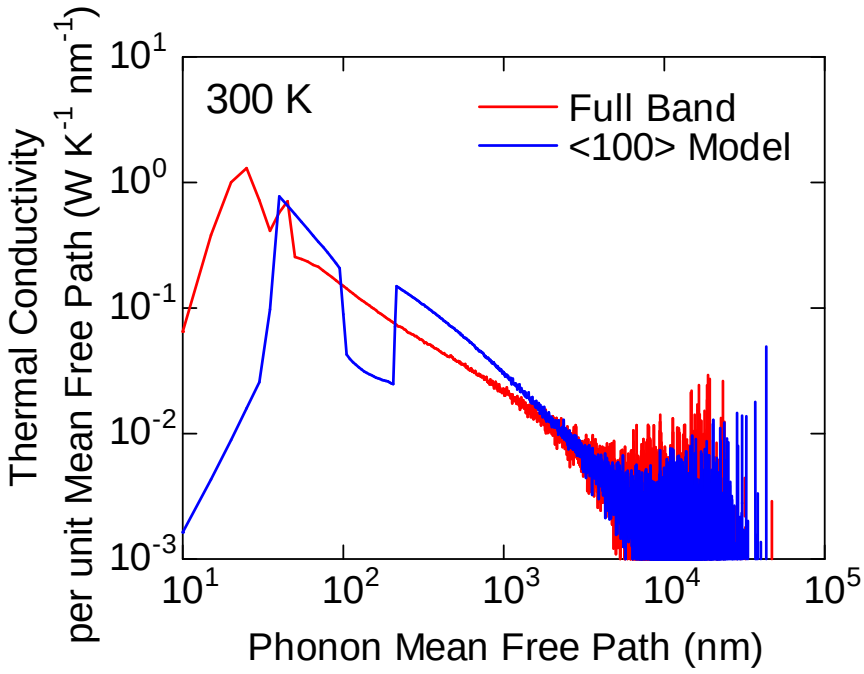

図 2.32: MC シミュレータより得られる式 (2.38) に従う単位平均自由行程あたりの熱伝導率 $\kappa(l)$．格子温度 300 K を仮定した．現実的フォノン分散モデルと $\langle 100\rangle$ 近似モデルを用いた場合について比較した．

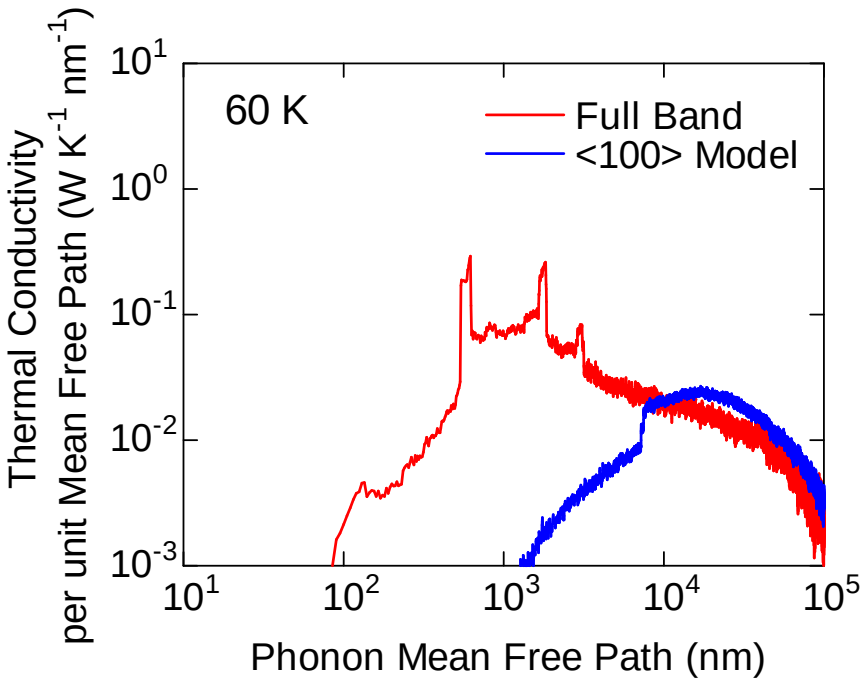

図 2.33: MC シミュレータより得られる式 (2.38) に従う単位平均自由行程あたりの熱伝導率 $\kappa(l)$．格子温度 60 K を仮定した．現実的フォノン分散モデルと $\langle 100 \rangle$ 近似モデルを用いた場合について比較した．

2.5 まとめ

フォノンのボルツマン輸送方程式を直接解く MC シミュレータを作成し，熱伝導率計算にあたり，高効率化を実現する新規アルゴリズムの導入，また物理モデルの高精度化を行った結果以下のような知見を得た．

- フォノンの分散関係より，状態密度，フォノン群速度，並びに比熱の計算を行った．その結果，従来用いられてきた Γ-X 方向のみをフィッティングした近似分散モデルは W，U，K 点近傍においてモデリング精度が悪化することで，特に比熱を過小評価することがわかった．
- MC 粒子に対する重み付与に対し周波数依存型の新規アルゴリズムを導入することで，1 粒子法を用いた熱伝導率計算を可能にし，従来 MC 法で用いられきた手法と比較して，大幅に計算効率を改善することが出来た．
- フォノン分散関係に対しボンドチャージモデルより求めた現実的分散モデルを適用することで物理モデルの高精度を施し，バルク Si の熱伝導率計算を行った結果，パラメータ任意性の低いシミュレータの開発を行うことができた．
- MC シミュレータで薄膜 Si の熱伝導率の計算を行った．フォノン-境界散乱に対し，ランバート則に従う拡散的反射アルゴリズムを導入することで，極薄膜域まで測定値を良好に再現する傾向が得られた．さらに，異なる分散モデルで計算を行い比較したところ，近似モデルを適用した場合では測定値の再現のために，境界散乱に対し鏡面性を一部付与する必要があるが，現実的モデルでは鏡面性に関するパラメータを調整することなく，熱伝導率の値を良好に再現出来た．これは分散の近似化が平均自由行程の長いフォノンを過大に生成することに起因する．本結果より，境界散乱は拡散的反射が支配的であることがわかった．
- Si ナノワイヤの熱伝導率の計算を行った結果，37 nm 以上のワイヤ径に関しては薄膜 Si と同様の結論が得られるが，22 nm のワイヤ径では測定値を過大評価していることから，フォノン分散に対しての閉じ込め効果等新たな物理機構の導入等が必要であることが考えられる．

参考文献

[1] T. Zushi, Y. Kamakura, K. Taniguchi, I. Ohdomari, and T. Watanabe,“ Molecular Dynamics Simulation of Heat Transport in Silicon Nano-structures Covered with Oxide Films, ”Jpn. J. Appl. Phys. **49**, 04DN08 (2010).

[2] R, B. Peterson,“ Direct Simulation of Phonon-Mediated Heat Transfer in a Debye Crystal, ” ASME J. Heat Trans. **116**, 815 (1994).

[3] C. Jacoboni and P. Lugli, *The Monte Carlo Method for Semiconductor Device Simulation* (Springer, Berlin, 1989).

[4] M. V. Fischetti and S. E. Laux, “ Monte carlo analysis of electron transport in small semiconductor devices including band-structure and space-charge effects, ”Phys. Rev. B **38**, 9721 (1988).

[5] Y. Kamakura, H. Mizuno, M. Yamaji, M. Morifuji, K. Taniguchi, C. Hamaguchi, T. Kunikiyo, and M. Takenaka, “ Impact ionization model for full band Monte Carlo simulation, ” J. Appl. Phys. **75**, 3500 (1994).

[6] S. Mazumder, and A. Majumdar, “ Monte Carlo Study of Phonon Transport in Solid Thin Films Including Dispersion and Polarization, ”ASME J. Heat Trans. **123**, 749 (2001).

[7] D. Lacroix, K. Joulain, and D. Lemonnier, “ Monte Carlo transient phonon transport in silicon and germanium at nanoscales, ”Phys. Rev. B **72**, 064305 (2005).

[8] Y. Chen, D. Li, J. R. Lukes, and A. Majumdar,“ Monte Carlo Simulation of Silicon Nanowire Thermal Conductivity, ”ASME J. Heat Trans. **127**, 1129 (2005).

[9] M.-S. Jeng, R. Yang, D. Song, and G. Chen, “ Modeling the Thermal Conductivity and Phonon Transport in Nanoparticle Composites Using Monte Carlo Simulation, ”ASME J. Heat Trans. **130**, 042410 (2008).

[10] A. Mittal, and S. Mazumder, “ Monte Carlo study of phonon heat conduction in silicon thin films including contributions of optical phonons, ”ASME J. Heat Trans. **132**, 052402 (2010).

[11] B. T. Wong, M. Francoeur, and M. P. Menguc, “ A Monte Carlo simulation for phonon transport within silicon structures at nanoscales with heat generation, ”Int. J. Heat Mass Trans. **54**, 1825 (2011).

[12] C. Bera, “ Monte Carlo simulation of thermal conductivity of Si nanowire: An investigation on the phonon confinement effect on the thermal transport, ”J. Appl. Phys. **112**, 074323 (2012).

[13] E. B. Ramayya, L. N. Maurer, A. H. Davoody, and I. Knezevic, “ Thermoelectric properties of ultrathin silicon nanowires, ”Phys. Rev. B **86**, 115328 (2012).

[14] A. J. H. McGaughey, and A. Jain, “ Nanostructure thermal conductivity prediction by Monte Carlo sampling of phonon free paths, ”Appl. Phys. Lett. **100**, 061911 (2012).

[15] K. Kukita and Y. Kamakura, “ Monte Carlo simulation of phonon transport in silicon including a realistic dispersion relation, ” J. Appl. Phys. **114**, 154312 (2013).

[16] K. Kukita, I. N. Adisusilo, and Y. Kamakura, “ Monte Carlo Simulation of Thermal Conduction in Silicon Nanowires Including Realistic Phonon Dispersion Relation , ” Jpn. J. Appl. Phys. **53**, 015001 (2014).

[17] W. Weber, “ Adiabatic bond charge model for the phonons in diamond, Si, Ge, and α-Sn, ” Phys. Rev. B **15**, 4789 (1977).

[18] G. Dolling, *Inelastic Scattering of Neutrons in Solids and Liquids* (IAEA, Vienna, 1963).

[19] G. Nilsson, and G. Nelin, “ Study of the Homology between Silicon and Germanium by Thermal-Neutron Spectrometry, ”Phys. Rev. B **6**, 3777 (1972).

[20] P. Chantrenne, J. L. Barrat, X. Blase, and J. D. Gale, “ An analytical model for the thermal conductivity of silicon nanostructures, ”J. Appl. Phys. **97**, 104318 (2005).

[21] O. Jepson, and O.K. Anderson, “ The electronic structure of h.c.p. Ytterbium, ”Solid State Commun. **9**, 1763 (1971).

[22] 鎌倉良成, “ モンテカルロ法による半導体中のキャリア輸送シミュレーションに関する研究, ” 大阪大学大学院研究科電子情報エネルギー工学専攻，博士課程学位論文，(2003).

[23] H. Shichijo and K. Hess, “ Band-structure-dependent transport and impact ionization in GaAs, ”Phys. Rev. B **23**, 4197 (1981).

[24] P. Fludacher, A. J. Leadbetter, and J. A. Morrison, “ The heat capacity of pure silicon and germanium and properties of their vibrational frequency spectra, ”Philos. Mag. **4**, 273 (1959).

[25] K. Yamaguchi, and K. Itagaki, “ Measurement of High Temperature Heat Content of Silicon by Drop Calorimetry, ”J. Therm. Anal. Cal. **69**, 1059 (2002).

[26] C. Jacoboni and L. Reggiani, “ The Monte Carlo method for the solution of charge transport in semiconductors with applications to covalent materials, ”Rev. Mod. Phys. **55**, 645 (1983).

[27] J. Loy and P. Marepalli, “ Role of Normal Processes in Thermal Conductivity of Silicon, ” nanoHUB.org [Online] Available: https://nanohub.org/topics/RoleofNormalProcessesinThermalConductivityofSilicon

[28] M. G. Holland, “ Analysis of Lattice Thermal Conductivity, ”Phys. Rev. **132**, 2461 (1963).

[29] C. Kittel, and H. Kroemer, *Thermal Physics* (W H Freeman and Co., New York, 1980).

[30] A. S. Henry, and G. Chen, " Spectral Phonon Transport Properties of Silicon Based on Molecular Dynamics Simulations and Lattice Dynamics, "J. Comput. Theor. Nanosci. **5**, 141 (2008).

[31] D. M. Rowe, *Thermoelectrics Handbook: Macro to Nano* (CRC Press, New York, 2005).

[32] M.-J. Huang, T.-M. Chang, W.-Y. Chong, C. K. Liu, and C.-K. Yu, " A new lattice thermal conductivity model of a thin-film semiconductor, "Int. J. Heat Mass Trans. **50**, 67 (2007).

[33] D. Marx, and W. Eisenmenger, " Phonon Scattering at Siliconcrystal Surfaces, "Z. Phys. B Condens. Mat. **48**, 277 (1982).

[34] H. G. Lipinski, and A. Struppler, " Illumination for Computer Generated Pictures, "Stereotact and Funct Neurosurg **52**, 234 (1989).

[35] W.-J. Yang, H. Taniguchi, and K. Kudo, " Dynamics of Gas-Surface Scattering, "*Advances in Heat Transfer* **27** (Academic Press, San Diego, 1995).

[36] M. Asheghi, M. N. Touzelbeav, K. E. Goodson, Y. K. Leung, and S. S. Wong," Temperature-Dependent Thermal Conductivity of Single-Crystal Silicon Layers in SOI Substrates, "ASME J. Heat Trans. **120**, 30 (1998).

[37] Y. S. Ju, " Phonon heat transport in silicon nanostructures, "Appl. Phys. Lett. **87**, 153106 (2005).

[38] Y. S. Ju, and K. E. Goodson, " Phonon scattering in silicon films with thickness of order 100 nm, "Appl. Phys. Lett. **74**, 3005 (1999).

[39] W. Liu, and M. Asheghi, " Phonon-boundary scattering in ultrathin single-crystal silicon layers, "Appl. Phys. Lett. **84**, 3819 (2004).

[40] J. C. Duda, T. E. Beechem, J. L. Smoyer, P. M. Norris, and P. E. Hopkins, " Role of Dispersion on Phononic Thermal Boundary Conductance, "J. Appl. Phys. **108**, 073515 (2010).

[41] Z. Aksamija, and I. Knezevic, " Anisotropy and boundary scattering in the lattice thermal conductivity of silicon nanomembranes, "Phys. Rev. B **82**, 045319 (2010).

[42] D. Li, Y. Wu, P. Kim, L. Shi, P. Yang, and A. Majumdar, " Thermal conductivity of individual silicon nanowires, "Appl. Phys. Lett. **83**, 2934 (2003).

[43] Y. Wu, H. Yan, M. Huang, B. Messer, J. H. Song, and P. Yang, " Inorganic Semiconductor Nanowires: Rational Growth, Assembly, and Novel Properties, "Chem.-Eur. J. **8**, 1260 (2002).

[44] L. Shi, D. Li, C. Yu, W. Jang, D. Kim, Z. Yao, P. Kim, and A. Majumdar " Measuring Thermal and Thermoelectric Properties of One-Dimensional Nanostructures Using a Microfabricated Device, "ASME J. Heat Trans. **125**, 881 (2003).

[45] J. Zou and A. Balandin, " Phonon heat conduction in a semiconductor nanowire, "J. Appl. Phys. **89**, 2932 (2001).

[46] C. Jeong, S. Datta, and M. Lungstrom, “ Full dispersion versus Debye model evaluation of lattice thermal conductivity with a Landauer approach, ”J. Appl. Phys. **109**, 073718 (2011).

[47] D. P. Sellan, J. E. Turney, A. J. H. McGaughey, and C. H. Amon, “ Cross-plane phonon transport in thin films, ”J. Appl. Phys. **108**, 113524 (2010).

第3章　熱伝導に対する準弾道輸送効果の解析

3.1　はじめに

序論でも述べたように，集積回路の性能や信頼性を維持する観点から，デバイス内部で発生する熱をどのように排出させるかというテーマに関心が集まっている．しかし，これまでのナノスケールデバイスにおける熱伝導特性解析は主にフーリエ則に基づいて熱伝導方程式 [1] や熱回路モデル [2,3] を主体に行われてきた．フーリエ則は熱流が温度勾配に比例するモデルであるが，これが成立するのは内部の熱が拡散的に伝導する描像が成り立つ場合である．このためにはフォノンの平均自由行程と比較して十分に大きい構造が必要となる．バルク Si におけるフォノンの平均自由行程は **2.4.4** の項で述べた通り室温でおおよそ 100 nm 程度であり，これよりも大きいデバイス構造スケールではフーリエ則は有効であると考えられる．しかし，近年の MOSFET のゲート長は 20 nm 以下に差し掛かっており，こういった領域ではフーリエ則適用の前提条件である拡散的熱伝導が破たんする [4]．例えば，フォノンの平均自由行程よりも十分に短い距離を熱が伝わる際，フォノンが散乱を受ける回数が減少するため，その輸送は準弾道的となる．しかし，フーリエ則では単に温度勾配に比例した熱流が仮定されるため，例えば短い距離で急峻な温度変化が生ずるような場合には熱輸送を過大評価してしまう可能性がある．

最近ではナノ構造中でフーリエ則が破たんすることが実際に実験的に確認されている [5]．実験では図 3.1(a) に示したようにサファイア基板上に形成した幅 L を持つニッケル細線に X 線を照射することで熱源とし，さらに反射率の変化から温度応答測定を行うことでサファイア基板の等価的な熱抵抗率を抽出している．図 3.1(b) にサファイア基板の熱抵抗率 r のニッケル幅 L 依存性を測定した結果を示す [5]．熱抵抗率はある程度の大きさでは L に依存せず経験的に知られる一定の値となる．しかし，ニッケルの細線幅 L を狭くすると，見かけ上の熱抵抗率は増大していくことがわかる．これは，フォノンの持つ弾道輸送性が熱輸送を抑制しているためである．すなわち図 3.2 に示すように，幅 L がフォノンの平均自由行程 λ に比べて大きい場合は拡散的にフォノンが伝導するという描像が成り立つ一方 (図 3.2(a))，幅 L が狭くなると後方散乱の寄与が少なくなるため (図 3.2(b))，熱源から発せられたフォノン輻射が全体の熱流のボトルネックとなる．さらにこの輻射フォノンが熱流を律速する現象は図 3.2(c) のような熱源とヒートシンクの距離が近い場合も起こることが予測される．この実験はフォノン平均自由行程が Si と比較して十分に大きいサファイア基板で行ったものであるため，このようにサブミクロン領域で準弾道性の発現を確認することができたと考えられる．一方で，Si の平均自由行程はおおよそ 100 nm 程度と小さいためこのような準弾道輸送効果の実験的観測は難しいが，近年のデバイスサイズを考慮すると弾道輸送の影響が大きくなるだろうと予測できる．

最近では，熱伝搬を解析するツールとして non-equilibrium Green ’s function (NEGF) 法が有用視されている [6,7]．しかし，NEGF による準弾道輸送解析は非常にシミュレーション負荷が重いため，現実的デバイススケールへの拡張は計算速度の観点から困難である．

本研究では，2 章で作成したフォノン MC シミュレータを応用し，実際に温度勾配下における熱伝導解析を行うことで，このようなフォノン準弾道性がデバイス長さに対してどのように現れるの

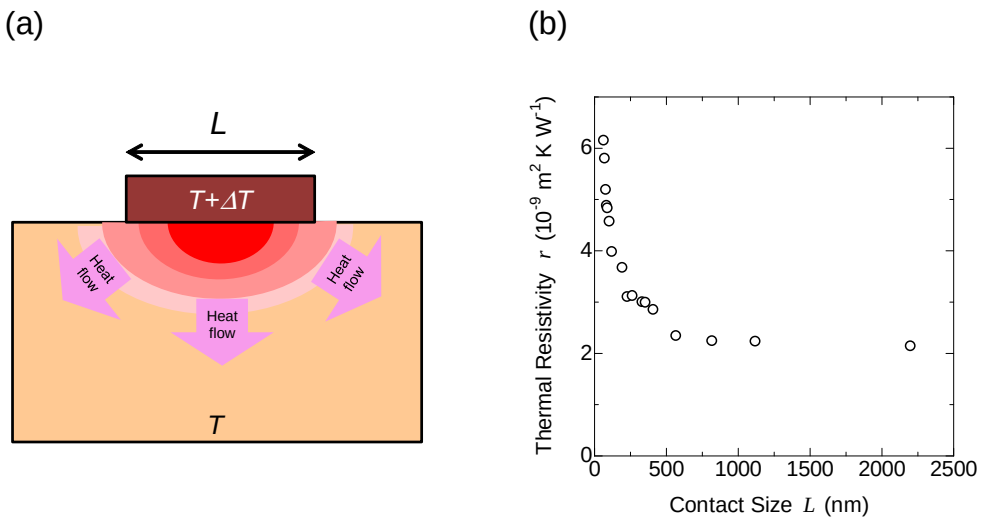

図 3.1: (a) 熱抵抗を測定する手法の概念図 [5]．サファイア基板上に幅 L を持つニッケル細線を形成して熱源とし，その温度応答を測定することでサファイア基板の見かけ上の熱抵抗率を算出する．(b) フォノンの準弾道輸送効果による見かけ上の熱抵抗率上昇を実験的に測定した例 [5].

かを解析した．また分散関係として 2 章で述べた現実的モデル [8] と近似モデル [9] を MC シミュレータに導入し，特に弾道輸送領域において分散の影響がどのように顕在化するのかを調べた [10].

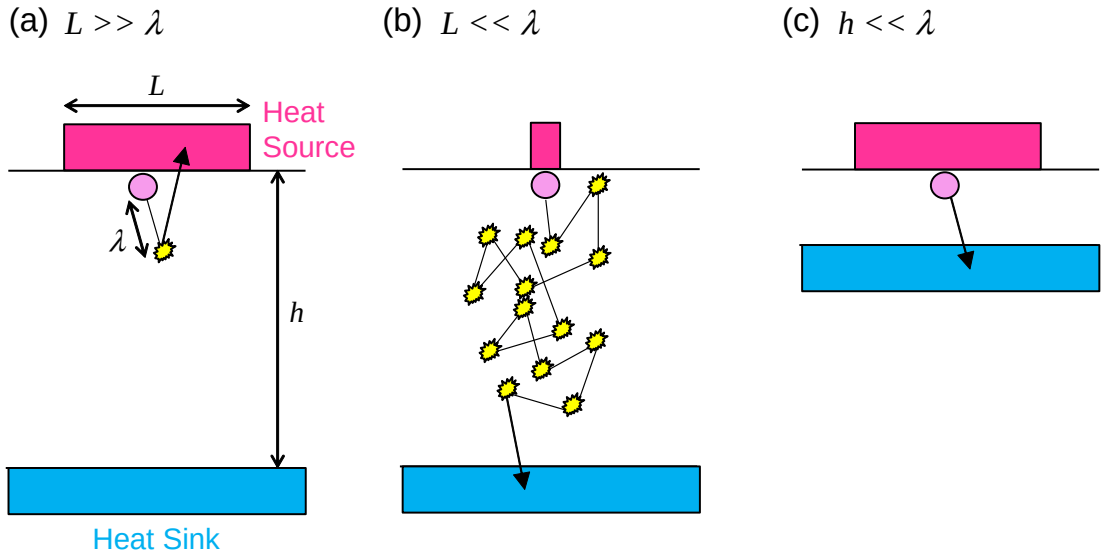

図 3.2: 図 3.1 における熱源幅の縮小化に伴うフォノンの弾道輸送顕在化の概念図．熱源から十分な距離 h だけ離れた位置にヒートシンクを配置した．(a) 熱源幅 L がフォノンの平均自由行程 λ より大きい場合，フォノンは後方散乱により熱源へと戻る過程が存在する．(b)L が λ よりも小さくなると後方散乱が少なくなるため，熱源から発せられる輻射フォノンが全体の熱輸送を律速する過程となる．(c) 熱源とヒートシンクの距離が近い場合も (b) と同様に輻射フォノンが律速すると考えられる．

3.2 MC 法による熱伝導解析方法

3.2.1 温度分布の算出方法

2 章で作成したフォノン MC シミュレータを多粒子系へと拡張し，温度分布解析を行うためには，シミュレーション構造中において MC 粒子より与えられる情報を温度に変換するプロセスが必要となる．すなわち，ある時間における局所的なフォノンの個数を数え上げることで熱エネルギー密度を算出し，その地点における温度に換算する．

座標 (x, y, z) における単位体積あたりの MC 粒子個数密度を $N(x, y, z)$ と定義するとその箇所におけるエネルギー密度 $u(x, y, z)$ は

$$u(x, y, z) = N(x, y, z) \times E^* \tag{3.1}$$

で与えられる．また系を格子分割したときの 1 メッシュ分の体積を V_{mesh} とすると

$$N(x, y, z) = \frac{N_i}{V_{\mathrm{mesh}}} \tag{3.2}$$

となる．ここで N_{i} は i 番目のメッシュに存在する MC 粒子数である．

図 3.3 に単位体積あたりのフォノンの内部エネルギーの温度依存性 $U(T)$ を示す．内部エネルギー密度は，図 2.8 に示した比熱 $C_V(T)$ を用いて

$$U(T) = \int_0^T C_V(T) dT \tag{3.3}$$

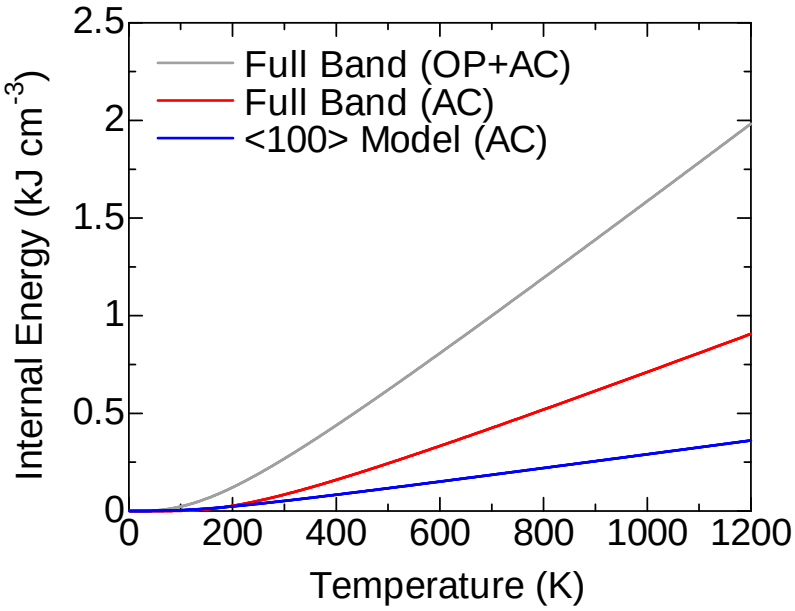

図 3.3: 図 2.8 に示した比熱 C_V をもとに求めたバルク Si における単位体積当たりの内部エネルギー．ボンドチャージモデルに基づく分散関係から求めた結果 [8] と ⟨100⟩ 近似モデルによる結果 [9] を比較した．OP+AC は光学分枝と音響分枝，AC は音響分枝を周波数積分したものを示す．

より求めた

図 3.3 の関係性より局所的なエネルギー密度は以下の逆関数を用いて温度 $T(x,y,z)$ に変換することができる．

$$T(x,y,z) = U^{-1}(u(x,y,z)) \tag{3.4}$$

本研究で開発した MC シミュレータでは，上式を用いてシミュレーション系内における温度分布の算出を行っている．温度算出におけるモニタリング精度は 1 K である．

3.2.2 熱浴槽の設定方法

熱源を内部に含む系のシミュレーションにおいては，生成する熱の排出経路を設定する必要がある．発熱領域で生成されるエネルギーを逃がす経路がもしなければ，内部の温度は無限に上昇し続けるため，通常シミュレーション系には温度一定の熱浴槽を境界条件として設ける必要がある．槽内部におけるフォノンの総エネルギーを強制的に保持することで，熱浴槽における温度を一定に保つ．本研究では，各 MC 粒子が保有するエネルギーの値は一定値であるため，このことは MC 粒子数を一定に保つことと同義である．

熱浴槽の体積を V_{HB}，設定温度を T_{HB} とする．ある時刻において熱浴槽でカウントされたエネルギー E_{HB} は，

$$E_{\mathrm{HB}} = \int_{\mathrm{HB}} u(x,y,z)dV = N_{\mathrm{HB}}E^{*} \tag{3.5}$$

で与えられる．ここで N_{HB} はある時刻にて熱浴内でカウントされた MC 粒子数を表している．もし E_{HB} が設定温度から決まるエネルギーを超えた時，余剰エネルギー分の MC 粒子を N_{delete} 個だけ消去することで熱浴槽の温度を一定に保つことができる．

$$N_{\mathrm{delete}} = \frac{E_{\mathrm{HB}} - U(T_{\mathrm{HB}})V_{\mathrm{HB}}}{E^{*}} \tag{3.6}$$

同様に，熱浴槽のエネルギーが設定を下回った時 N_{create} 個の MC 粒子を付加する．

$$N_{\mathrm{create}} = \frac{U(T_{\mathrm{HB}})V_{\mathrm{HB}} - E_{\mathrm{HB}}}{E^{*}} \tag{3.7}$$

この式で生成された MC 粒子には，式 (2.13) で与えられるエネルギー分布関数を満たすように，周波数 ω，重み関数 $W(\omega)$，フォノン速度 $\bar{v}_p(\omega)$，および運動方向 $\mathbf{u}$ を与える．この時，MC 粒子が生成される位置 (x,y,z) は熱浴領域を $(x_{\mathrm{HB}} < x < x_{\mathrm{HB}} + X_{\mathrm{HB}}, y_{\mathrm{HB}} < y < y_{\mathrm{HB}} + Y_{\mathrm{HB}}, z_{\mathrm{HB}} < z < z_{\mathrm{HB}} + Z_{\mathrm{HB}})$ と仮定すると，

$$(x,y,z) = (x_{\mathrm{HB}} + X_{\mathrm{HB}}R, y_{\mathrm{HB}} + Y_{\mathrm{HB}}R, z_{\mathrm{HB}} + z_{\mathrm{HB}}R) \tag{3.8}$$

で与えられる．この時，R は $[0,1]$ の一様乱数である．

図 3.4 で与えられる構造を想定し，本手法による熱浴形成方法が妥当であるか確認した．シミュレーション系として $L_x \times L_y \times L_z = 1000\ \mathrm{nm} \times 500\ \mathrm{nm} \times 500\ \mathrm{nm}$ の直方体を想定し，その内部に 300 K，及び 400 K の熱浴槽を設定した．使用した MC 粒子数は 10,000 個，時間ステップ Δt は 1 ps，メッシュ間隔 $\Delta x = 20$ nm である．MC 粒子が境界に衝突した際の散乱は鏡面散乱とし，位置 $(L_x/4, L_y/2, L_z/2)$ における温度の時間変化をモニターした結果を図 3.5 に示す．式 (3.6)，式 (3.7) に従う MC 粒子の消去と生成を行うことで，300 K 熱浴内部における温度が一定に保持されている様子が確認できる．

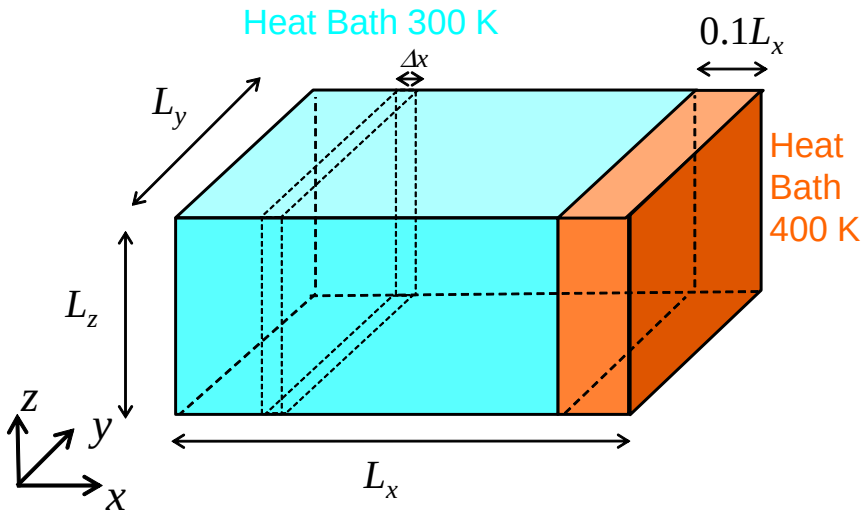

図 3.4: 熱浴シミュレーション構造．境界散乱は鏡面的であると仮定した．

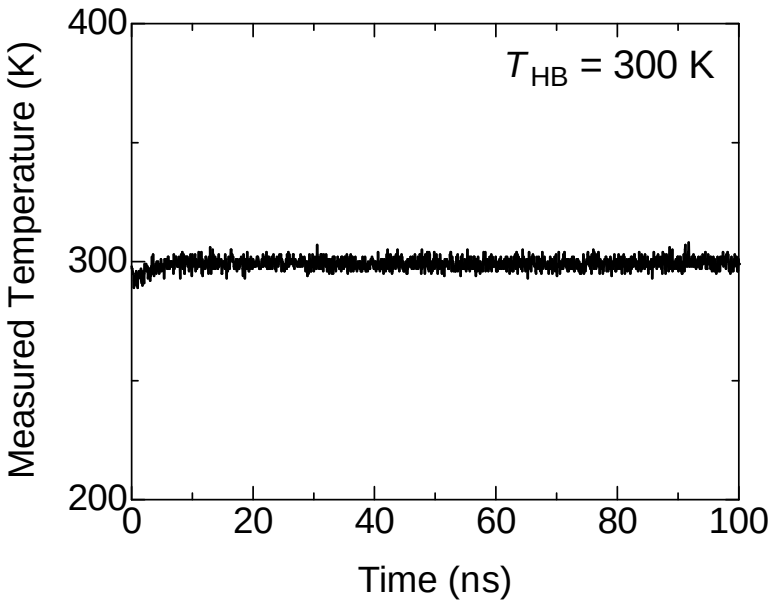

図 3.5: MC シミュレーションでモニターした 300 K 熱浴中の温度の時間変化．

3.2.3 熱源の作成方法

デバイス内部で生成するジュール発熱分布をシミュレーション上で模擬する方法について説明する．単位時間あたりの発熱密度分布を $Q(x,y,z)$ と定義すると，エネルギー生成開始から計算時間ステップ Δt 経過後の座標 (x,y,z) における温度上昇値は

$$\Delta T(x,y,z) = \frac{Q(x,y,z)\Delta t}{C_V(T(x,y,z))} \tag{3.9}$$

で与えられる．実際には $C_V(T(x,y,z))$ が温度の関数であるため，この式が成立するのは初期状態における熱源領域の温度分布 $T(x,y,z)$ が，$\Delta T(x,y,z)$ に比べて十分大きい時に限られる．しかし，Δt を十分小さく設定することで，$C_V(T(x,y,z))$ の温度依存性が無視できるようになり，微小時間間隔では式 (3.9) の近似が有効に働く．

MC シミュレーションでは，発熱によるエネルギー生成は，領域内に MC 粒子を新たに付加することで模擬する．この時，時間ステップ Δt ごとに発熱領域内の位置 (x,y,z) に対して新たに生成する MC 粒子数密度 $N_Q(x,y,z)$ は

$$N_Q(x,y,z) = \frac{Q(x,y,z)\Delta t}{E^*} \tag{3.10}$$

で与えられる．この時，MC 粒子のエネルギー E^* は離散的値であるため，時間ステップ Δt において設定発熱量 $Q(x,y,z)\Delta t$ を高精度に実現するにあたって E^* を $Q(x,y,z)\Delta t$ に比べて十分に小さくとる必要がある．そのため本研究では発熱分布 $Q(x,y,z)$ の最小値 $Q_{\min}(x_{\min},y_{\min},z_{\min})$ を用いて，$Q_{\min}(x_{\min},y_{\min},z_{\min})\Delta t/E^*$ の値が 100 となるよう設定した．

熱浴の際と同様，式 (3.10) で生成された MC 粒子には，新たにフォノンの周波数 ω，重み関数 $W(\omega)$，フォノン速度 $\bar{v}_p(\omega)$，および運動方向 $\mathbf{u}$ を新たに与え，前節と同様の以下式

$$(x,y,z) = (x_{\Delta_Q} + x_{\mathrm{mesh}}R, y_{\Delta_Q} + y_{\mathrm{mesh}}R, z_{\Delta_Q} + z_{\mathrm{mesh}}R) \tag{3.11}$$

に従い粒子の座標配置を行った．ここで $(x_{\Delta_Q}, y_{\Delta_Q}, z_{\Delta_Q})$ は熱源領域におけるメッシュの始点位置，$x_{\mathrm{mesh}} \times y_{\mathrm{mesh}} \times z_{\mathrm{mesh}}$ はメッシュのサイズ，R は $[0,1]$ の一様乱数を表している．

ここで注意すべきは熱源内部で生成された MC 粒子が従うエネルギー分布関数である．エネルギー分布は温度に依存するため例えば熱浴槽内であれば設定温度に従う分布を与えればよかったが，今回生成したフォノンに対して与えるべき分布は時間とともに変動する．そこで本研究では構造内の温度をエネルギー分布に反映させるため，新たに生成された MC 粒子に与えられるエネルギーは，時間 $t_{\mathrm{sim}} - \Delta t$ 時に得られた温度情報 $T_{t_{\mathrm{sim}}-\Delta t}(x,y,z)$ から得られる分布に従うものとした．したがって熱源部分に生成される MC 粒子は以下のエネルギー分布関数

$$P(\omega,p) \propto \frac{\mathcal{D}_p(\omega)n(\omega,T_{t_{\mathrm{sim}}-\Delta t})}{W(\omega)} \tag{3.12}$$

に従って配分される．

簡単のため，領域内における発熱分布 $Q(x,y,z)$ を一様と仮定して系全体に与え，構造内部の温度変化を MC シミュレーションで求めた．MC 粒子数として 10^6 個を使用し，初期温度を 300 K，発熱量を $Q = 2.8\times10^{-5}$ W，シミュレーション構造として図 3.6 のような $(L_x, L_y, L_z) = (100\ \mathrm{nm}, 100\ \mathrm{nm}, 100\ \mathrm{nm})$ の構造を想定した．図 3.7 に時刻 0 ps と，時刻 1 ns における温度分布を計算した結果を示す．系内全域における温度上昇が式 (3.9) に従っていることが確認できる．

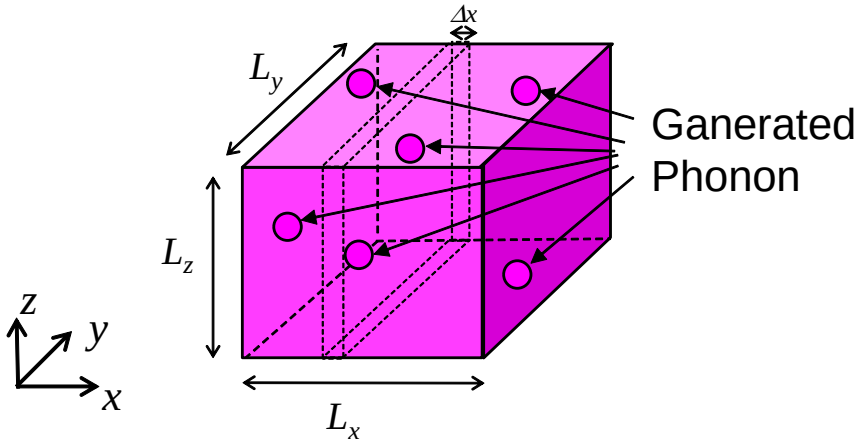

図 3.6: 熱源シミュレーション構造．単位時間ステップ Δt あたりに熱源値 $Q \times \Delta t$ に相当するエネルギー量の MC 粒子を領域内部にランダムに配置する．境界散乱は鏡面的であると仮定した．

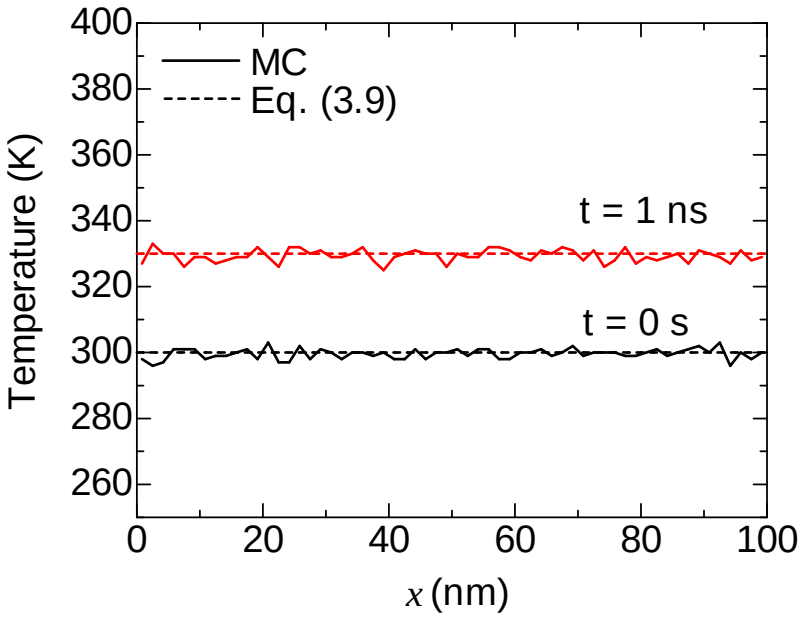

図 3.7: $Q = 2.8{\times}10^{-5}$ W を領域 100nm × 100nm × 100nm に対して一様に与えた際の温度分布の時間変化．式 (3.9) から予測される値を破線で示す．

3.3 温度勾配下の熱伝導特性解析

3.3.1 拡散極限と弾道極限における解析解

構造系が十分に大きい時，熱は拡散的に伝導しフーリエ則による描像が成立する，拡散極限においては以下の熱伝導方程式を用いて系内の温度分布を解析することができる．

$$C_V \frac{\partial T}{\partial t} = \kappa \nabla^2 T + Q \tag{3.13}$$

ここで Q は熱源における単位体積あたりに発生する熱の量を示す．上述の熱伝導方程式の導出方法については，付録 A に詳細を示す．今，図 3.8(a) のような両端をそれぞれ高温 T_{high}，低温 T_{low} に固定した構造を仮定し，内部の温度分布を解析的に算出する．伝導方向が一次元の場合式 (3.13) は，

$$C_V \frac{\partial T}{\partial t} = \kappa \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + Q \tag{3.14}$$

と表せる．今回，熱源は構造内に存在しないため，$Q = 0$ とおける．温度勾配が時間的に変化しない ($\partial T/\partial t = 0$)，いわゆる定常状態においては上式は

$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} = 0 \tag{3.15}$$

となる．これを境界条件 $T(0) = T_{\mathrm{low}}$，$T(0) = T_{\mathrm{high}}$ の元で解くと，温度分布

$$T(x) = (T_{\mathrm{low}} - T_{\mathrm{high}})\frac{x}{L} \tag{3.16}$$

が得られる．したがって，拡散極限における温度分布は，図 3.8(b) に示したようになる．このような温度分布が現れるのは構造内部において十分にフォノン散乱が行われ，全体に渡って熱平衡分布が形成されていることを意味している．

一方，構造が十分小さくなると，フォノンの散乱回数が減少するため熱は弾道的に伝導する．この時，光子伝搬における黒体輻射と似た現象が現れると考えられ，構造内部の温度 $T_{\mathrm{Ballistic}}$ は L 縮小に伴い，ある一定の値へと収束していく．結果，温度分布は図 3.8(c) に示したようになる．これは $T_{\mathrm{Ballistic}}$ を決定する要因が両端熱浴槽からの輻射量で決まるためである．この時，高温 T_{high} 面から発せられる熱流 Q_{high} はステファンボルツマン定数 σ を用いて $Q_{\mathrm{high}} = \sigma T_{\mathrm{high}}^4$ となり，同

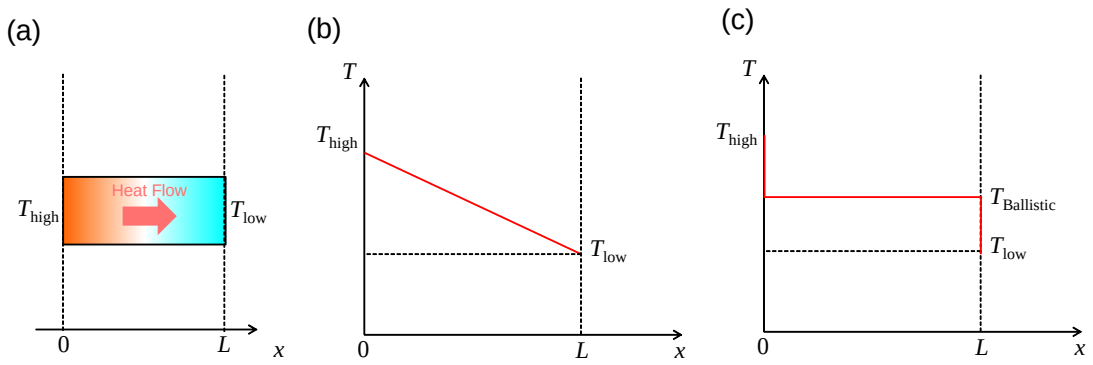

図 3.8: (a) 解析構造模式図．両端をそれぞれ高温 T_{high}，低温 T_{low} に固定し，内部の温度分布を解析的に求めた．(b) 拡散極限における温度分布，(c) 弾道極限における温度分布．

様に低温 T_{low} 面から発せられる熱流 Q_{low} は $Q_{\mathrm{low}} = \sigma T_{\mathrm{low}}^4$ となる．構造内部の温度を $T_{\mathrm{Ballistic}}$ とすると，高温面，低温面に向けたそれぞれの熱流 $Q_{\mathrm{Ballistic}}$ の大きさは $Q_{\mathrm{Ballistic}} = \sigma T_{\mathrm{Ballistic}}^4$ で求められるので，定常状態における熱流の釣り合いの式 $Q_{\mathrm{high}} - Q_{\mathrm{Ballistic}} = Q_{\mathrm{Ballistic}} - Q_{\mathrm{low}}$ より $T_{\mathrm{Ballistic}}$ が得られ，

$$T_{\mathrm{Ballistic}} = \left(\frac{T_{\mathrm{high}}^4 + T_{\mathrm{low}}^4}{2} \right)^{1/4} \tag{3.17}$$

となる．

次に系内の端面に熱源が存在する場合の温度分布を求める．図 3.9(a) のように左端から熱源 Q を流入し，右端を固定温度 T_{low} に固定する場合を考える．端面に無限小の熱源が存在する場合，構造が十分に大きい時は式 (3.14) を境界条件

$$\left. \frac{\partial T}{\partial x} \right|_{x=0} = -\frac{Q'}{\kappa}, \; T(L) = T_{\mathrm{low}} \tag{3.18}$$

の元で解くことで拡散極限の温度分布として，

$$T(x) = \frac{Q'}{\kappa}(L - x) + T_{\mathrm{low}} \tag{3.19}$$

が得られ，図 3.9(b) に示した温度分布となる．Q' は伝導方向に対する単位断面積あたりの量として規格化した熱源の値である．この時，定常状態における熱源領域の温度 T_{Q} は図 3.9(b) に示す通り材料の長さ，および熱伝導率に依存する．一方，構造が小さい時は先ほどの固定温度槽間の際と同様，熱源と固定温度槽からの輻射で決定される一定の温度へと収束し，内部の温度分布は図 3.9(c) に示す通りになる．先述の両端を固定温度とした場合の計算と同様に定常状態における熱流の釣り合いの式から $T_{\mathrm{Ballistic}}$ が得られ，

$$T_{\mathrm{Ballistic}} = \left(\frac{T_{\mathrm{Q}}^4 + T_{\mathrm{low}}^4}{2} \right)^{1/4} \tag{3.20}$$

となる．この時，T_{Q} は長さ L には依存せず，物質によって決まる値となる．その詳細については **3.3.3** にて述べる．

本節では，上述の解析解と MC 法による計算結果を比較していく．

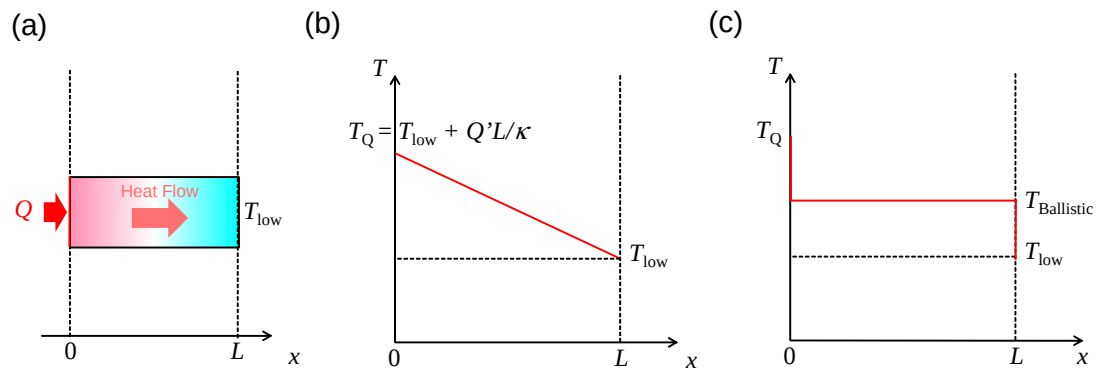

図 3.9: (a) 解析構造模式図．左端面に熱源 Q を流入し，右端面を低温 T_{low} に固定し，内部の温度分布を解析的に求めた．(b) 拡散極限における温度分布，(c) 弾道極限における温度分布．

3.3.2 シミュレーションの妥当性の確認

本研究で提案したシミュレータ方法の妥当性を検証するため，熱の弾道輸送領域における特性を理論式の予測結果と比較した．図 3.10 にシミュレーション構造を模式的に示す．直方体構造を仮定し，両端にそれぞれ，330 K の高温熱浴槽，300 K 熱浴槽を設けた．構造の長さを L とし，熱浴領域の長さを $0.1L$ とした．境界における散乱は鏡面散乱を仮定し，L を間隔 Δx のメッシュ区間に分け，それぞれの部位で温度をモニタリングした [11,12]．この時，MC シミュレーションの流れについては付録 B に詳細を記した．

区間 i における単位断面積当たりの MC 粒子数が N_i^* である場合，内部エネルギー密度 U_i^* は，

$$U_i^* = N_i^* E^* \tag{3.21}$$

で与えられる．上式で算出されたエネルギー総量を式 (3.4) を用いて区間 i における温度 T_i へと変換した．初期状態における温度は，330 K の熱浴槽を除いた領域で全て 300 K と仮定した．シミュレーション進行と共に，各 MC 粒子の座標が変動するため，局所的な内部エネルギー密度 U_i^* は時間的に変動する．シミュレーション経過後の区間 i における MC 粒子数を $N_{i,\mathrm{new}}^*$ とすると，温度は次式のように求められる．

$$T_{i,\mathrm{new}} = U^{-1}(N_{i,\mathrm{new}}^* E^*) \tag{3.22}$$

上式による温度の更新はフォノン-フォノン散乱確率を変化させるため，輸送特性へ影響を与える．そしてこれにより新たな温度分布が形成される．このプロセスを長時間繰り返すことでフォノン輸送特性と温度分布の間で矛盾ない解を得ることが出来る．シミュレーションを開始すると内部の温度分布は時間と共に変動するが，十分な計算時間を与えることで構造内部の温度分布は定常状態へと収束する．図 3.11，並びに図 3.12 に定常状態における構造内部の温度分布を示す．それぞれ 2 章で述べた現実的分散関係と近似分散モデルを用いて計算を行った．熱浴槽領域を除いた部分の温度分布を切り出している．L は 1 nm ～ 1 μm の間で変化させた．L が十分に大きい時は，フーリ

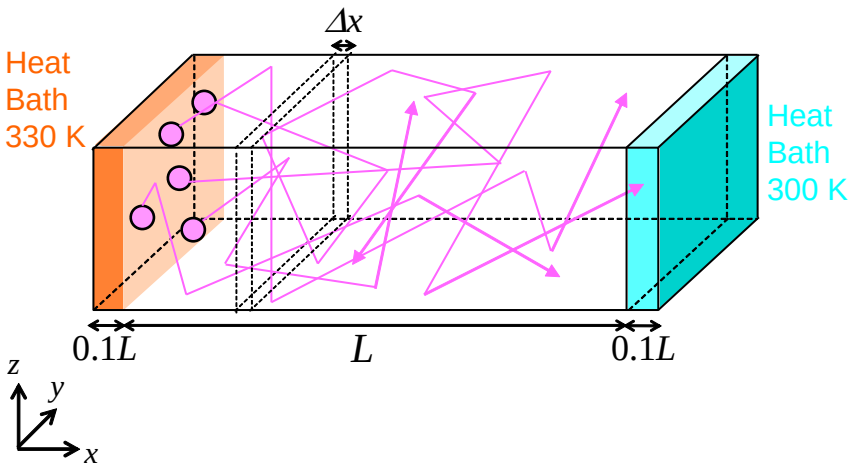

図 3.10: シミュレーション構造．両端にそれぞれ 300 K，330 K の熱浴槽を設け，L の値を 1 nm ～ 1 μm の間で変化させた．

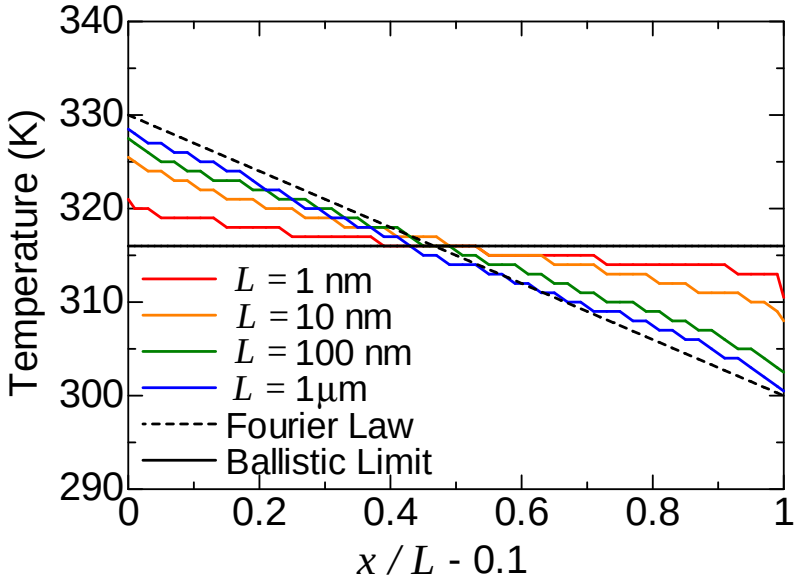

図 3.11: 図 3.10 における熱浴槽を除いた部位における定常温度分布のシミュレーション結果．現実的分散モデル [8] を適用した計算結果を示す．実線は弾道輸送極限，破線はフーリエ則に従う拡散輸送領域における温度分布を示している．

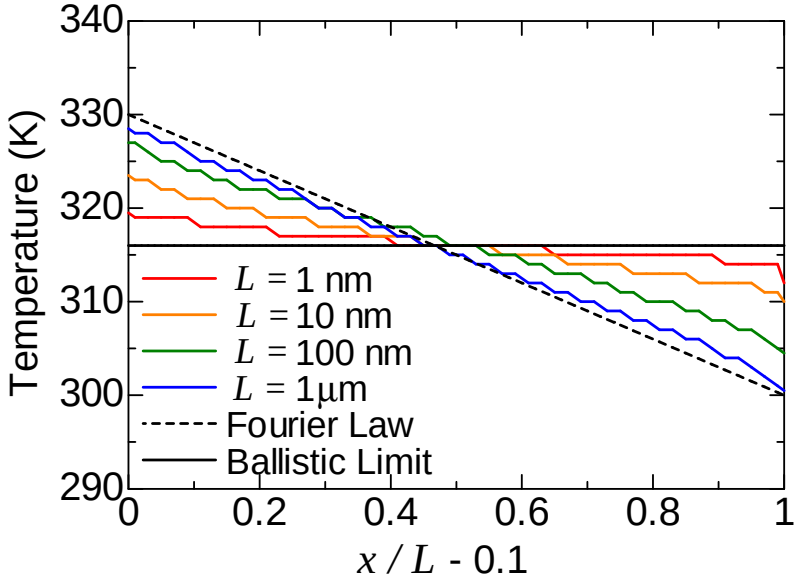

図 3.12: 図 3.10 における熱浴槽を除いた部位における定常温度分布のシミュレーション結果．近似分散モデル [9] を適用した計算結果を示す．実線は弾道輸送極限，破線はフーリエ則に従う拡散輸送領域における温度分布を示している．

エ則から得られる式 (3.16) に従う温度分布が MC シミュレーションから得られた．一方で両者の結果より，デバイスの縮小化に伴い温度分布の傾きが低下し，式 (3.17) で示す弾道極限へと近づいていく様子がわかる．

図 3.11，並びに図 3.12 の結果を比較すると，構造長さ L がフォノンの平均自由行程と比較し，十分に大きい時は両者の結果はよく一致していることがわかる．しかし一方で，L が小さい場合を注視すると，近似分散モデルから得られる構造内部の温度勾配は現実的分散モデルと比較して緩やかであることがわかる．これは 2 章で述べたように分散を近似化することにより，フォノンの平均自由行程を大きく見積もってしまう，つまりフォノン-フォノン散乱やフォノン-欠陥確率を過小評価してしまうためである．したがって近似分散モデルを適用すると散乱回数の減少により弾道輸送効果の影響が過大に現れると考えられる．

3.3.3 バルク Si における熱抵抗のサイズ依存性

次に，シリコンにおける熱伝導機構のサイズ依存性を調べた．そのために想定したシミュレーション構造を図 3.13(a) に示す．左端に熱源領域，右端に 300 K の熱浴槽を設け，MC 粒子は全ての境界で鏡面的に反射されると仮定した．構造長さを L とし，前節と同様に熱源領域，熱浴槽の長さをそれぞれ $0.1L$ とした．この時，L は 5 nm から 10 μm の間で変化させた．初期状態における温度はシミュレーション系全体で 300 K とした．熱源の設定方法は，**3.2.3** で説明した通りである．本計算では熱源は分布を持たず，領域内部において全て一様であると仮定した．

図 3.13(b) にシミュレーションにおける等価熱回路モデルを示す．シミュレーションでは，内部の温度分布を求めることで構造の熱抵抗値を算出した．熱源領域にて単位時間あたりに与えられる単位断面積当たりの発熱量を Q とした時，構造の実効的熱抵抗 R_{th} を

$$R_{\mathrm{th}} = \frac{\Delta T}{Q} \tag{3.23}$$

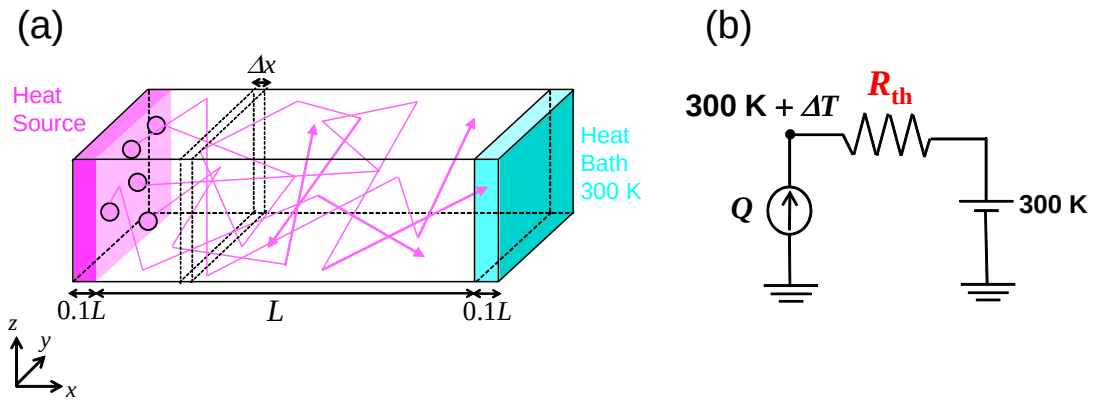

図 3.13: (a) 熱伝導機構のサイズ依存性を調べるため，温度解析を行ったシミュレーション構造．シミュレーション構造の図中 x 軸方向の長さをデバイス長 L と定義し，本研究では $L = 5$ nm ～10 μm として温度解析を行った．(b) シミュレーションにおける等価熱回路モデル．熱源領域における温度上昇値 ΔT より構造の熱抵抗値を算出する．

と定義した．この時，ΔT は熱源領域における温度上昇値を示しており，MC シミュレーションから得られる値である．

図 3.14 は 構造の大きさとして L=10 μm を仮定した際の構造内部の定常状態における温度分布を計算した結果を示している．フォノン分散として現実的分散関係を適用した．温度モニタリングは **3.2.1** で述べた手法を用いた．本解析では，式 (3.23) の近似が成り立つ 300 K における熱抵抗を得るために，熱源による温度上昇値 ΔT が 5–15 K になるよう Q を設定した．初期状態において 10,000 個の MC 粒子を用い，熱源におけるエネルギー注入と共に MC 粒子数を随時追加した．なお，定常状態以降における温度分布を各時間ステップ毎に積算して平均化することで少数の MC 粒子でも収束を早く得ることが可能である．図 3.14 の熱浴を除く領域に着目すると，構造内部で一定の勾配を有する温度分布を確認することができる．図 3.15 に本計算において熱源で生成した MC 粒子が熱浴に伝達するまでの軌跡の一例を示す．内部を伝わるフォノンが十分散乱されて伝導している様子が確認できる．したがって熱拡散係数 $D_{3\mathrm{D}}$ に従った拡散的熱伝導の描像が成立することでフーリエ則による近似が有効となり，図で示すように式 (3.19) で表される温度分布へと近づいていく．図 3.11，図 3.12 の結果と同様，フーリエ則が予測する線形な温度勾配を示し，シミュレーションの妥当性が確認できる．

一方で，チャネルの長さ L を短くすると図 3.16 に示すように非線形な勾配を有する定常温度分布が得られた．構造内部において平坦な温度勾配が観測される一方で，熱浴近傍で急峻な温度変化が確認される．これは，**3.3.1** の項で述べたように，熱源から発せられる輻射フォノンの影響によるものであると考えられる．図 3.17 に L= 500 nm，並びに L = 5 nm を想定した時の熱源で生成した MC 粒子の熱浴までの軌跡の一例をそれぞれ示す．

L = 500 nm の場合 (図 3.17(a) 参照) に着目するとチャネル長の短縮化に伴い，拡散極限と比較してフォノンの散乱回数が大きく減少している様子が見て取れる．今回のシミュレーションではフォノン-境界散乱を導入していないため，観測される散乱はフォノン-フォノン散乱，フォノン-欠

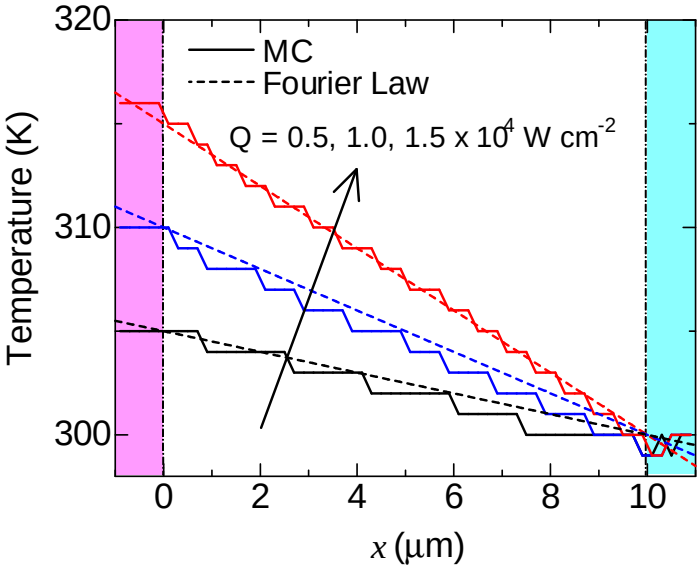

図 3.14: シミュレーション構造 (図 3.13(a)) における定常状態での温度分布解析結果．実線は MC 法，破線は式 (3.16) から得られた温度分布を示している．L = 10 μm．それぞれ与えた熱源 Q の値を図中に示す．フォノン分散関係として現実的モデルを適用した [8]．

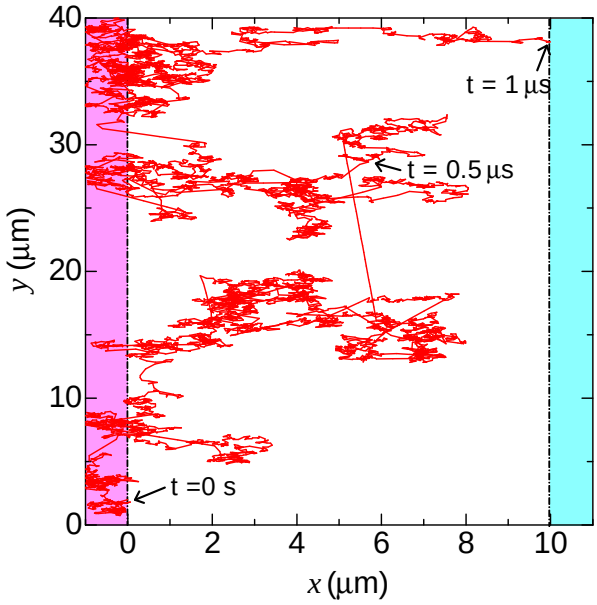

図 3.15: シミュレーション構造 (図 3.13(a)) における熱源で生成した MC 粒子が熱浴に伝達するまでの軌跡の一例．デバイス長 $L = 10$ μm の場合を示す．

陥散乱である．図 3.17(b) のようにチャネル長がフォノンの平均自由行程 λ と比較して十分に短くなると，チャネル内部を伝導するフォノンが弾道的に伝導している様子を確認することができる．すなわち，定常状態におけるチャネル内部の温度分布は，熱源から発せられるフォノンと熱浴 (設定

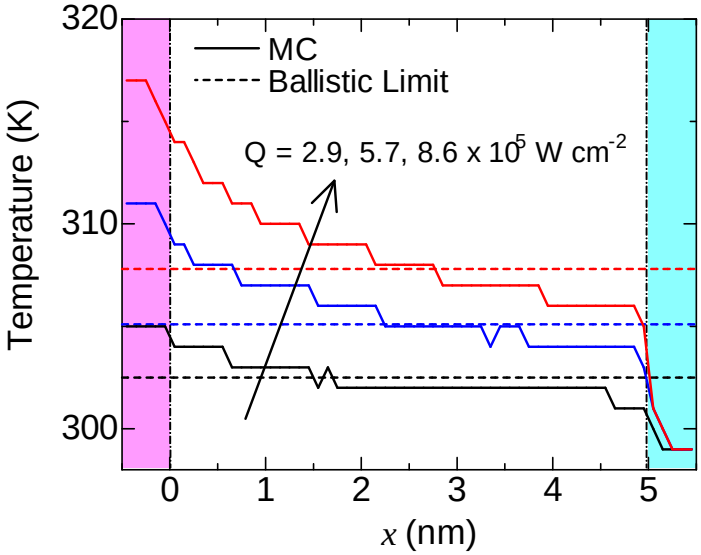

図 3.16: シミュレーション構造 (図 3.13(a)) における定常状態での温度分布解析結果．実線は MC 法，破線は式 (3.20) から得られた温度分布を示している．$L = 5$ nm．それぞれ与えた熱源 Q の値を図中に示す．フォノン分散関係として現実的モデルを適用した [8]．

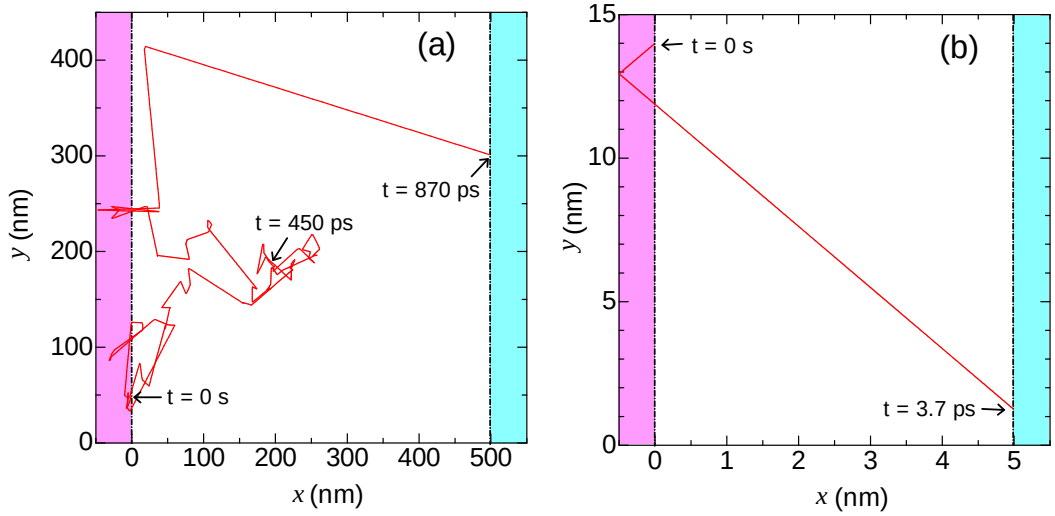

図 3.17: シミュレーション構造 (図 3.13(a)) における熱源で生成した MC 粒子が熱浴に伝達するまでの軌跡の一例．デバイス長 L は (a)500 nm，及び (b)5 nm の場合を示す．

温度 T_{HB}) からの輻射フォノンにより決定され，図で示すように式 (3.20) で与えられる一定の温度値 $T_{\mathrm{Ballistic}}$ へと収束していく．

ただし，図 3.16 に注目すると，構造内部の熱浴近傍における平坦な温度勾配と比較して，熱源領域近傍において急峻な温度勾配が見られる．これは熱源領域は熱浴近傍と比較すると高温域となることで，フォノン-フォノン散乱確率が上昇するためである．つまり熱源領域ではフォノン平均自由行程が短くなるため相対的に拡散的特性が顕在化すると考えられる．

図 3.18 は MC シミュレーションより算出した R_{th} のデバイス長さ L 依存性をプロットした結果を示している．この時，図 3.13 に示す熱源領域の右端座標 $x = 0.1L$ での定常状態における最高温度上昇値 T_{max} をシミュレーション結果から得ることで，熱源と熱浴間の構造における等価的な熱抵抗の値 R_{th} を式 T_{max}/Q より算出した．

MC シミュレーションの結果は図 2.2 に示した現実的分散モデル，並びに ⟨100⟩ 近似モデルを適用したものである．デバイス長 L が十分に長い時には，分散モデル依存性がなくなり，熱抵抗値はフーリエ則で近似可能であるために，以下式で表されるデバイス長 L に比例する値へと収束する [13]．

$$R_{\mathrm{th}}^{\mathrm{F}} = \frac{L}{\kappa} \tag{3.24}$$

分散モデルが異なるにも関わらず長デバイス構造にて上式での近似が有効となる理由は，2 章にて両分散モデルによる熱拡散特性 κ の較正を行ったためである．

フーリエ則が有効となるのは構造の長さがフォノンの平均自由行程と比較して十分に大きい時である．フーリエ則では内部を伝わる熱流束 q^F は

$$q^{\mathrm{F}} = -\kappa \frac{dT}{dx} \tag{3.25}$$

のように温度勾配に比例する．また，上式は構造を縮小化すると熱流の値が無限大に発散することを意味している．しかしながら，現実にはそのような現象は起こらず弾道輸送領域における熱流は

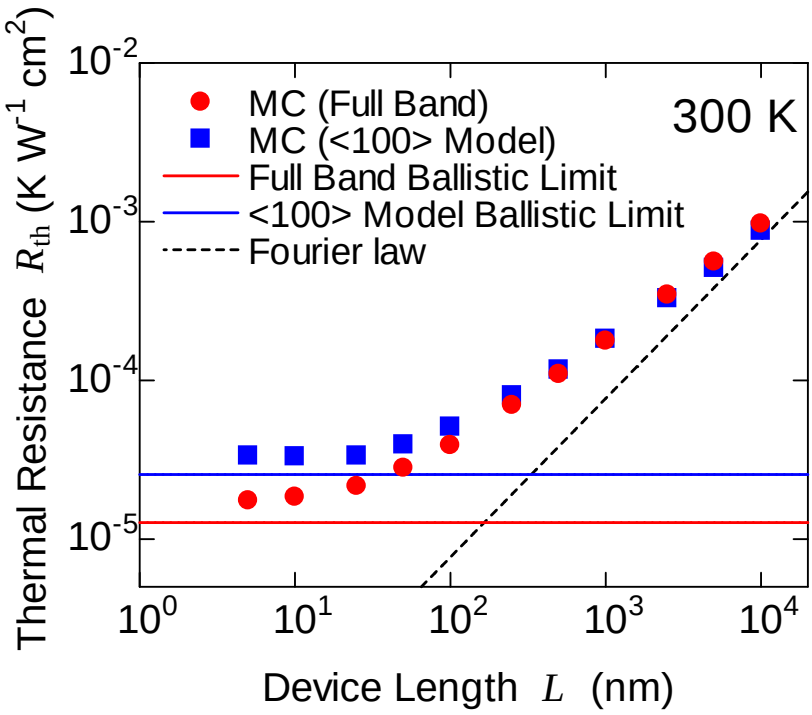

図 3.18: MC シミュレーションによる熱抵抗 $R_{\rm th}$ の解析結果．それぞれ現実的分散モデル [8]，近似分散モデル [9] を使用した計算結果である．フーリエ則に従う特性を破線，並びに弾道輸送リミットを実線にて示す．

フォノン速度で制限される値へと収束するはずである．その弾道輸送領域における熱輸送特性はフォノン分散モデルに依存する．

図 3.18 で示されるように，デバイス長 L の縮小化に伴い，熱抵抗の分散モデル依存性が顕在化する．これはフォノン輸送が拡散的輸送から弾道輸送特性へ遷移したことを示している．特に弾道輸送リミットにおいては，内部を伝わる熱流はフォノンのエネルギー密度や群速度で制限される値へと収束し，L に依存しない．図 3.18 に以下式で示す弾道輸送理論から導かれる熱抵抗値 $R_{\rm th}^{\rm B}$ の値を示す [5]:

$$R_{\rm th}^{\rm B} = \frac{4}{C_V \langle v \rangle} \tag{3.26}$$

ここで，$\langle v \rangle$ は式 (2.36) で表される比熱の重みにより算出したフォノン平均群速度である．

式 (3.26) から与えられる熱抵抗の弾道輸送リミットはそれぞれの分散モデルから計算したシミュレーション結果とよく一致している．図 3.19 に $C_V \langle v \rangle$ の温度依存性を計算した結果を示す．フォノンの分散関係より得られる値であるため，弾道輸送領域においては分散の厳格化が重要となってくることがわかる．特に弾道輸送極限においては両分散で 2 倍近い熱抵抗値の差が見られる．これは，温度上昇を 2 倍近く過大評価してしまうことを意味し，現実的分散モデルの精度が解析結果に与える影響の大きさを示している．$C_V \langle v \rangle$ の差は 2 章でも述べたように主にフォノン分散を近似化した際における比熱の過小評価に起因したものである．しかし，この差は熱伝導率 κ を計算する際には散乱確率を調整することで相殺されているため，拡散領域では現れない．

一般的な熱伝導率の表式 $\kappa = C_V \langle v \rangle \lambda / 3$ を考慮すると，フーリエ則：$R_{\rm th}^{\rm F}(L)$ と弾道極限：$R_{\rm th}^{\rm B}(L)$ の変節点は $L = 4\lambda/3$ で計算される．したがって，よく知られているように弾道輸送と拡散輸送は

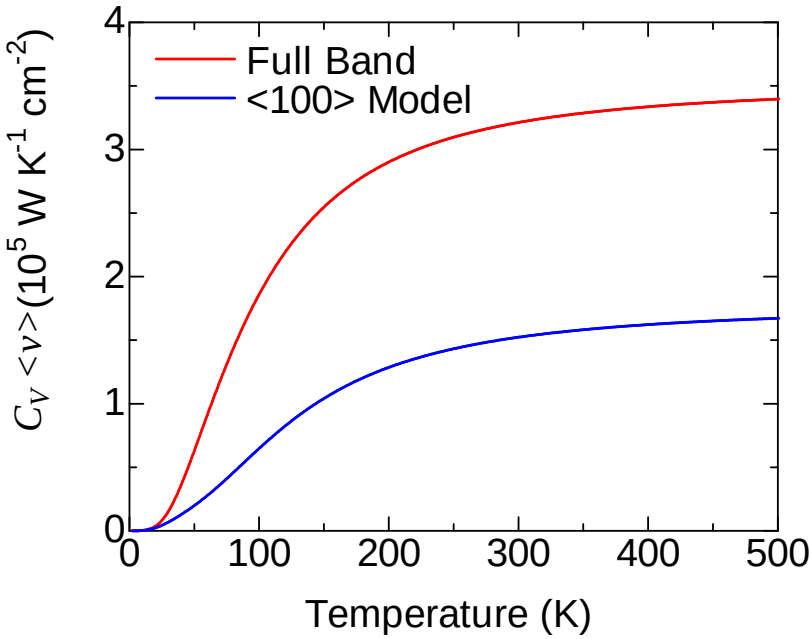

図 3.19: 分散より得られる $C_V\langle v\rangle$ の温度依存性. それぞれ，現実的分散モデル [8]，近似分散 [9] モデルを使用した計算結果を示す.

系のサイズとフォノンの平均自由行程 λ を比較することで見積もることが可能である．しかしながら, 図 3.18 に示されるように，2 つの輸送機構は L 変化と共に急峻に遷移するものではなく，その変化は徐々に起きる．これは図 2.32，図 2.33 で示したようにフォノン平均自由行程分布が長いテイルを有していることが原因であり，準弾道輸送は式 (3.27) と式 (3.26) を単に合成するだけでは表現ができないことを示唆している [14].

本計算結果は，デバイス長が $4\lambda/3$ およそ 120 nm を下回ると，フーリエ則が完全に破たんすること示唆している．したがって，これ以下のデバイスサイズの熱解析では，フォノンの準弾道輸送効果の影響が無視できない.

一方で，本研究では熱浴として Si を仮定しているため，以下の点が注意すべき事項として考えられる．本シミュレータのデバイス応用を考慮する際，相対的に熱伝導率の高いコンタクト電極を熱浴層と設定することになる．式 (3.26) に着目するとデバイスを縮小化に伴い，輸送を律速するパラメータとなるのは 1 つは熱源からの輻射である一方で 2 つ目は熱浴材料からの輻射となる．つまり，コンタクト電極における材料特性が微小デバイス中の熱輸送特性の解析において重要となってくる．そのため，現実的デバイス構造へ拡張する際には厳密にはコンタクト電極に対し，その物質に相当するフォノン分散を適用する等の処置が必要となる．また，コンタクト電極と Si 間で生成する界面熱抵抗もこういった熱流を決定する要素となる．4 章にて本シミュレータの現実的デバイス構造への拡張について述べるが，コンタクト材料特性，並びに界面熱抵抗の導入は行なっていない．したがってシミュレータによる定量的評価の精度向上に向け，これらの要素をシミュレータに導入することが今後の重要な課題となる.

3.3.4 薄膜 Si における熱抵抗のサイズ依存性

次に図 3.20 のような薄膜構造を想定したシミュレーションを行った．z 方向に設置した上下境界に対して 2 章で述べたランバート則に従う 100 % 拡散的なフォノン-境界散乱を導入した．図 3.21 に熱源から熱浴へ伝導する MC 粒子の軌跡の一例を示す．同じデバイス長さを仮定した場合 (図 3.17(a) 参照) と比較すると，MC 粒子の伝導が拡散的になっている様子が確認できる．構造内部におけるフォノンの平均自由行程分布は図 3.22 のようになり，バルクの場合と比較すると長いテイルが大幅にカットされている様子がわかる．

前節と同様の手法を用い，定常状態における温度分布より熱抵抗の値を算出した．図 3.23 は MC シミュレーションより算出した R_{th} のデバイス長さ L 依存性をプロットした結果を示している．バルクと比較して熱抵抗の値は上昇するが，これはフォノン-境界散乱の影響により熱伝導率の値が低下するためである．特にデバイス長が大きい時は，バルクのシミュレーション時と同様，

$$R_{\mathrm{th}}^{F} = \frac{L}{\kappa_{\mathrm{thinfilm}}} \tag{3.27}$$

で与えられるフーリエ則に従う．ここで $\kappa_{\mathrm{thinfilm}}$ は薄膜の熱伝導率である．フォノンの平均自由行程は図 3.22 のようにバルクと比較して大きく低下するため，フーリエ則の適用範囲が拡大している様子がわかる．

一方でデバイス長縮小化に伴う弾道熱抵抗値への収束は薄膜においても同様に観測することが出来る．特に弾道極限においてはバルクと熱抵抗の値が一致するのは注目すべき点である．薄膜中のフォノン輸送においても熱経路長との兼ね合いで弾道輸送成分が顕在化してくる．つまり，フォノンの平均自由行程以下の熱経路長を仮定する場合 (本計算の場合は約 10 nm 以下) は，弾道輸送に起因した熱抵抗を考慮する必要性があることを示唆している．

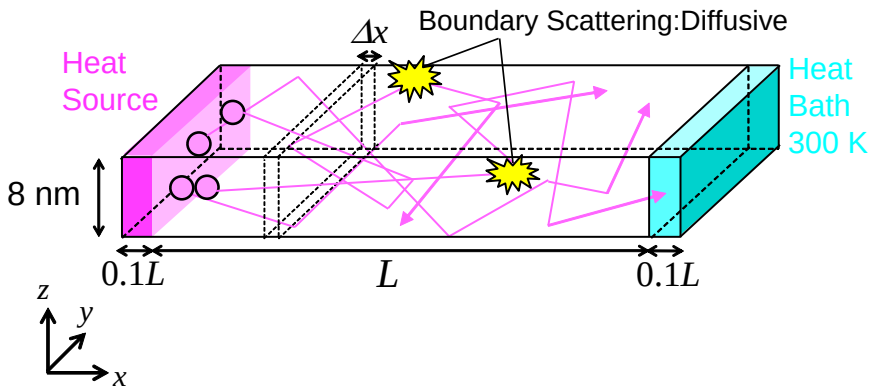

図 3.20: 温度解析シミュレーション構造．膜厚を 8 nm とし，境界に対してランバート則に従う拡散的な散乱を導入した．シミュレーション構造の図中 x 軸方向をデバイス長 L と定義した．

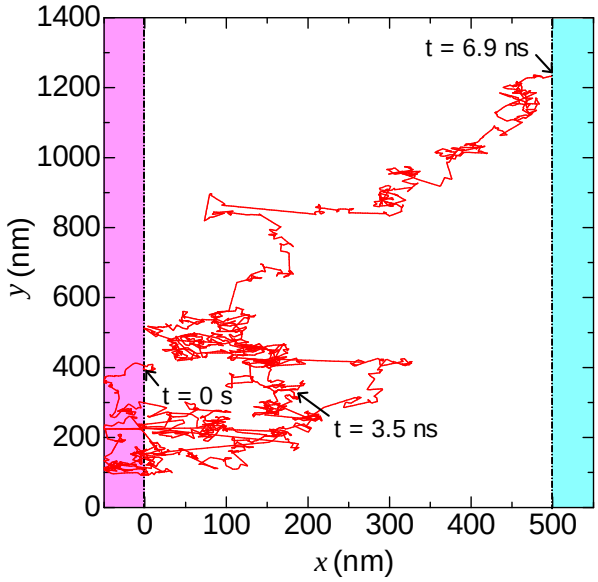

図 3.21: シミュレーション構造 (図 3.20) における熱源で生成した MC 粒子が熱浴に伝達するまでの軌跡の一例. $L = 500$ nm の場合を示す.

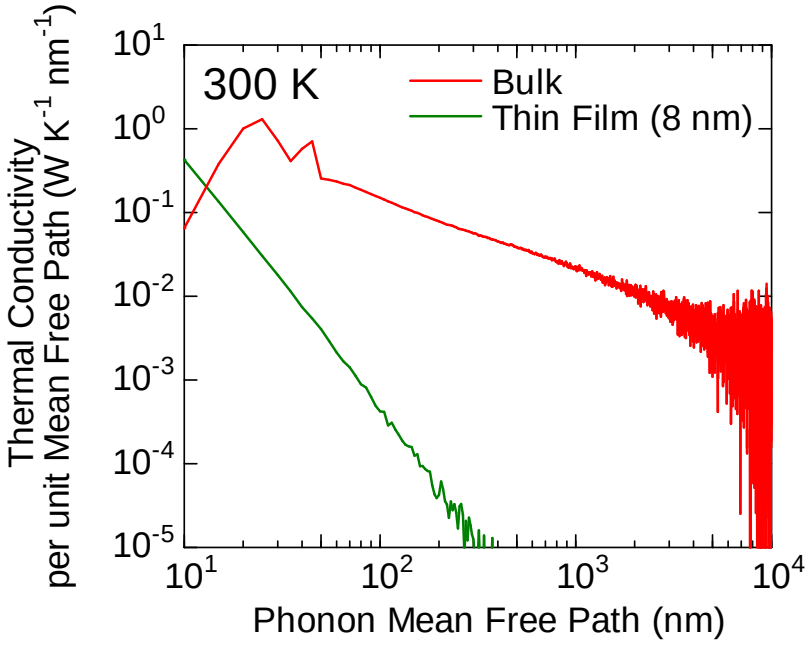

図 3.22: バルク Si と 8 nm 膜厚 Si におけるフォノン平均自由行程分布の比較.

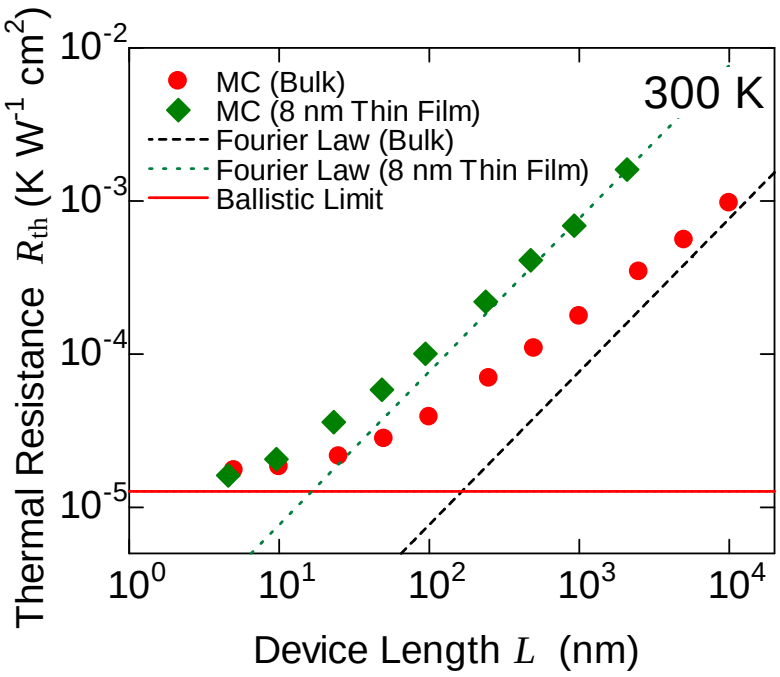

図 3.23: MC シミュレーションによるバルク Si と薄膜 Si の熱抵抗 R_{th} の解析結果の比較．それぞれ現実的分散モデル [8] を使用した．フーリエ則に従う特性を破線，並びに弾道輸送リミットを実線にて示す．

3.4 過渡応答熱伝導解析

3.4.1 シミュレーション構造

本研究で開発した MC 法の過渡応答熱伝導解析への応用について述べる．このような解析は，例えばトランジスタに微小時間電圧が印加された際に生成するジュール発熱の影響を調べる際に重要となってくる．本シミュレータにおけるフォノン-フォノン散乱による熱平衡の保持は **2.3.2** で述べたキルヒホッフ則に従うものである．そのため，計算時間が微小となりフォノン緩和時間に近づいた際の妥当性をフーリエ則と比較することで検証していく．

そのため，図 3.24 に示したような構造を想定し，内部に熱源を加えた際の構造内部における温度応答を解析した．構造は 300 K の熱浴槽を 2 つ仮定し，両端に設置することでヒートシンクとしている．内部に一定幅を持った熱源領域を設け，ヒートシンクへと伝搬する熱流を追跡することで，内部の温度分布の過渡応答を解析した．MC シミュレーションは，フォノン分散モデルとして現実的モデルを導入し，2 章にて熱拡散特性の較正を行ったものを用いている．また時間ステップ Δt は各シミュレーション時間 t_{sim} に対し，式 (2.22) より決定した．フォノン境界散乱は計算条件により鏡面反射，拡散的反射の 2 種類を仮定した．**3.3** でも述べた通り，特に拡散領域においてはフーリエ則での近似が有効となってくる．本計算では先述のように熱伝導方程式 (フーリエ則) を用いて同様の解析を行い，比較を行うことで MC シミュレータの妥当性を検証した．熱伝導方程式はある時間 t においての x 軸方向に対する温度分布 $T(x,t)$ より，式 (3.14) を用いて過渡応答解析を行った．初期条件として構造全体で 300 K 一定値を想定し，時刻 $t_{\mathrm{sim}} = 0$ ps を始点として熱源領域に対し熱流入を行った．

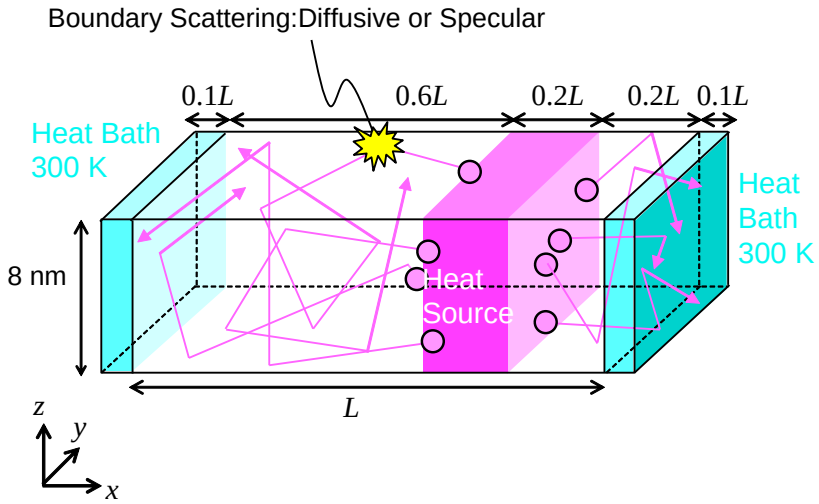

図 3.24: 温度過渡応答特性解析で想定したシミュレーション構造.

3.4.2 シミュレーション結果

まずフォノン-境界散乱に対し鏡面散乱を適用した．チャネル長 L の長さとして 50 μm を想定し過渡応答特性解析を行った．図 3.25 に計算結果を示す．それぞれ MC 法，フーリエ則による計算結果を示す．熱源の発熱密度として $Q = 4.2 \times 10^4$ W/cm^2 を仮定し，過渡応答時における温度分布をそれぞれ表した．両手法による各シミュレーション時間 t_{sim} における計算結果はよく一致しており，過渡応答温度解析について本シミュレータに導入したアルゴリズムの信頼性を確認することができた．一方同様にチャネル長 L の長さとして 500 nm を仮定し過渡応答特性解析を行った結果を図 3.26(a) に示す．熱源の発熱密度として $Q = 2.1 \times 10^6$ W/cm^2 を想定し，過渡応答時における温度分布をそれぞれ表したものだが，両手法で大きな相違が見られる．これは **3.3** で述べたように，フォノンの平均自由行程よりも小さい長さ領域においてフーリエ則が熱伝搬特性を過大評価してしまうためである．そこで次に熱源から熱浴までの平均距離 (250 nm) から図 3.18 を用いて，本構造における実効的な熱抵抗を求め，得られた κ を用いて熱伝導方程式を解析した．MC 法との比較結果を図 3.26(b) に示す．定常状態のみならず，過渡応答時においても両者の計算結果はよく一致しており，弾道領域においても本シミュレータによる解析が妥当であることがわかった．

さらに，フォノン-境界散乱に対しランバート則に従う拡散的散乱を適用し，チャネル長 L の長さとして 500 nm を仮定し過渡応答特性解析を行った結果を図 3.27 に示す．発熱量として先ほどと同様の $Q = 2.1 \times 10^6$ W/cm^2 を仮定したが，図 3.26(a) の場合と比較すると境界散乱の導入により両手法による各時間 t_{sim} の計算結果は非常に良く一致している．これは **3.3.4** でも述べたように，フォノン平均自由行程低減によりフーリエ則の適用範囲が拡大するためである (図 3.23 参照)．したがって，本計算で適用したランバート則によるフォノン-境界散乱モデルは過渡応答温度解析に対しても有効に働くと言える．

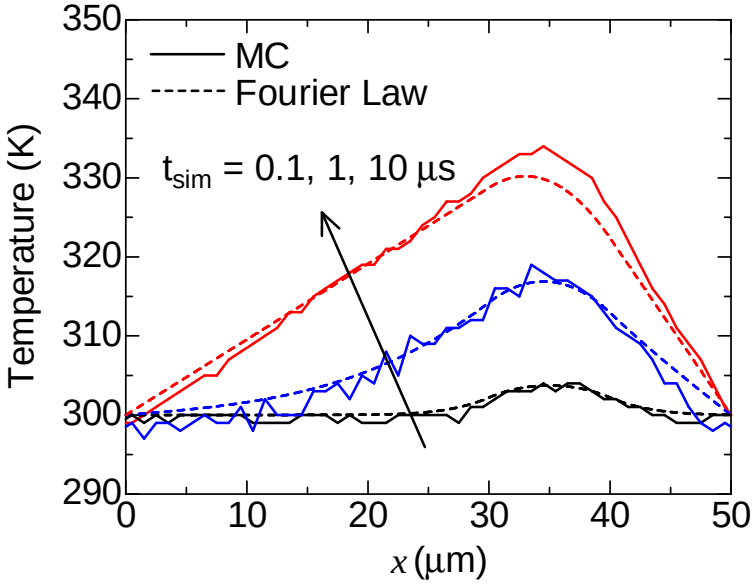

図 3.25: チャネル長 $L = 50$ μm を仮定した際の構造内部における過渡応答温度分布特性解析結果．実線は MC 法での結果，破線はフーリエ則による計算結果を示す．MC 法においてフォノン-境界散乱は鏡面散乱を仮定し，フーリエ則では式 (3.14) の κ の値として 125 $\mathrm{Wm^{-1}K^{-1}}$ を用いた．熱源の値としてて $Q = 4.2 \times 10^4$ $\mathrm{W/cm^2}$ を仮定し，時間 $t = 0.1$(黒)，1(青)，10 μs(赤) 時の温度分布をそれぞれ示す．

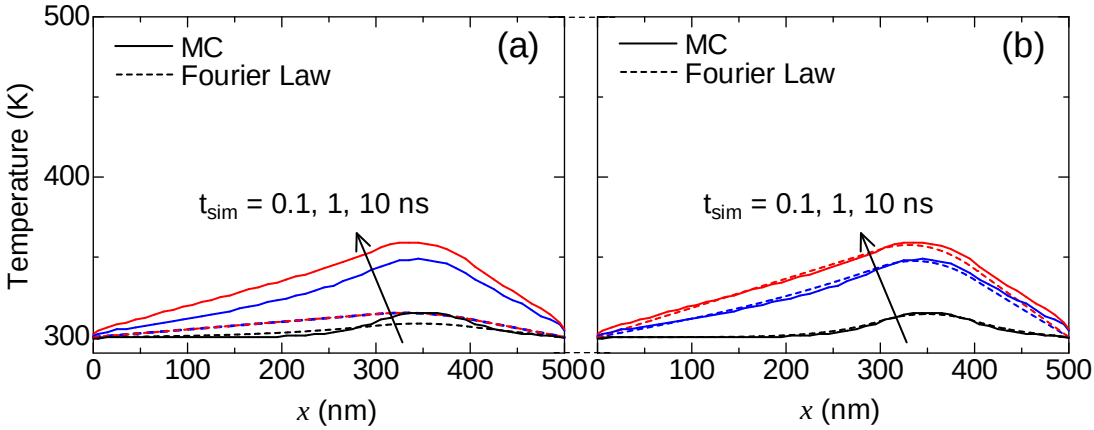

図 3.26: チャネル長 $L = 500$ nm を仮定した際の構造内部における過渡応答温度分布特性解析結果．実線は MC 法での結果を示す．フォノン-境界散乱は鏡面散乱を仮定した．破線はフーリエ則による計算結果を示しており，式 (3.14) の κ の値としてそれぞれ (a)125 $\mathrm{Wm^{-1}K^{-1}}$，(b)34 $\mathrm{Wm^{-1}K^{-1}}$ を適用した．熱源の値として $Q = 2.1 \times 10^6$ $\mathrm{W/cm^2}$ を仮定し，時間 $t = 0.1$(黒)，1(青)，10 ns(赤) 時の温度分布をそれぞれ示す．

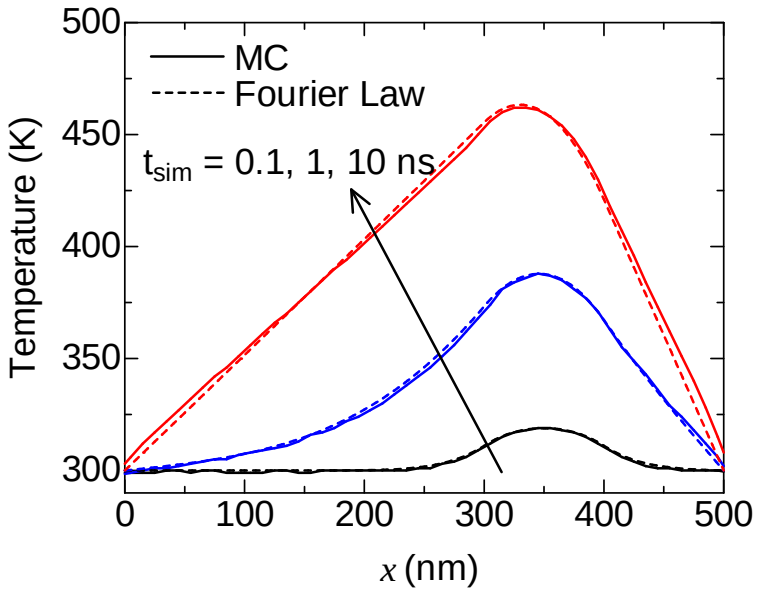

図 3.27: チャネル長 $L = 500$ nm を仮定した際の構造内部における過渡応答温度分布特性解析結果．実線は MC 法での結果，破線はフーリエ則による計算結果を示す．MC 法においてフォノン-境界散乱はランバート則に従う拡散的散乱を仮定し，フーリエ則では式 (3.14) の κ の値として 14 $\mathrm{Wm^{-1}K^{-1}}$ を用いた．熱源の値としてて $Q = 2.1 \times 10^6$ $\mathrm{W/cm^2}$ を仮定し，時間 $t = 0.1$(黒)，1(青)，10 ns(赤) 時の温度分布をそれぞれ示す．

3.5 まとめ

MC シミュレータに対し温度解析を行うアルゴリズムの導入を行い，単純構造の温度解析を行った結果以下のような知見を得ることが出来た．

- 高温と低温の恒温槽を両端に設定し，内部の温度分布の構造サイズによる変化を解析した結果，構造サイズを縮小化すると，系の温度は一様分布へと収束していく．また分散モデルによる影響を調べた結果，弾道輸送極限における温度分布の勾配は，その精度に大きく依存することがわかった．
- バルク Si における熱抵抗の構造サイズ依存性を解析した．デバイス長が十分に大きい時は，熱抵抗はフーリエ則に従うサイズ依存性を示すが，フォノンの平均自由行程おおよそ 100 nm 近傍を下回ると一定の値へと収束し，この傾向が破たんすることが確認された．このような領域では弾道フォノンが輸送特性を決定する支配的要因であるため，分散モデルの精度が重要となってくる．
- 薄膜 Si に関しても同様の解析を行った結果，バルク Si と比較してフーリエ則の適用範囲が拡大する．これはフォノン-境界散乱の影響でフォノン平均自由行程がバルク中よりも低下することに起因する．
- MC 法を用いて過渡応答温度解析を行った．バルク，並びに薄膜構造においてフーリエ則との比較を行うことでシミュレータの妥当性を確認した．

参考文献

[1] R. Wang, J. Zhunge, C. Liu. R. Huang. D. W. Kim, D. Park, and Y. Wang, " Experimental Study on Quasi-Ballistic Transport in Silicon Nanowire Transistors and the Impact of Self-Heating Effects, "IEDM Tech. Digest 2008, 31.3.

[2] C. Fiegna, Y. Yang, E. Sangiorgi, and A. G. O'Neill, " Analysis of Self-Heating Effects in Ultrathin-Body SOI MOSFETs by Device Simulation, "IEEE Trans. Electron Devices **55**, 233 (2008).

[3] E. Pop and K. E. Goodson, " Thermal phenomena in nanoscale transistors, "J. Electron. Packag. **128**, 102 (2006).

[4] E. Pop, K. Banerjee, P. Sverdrup, K. E. Goodson, " Localized heating effects and scaling of sub-0.18 micron CMOS devices, "IEDM Tech. Digest 2001, 31.1.

[5] M. E. Siemens, Q. Li, R. Yang, K. A. Nelson, E. H. Anderson, M. M. Murnane, and H. C. Kapteyn, " Quasi-ballistic thermal transport from nanoscale interfaces observed using ultrafast coherent soft X-ray beams, "Nature. Mat. **9**, 26 (2010).

[6] Y. Xu, J. S. Wang, W. Duan, B. L. Gu, and B. Li, " Nonequilibrium Green 's function method for phonon-phonon interactions and ballistic-diffusive thermal transport, "Phys. Rev. B **78**, 224303 (2008).

[7] M. Luisier, " Atomistic modeling of anharmonic phonon-phonon scattering in nanowires, " Phys. Rev. B **86**, 245407 (2012).

[8] W. Weber, " Adiabatic bond charge model for the phonons in diamond, Si, Ge, and α-Sn, " Phys. Rev. B **15**, 4789 (1977).

[9] P. Chantrenne, J. L. Barrat, X. Blase, and J. D. Gale, " An analytical model for the thermal conductivity of silicon nanostructures, "J. Appl. Phys. **97**, 104318 (2005).

[10] K. Kukita, I. N. Adisusilo, and Y. Kamakura, " Monte Carlo simulation of diffusive-to-ballistic transition in phonon transport, "J. Comput. Electr., publised online. DOI:10.1007/s10825-013-0511-6

[11] D. Lacroix, K. Joulain, and D. Lemonnier, " Monte Carlo transient phonon transport in silicon and germanium at nanoscales, "Phys. Rev. B **72**, 064305 (2005).

[12] B. T. Wong, M. Francoeur, and M. P. Menguc, " A Monte Carlo simulation for phonon transport within silicon structures at nanoscales with heat generation, "Int. J. Heat Mass Trans. **54**, 1825 (2011).

[13] M. Kaviany, *Essentials of Heat Transfer: Principles, Materials, and Applications.* (Cambridge University Press, Cambridge, 2011).

[14] D. M. Rowe, *Thermoelectrics Handbook: Macro to Nano* (CRC Press, New York, 2005).

第4章　ナノスケールデバイスの熱特性解析

4.1　はじめに

Si-MOSFET のさらなる微細化に向け多重ゲート，FinFET，ナノワイヤ型といった立体型新構造への移行が進んでいるのは第 1 章で述べた通りである．以上の構造では特に発熱領域であるチャネルと基板の熱結合が悪化することからその熱伝搬特性への関心が高まっている [1]．半導体デバイス中の熱解析はこれまでは主にフーリエ則に基づく熱伝導方程式を用いて行われてきた [2–4]．構造縮小化と共にその精度が疑問視され，特にフォノンの平均自由行程およそ 100 nm 近傍を下回るデバイススケールではフーリエ則が破たんすることを 3 章にて確認した．すなわち，このサイズ以下のデバイスではフォノンの準弾道特性が熱特性を決定する重要な要素となってくることが予測される．

一方で，熱伝導が拡散的に振る舞う，例えば薄膜，ワイヤ構造等といった狭い領域中においてはフーリエ則での近似が有効となる可能性があることも指摘した．弾道輸送が活発なデバイスサイズではフーリエ則が熱輸送効率を過大評価するが，これはフォノンの平均自由行程と比較し，熱経路の長さが短くなってくるときに顕在化する現象である．複雑な微細素子構造内部の熱伝導は，拡散と弾道性が混在した特性を示すと予測され，その解析は容易ではない．

図 4.1 に立体型トランジスタの代表例として FinFET の構造を挙げる．FinFET はゲート長 22 nm の世代から既に Intel により実際に CPU への搭載が開始されている [5]．図 4.1(a) は集積回路系に導入する際のレイアウトの一例を示す．複数素子に対し，細いチャネルで接合したソースドレ

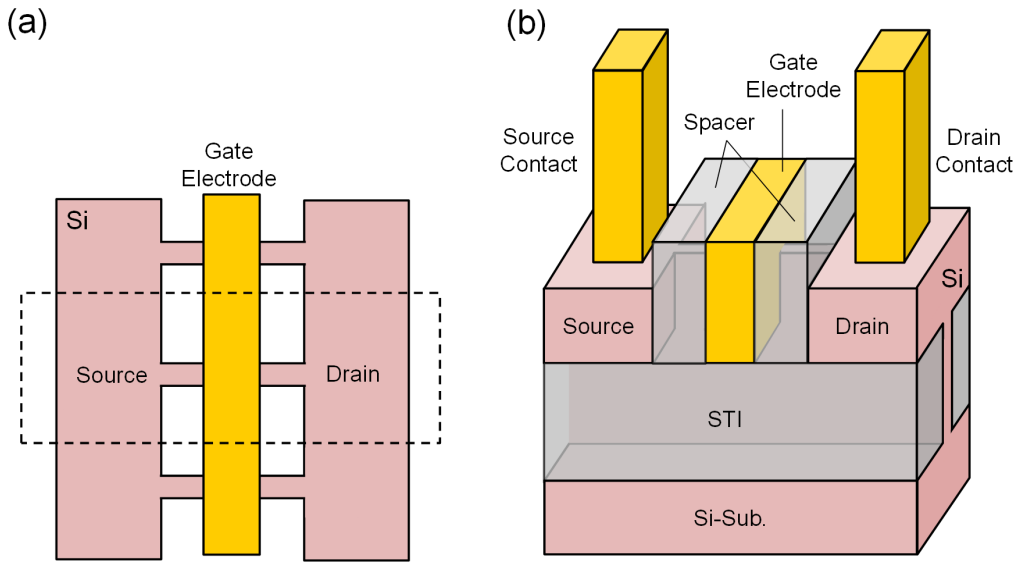

図 4.1: (a)FinFET アレイの上面図の例．(b)(a) の点線部を切り出した FinFET の単一素子構造．

イン構造を設け，チャネル上にゲートを形成した構造である．単一素子あたりの構造は図 4.1(b) に示した通りである．実際の FinFET は図のようにチャネル細線化による寄生抵抗の増大を抑制すべく，ソースドレイン領域をパッド状にエピタキシャル成長させた構造を有することが多い．ゲート長 22 nm 以下にまで微細化されたスケールにおいてはチャネルを電子がほとんど散乱されずに伝導する．そのため，運動エネルギーのほどんどをドレイン端で失い，発熱領域が集中するため，ホットスポットと呼ばれる局所高温領域が形成される [6,7]．したがって狭い領域で生成した熱をいかに逃がすかということが重要な課題となる．実際のデバイス構造は素子同士を電気的に分離させるため酸化膜で覆われた構造をとっている．酸化膜は熱伝導率が Si の約 100 分の 1 程度であるために，熱はほとんど伝導しないと考えられるため，熱伝導性の良い Si 中の輸送を中心に考える必要がある．例えば図 4.1(b) であれば，熱伝導率の高いコンタクト電極が放熱経路として機能するために，ソース，ドレイン部分への伝熱性が重要であると考えられる．つまり熱輸送は一様な構造中を伝導するものではなく，断面積が均一ではない経路を介して行われる．過去の熱解析アプローチではこういった構造を図 4.2 のように部位ごとに分けて捉え，熱抵抗の値をそれぞれ仮定する手法が用いられてきた．また使用される熱伝導率の値は拡散輸送理論の成立が前提となっており，2 章で述べたようにバルク，薄膜，ワイヤの熱広がり方向に対し，無限空間を仮定して得られる値であった．しかし一方で，3 章で述べたように微細構造中ではフォノンの準弾道輸送特性が実効的な熱伝導率に対し大きな影響を与え，フォノンの平均自由行程と伝導距離の兼ね合いで大きく変動する．つまり，弾道輸送の顕在化が予測されるデバイス中で拡散輸送理論から導かれた熱伝導率の値を用いることは物理的観点から疑問である．

したがって将来のナノスケール構造内部の熱伝導には拡散的輸送と準弾道的輸送の組み合わせを考慮することが重要である．そのため実際のデバイス構造の熱解析に対しては本研究で用いたモンテカルロ法が有用性を増してくると考えられる．しかしながら，過去の MC シミュレーションによる熱解析は棒構造などの簡易構造の温度解析に限られてきたため [8–10]，複雑な構造への適用性が高い MC 法の利点を活かした報告例がない．

本研究では，MC シミュレータの高い構造適用性に着目し，3 章にて行った温度解析を実際の現実的デバイス構造へと拡張した．そして，2 章で調べた熱拡散特性，並びに 3 章にて確認したフォノンの準弾道特性が現実的デバイス構造内部においてどのように顕在化するかを調べた [11]．さらにフーリエ則ベースの熱解析手法の妥当性あるいは限界についても議論を試みた．

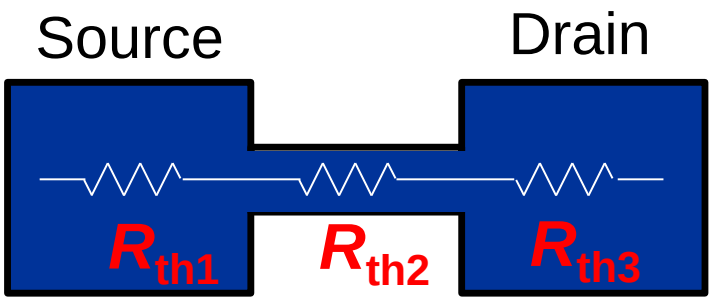

図 4.2: FinFET 構造内の等価熱回路における抵抗表記の例.

4.2 FinFET における熱特性解析

4.2.1 シミュレーション構造

本研究では，これまで単純構造のみに対して応用されてきた熱輸送 MC シミュレータを現実的デバイス構造へと拡張した．既に実用化されている立体型構造の代表例として FinFET が挙げられるが [12]，今回ゲート長 22 nm を持つバルク FinFET を想定し，その熱伝導特性を解析した．図 4.3 に示したのが本計算で用いたデバイスの構造であり [13]，これは図 4.1(b) のバルク FinFET 単一素子構造において，ゲート電極や素子分離領域 (STI)，及びスペーサ部位を省略したものに相当する．

バルク FinFET は Si 基板を用いてエッチングを施すことによりフィン部分を作製し，SiO_2 等の絶縁膜材料で素子間を電気的に分離した構造をとっている．そのため，チャネル領域と Si 基板が図のようにフィンを介して接合した構造となる．その後，寄生抵抗を低減するため，例えばソースドレイン領域等を局所的にエピタキシャル成長させることが多い．

このようなスケールでは電子はほとんど散乱を受けずに準弾道的にドレイン端まで達し，電子-光学フォノン散乱を介して局所的な発熱をもたらす [7,14]．本研究では簡単のため，発熱密度は熱源として設定した領域内で一様であると仮定した．

熱源の全発熱量は直流電流オン動作時を仮定し，次式より算出した．

$$P = W \cdot I_{\mathrm{on}} \cdot V_{\mathrm{D}} \tag{4.1}$$

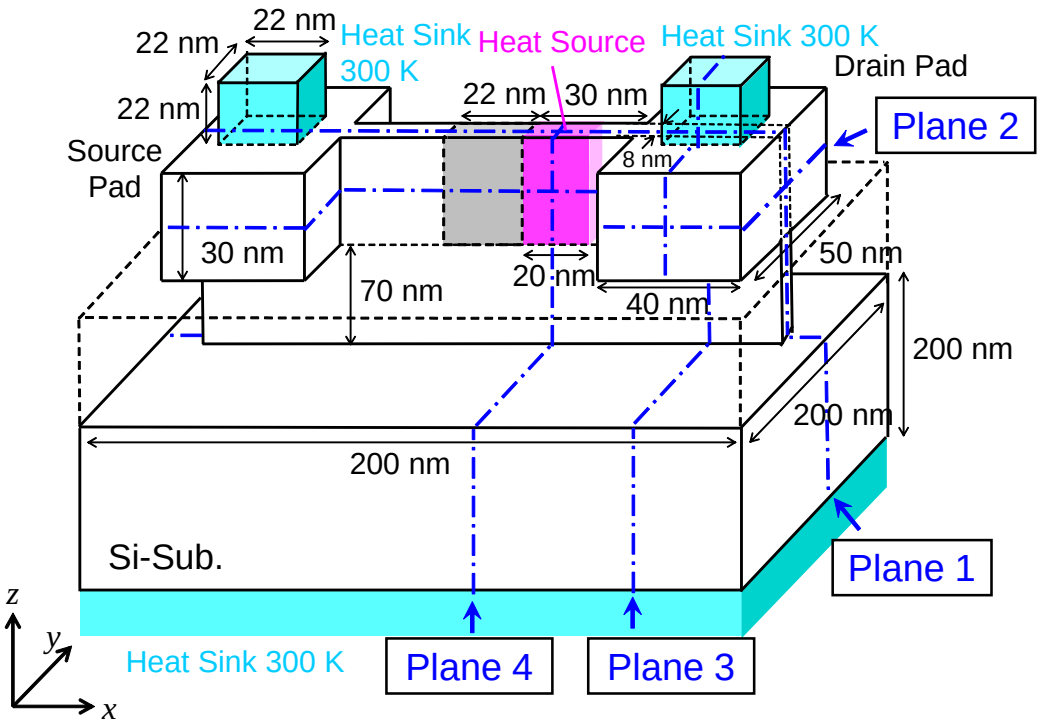

図 4.3: 熱特性シミュレーションに用いた FinFET の構造．実際には灰色部分の周囲にゲート電極が存在するが，省略した．

ここで W はチャネル幅であり，

$$W = d_{\mathrm{Gate}} + 2h_{\mathrm{Gate}} \tag{4.2}$$

で与えられる．d_{Gate} はフィン幅，h_{Gate} はフィン高さを表している．P の値は，同様の構造を用いたオン動作における I-V 曲線のシミュレーション値 (I_{on}=0.5 mA/μm，V_{D} = 1 V) [13] から式 (4.1) により算出した 34 μW を用いた．この時，I_{on} は単位チャネル幅あたりの電流値を示す．

電子輸送に対する MC シミュレーションの結果 [14] を参考に，熱源長さ 20 nm を決定した．以上の熱源を持つバルク FinFET 構造を MC シミュレータ上で作成し，内部の熱輸送解析により得られる定常状態における温度分布を算出した．

FinFET は実際は素子分離酸化膜で覆われた構造を有している．しかしその熱伝導率はシリコンに比べて小さく，また厚みが大きいため，熱抵抗は Si に比べて十分に大きいと考えられる．したがって本研究では酸化膜への熱伝導は無視した．また，簡単のためゲート酸化膜を介してゲート電極に伝導する過程も本研究では考慮していない．それゆえ，本研究で生成する熱はソース，ドレインコンタクト部分，並びに Si 基板方向へと排出されることになると考えることが出来る．本シミュレーションではコンタクト並びに Si 基板領域を 300 K 熱浴層と仮定し，放熱領域とした．熱源，熱浴の形成方法は 3 章で説明した通りである．

MC シミュレーションではフォノン分散関係として現実的分散モデルを導入し，散乱に関するパラメータは，2 章にて較正を行ったものを用いた．また実際の FinFET が図 4.1 のようにアレイ状に配置することを考慮すると，パッド部位並びに，Si 基板部位に対してはバルク Si のように取り扱うことが望ましい．そのため，これらの領域に対しては鏡面散乱を適用した．一方で，フィン領域に相当する Si 薄膜部分においては鏡面散乱，あるいはランバート則に従う拡散的境界散乱を適用しそれぞれの計算結果を比較した．さらに本研究では MC 法による計算結果と比較するため，フーリエ則を用いて同様の解析を行った．熱伝導方程式は以下で与えられる式を想定し，3 次元的に解析を行った [15].

$$C_V \frac{\partial T}{\partial t} = \kappa \nabla^2 T + Q \tag{4.3}$$

ここで，Q は発熱密度分布の値である．解析の際熱伝導方程式に導入したパラメータは以下表 4.1 に示した通りである．

表 4.1: 熱伝導方程式におけるパラメータ値．それぞれフィン，パッド，Si 基板領域で想定した κ を示す．

	κ (Wm^{-1}K^{-1})
フィン	125 (Specular)
	14 (Diffusive)
パッド	125
Si 基板	125

4.2.2 シミュレーション結果

図 4.4〜図 4.7 にそれぞれフーリエ則，MC 法により解析して得たデバイス内部の定常状態における温度分布を示す．図 4.5 は MC 法にて素子境界に対してのフォノン散乱は鏡面的であると仮定

した場合の計算結果である．比較対象である熱伝導方程式による解析結果を図 4.4 に示した．ホットスポットにおける最高到達温度に着目すると，MC 法にて格子温度上昇が顕著に現れており，その温度上昇値 ΔT はフーリエ則の 5.7 倍である．この温度差の原因は，ホットスポット近傍で発現する準弾道輸送効果によるものと考えられる．すなわち，熱源の幅がフォノンの平均自由行程 (この場合はバルク Si) と比較して小さくなり，また放熱槽までの距離も短いために準弾道輸送効果による熱輸送効率の低下が顕在化する．

次に現実的デバイスを想定し，MC 法にてフォノンの境界での散乱を拡散的であると仮定した．フーリエ則並びに MC 法から得られた定常温度分布を，図 4.6，図 4.7 に示す．表 4.1 に示すように熱伝導方程式の κ は，フィン領域に限定して薄膜 Si の κ を適用した．ホットスポットにおける最高到達温度に着目するとフーリエ則と MC 法から計算された ΔT の差は 2 倍となっており，先ほどの鏡面散乱による結果と比較して，温度上昇が縮まっている様子が確認できる．

しかし拡散的境界散乱を導入し，内部の熱輸送が拡散的となったにも関わらず依然として，MC 法での計算結果は格子温度の上昇が顕著になることを示唆している．次節にてこの要因について詳しく分析していく．

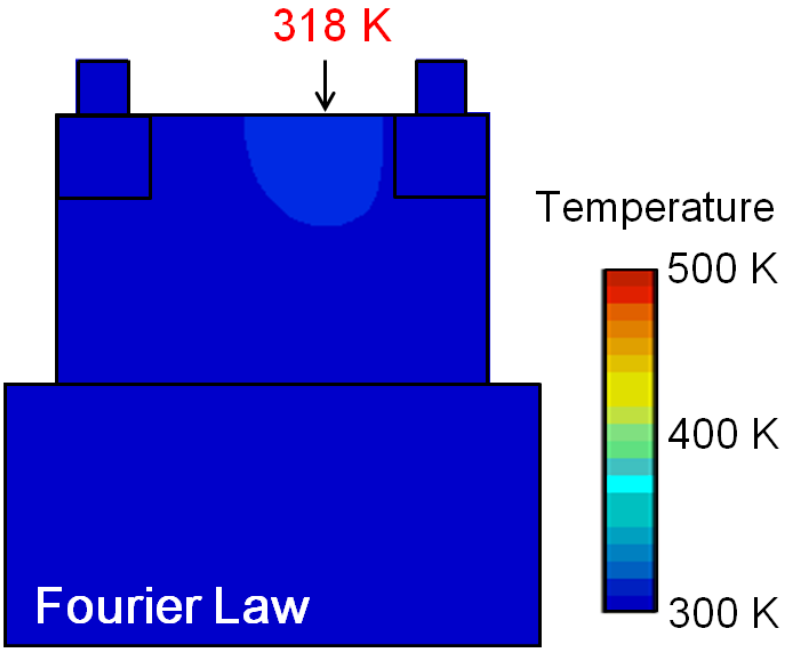

図 4.4: フーリエ則による FinFET 熱特性解析結果．図 4.3 中の Plane 1 における定常状態での温度分布を示した．ホットスポットにおける全発熱量を 34 μW と設定し，熱伝導方程式にはバルク Si の κ を使用した．

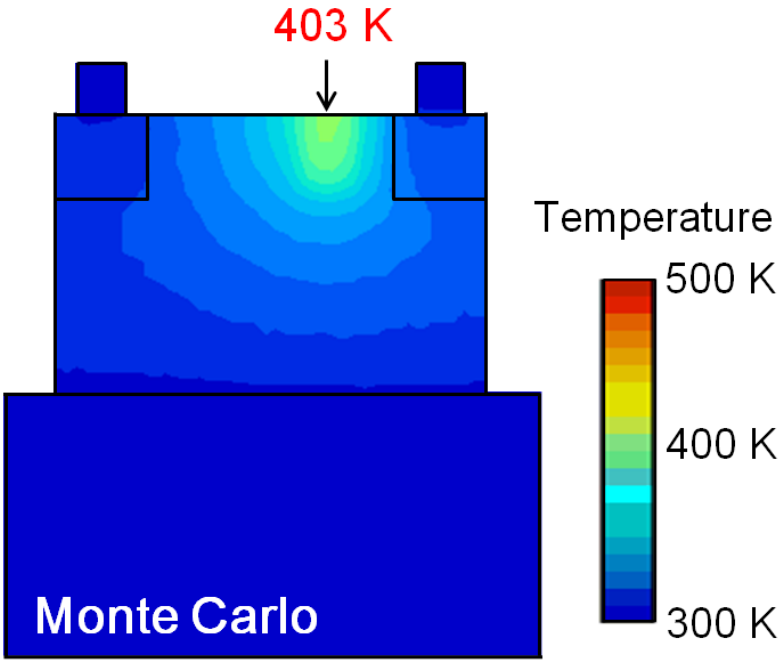

図 4.5: MC 法による FinFET 熱特性解析結果．図 4.3 中の Plane 1 における定常状態での温度分布を示した．ホットスポットにおける全発熱量を 34 μW と設定し，フォノンの境界での散乱は鏡面的であると仮定した．

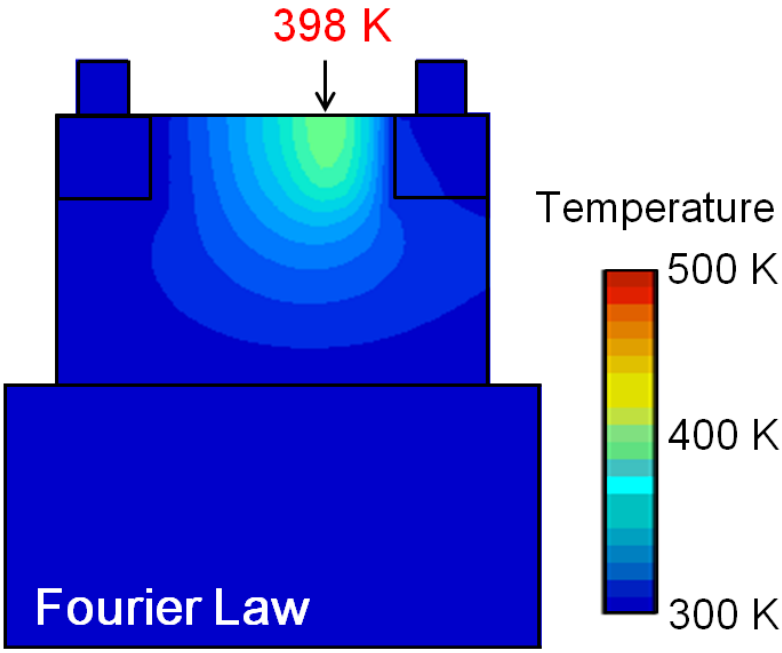

図 4.6: フーリエ則による FinFET 熱特性解析結果．図 4.3 中の Plane 1 における定常状態での温度分布を示した．ホットスポットにおける全発熱量を 34 μW と設定し，熱伝導方程式の κ にはフィン部には薄膜 Si の κ，その他にはバルク Si の κ を使用した．

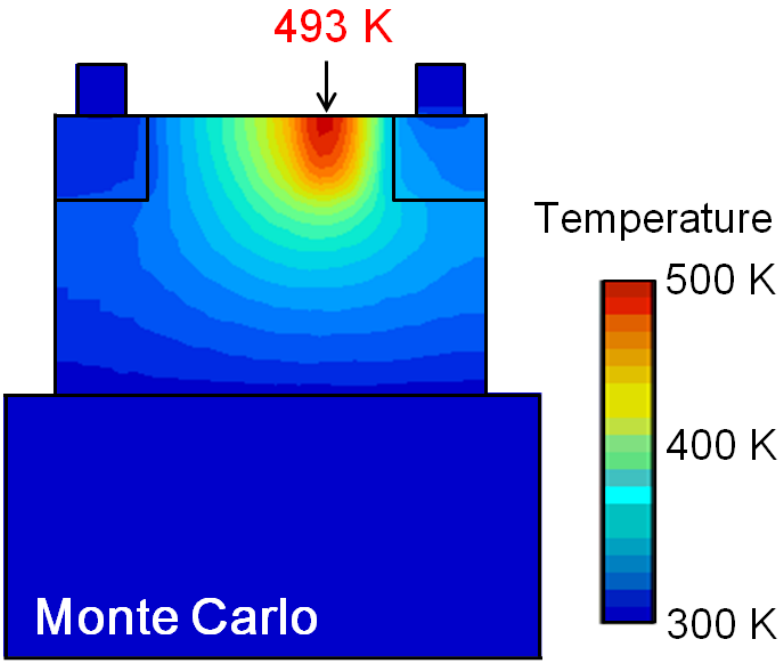

図 4.7: MC 法による FinFET 熱特性解析結果．図 4.3 中の Plane 1 における定常状態での温度分布を示した．ホットスポットにおける全発熱量を 34 μW と設定し，フォノンの境界での散乱は拡散的であると仮定した．

4.2.3 フーリエ則と MC 法の計算結果に関する考察

前節の図 4.6 と図 4.7 に現れた計算結果の相違について考察する．図 4.8 に図 4.7 と同じシミュレーション条件を用いて MC 法から得られた Plane 2 断面 (図 4.3 参照) における定常温度分布を示

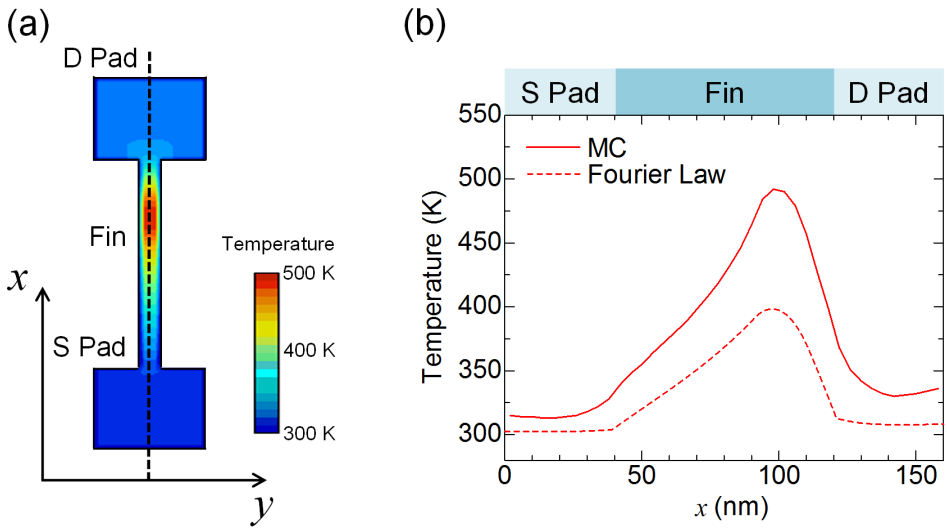

図 4.8: (a) 図 4.3 中の Plane 2 断面における定常状態での温度分布を MC 法で計算した結果を示した．(b) (a) の点線部に沿った温度分布．実線が MC 法の計算結果，破線がフーリエ則での計算結果を示す．

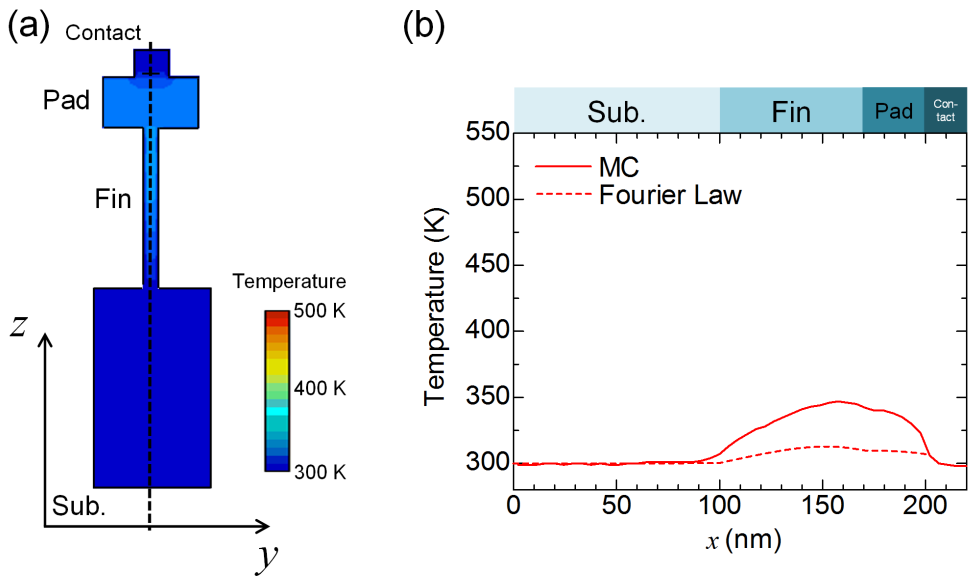

図 4.9: (a) 図 4.3 中の Plane 3 断面における定常状態での温度分布を MC 法で計算した結果を示した．(b) (a) の点線部に沿った温度分布．実線が MC 法の計算結果，破線がフーリエ則での計算結果を示す．

す．この時比較対象として，図 4.8(b) に図 4.6 と同じシミュレーション条件から得られたフーリエ則による計算結果も示す．また，図 4.9 に Plane 3 断面，図 4.10 に Plane 4 断面における同様の比較結果を示す (図 4.3 参照)．図 4.8(b) より，チャネル領域に着目すると MC 法の結果はフーリエ則と比較してより急峻な温度勾配が現れている．特にドレインパッド，並びにソースパッド部分に着目すると MC 法の結果には顕著な温度上昇が見られる．同様の傾向は，図 4.9(b) のフィン，およびパッド部分における温度分布にも確認される．この時，MC 法の計算結果では特にドレインコ

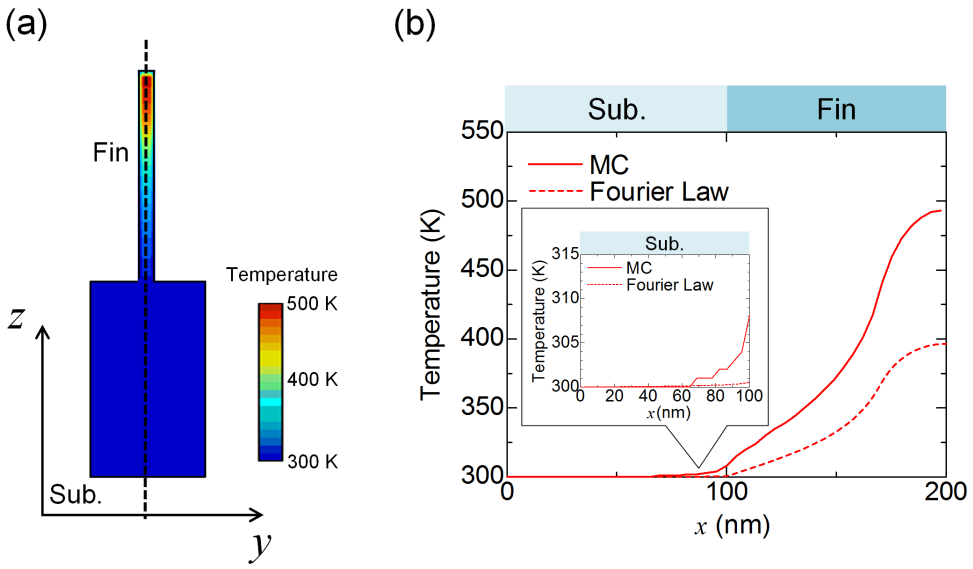

図 4.10: (a) 図 4.3 中の Plane 4 断面における定常状態での温度分布を MC 法で計算した結果を示した．(b) (a) の点線部に沿った温度分布．実線が MC 法の計算結果，破線がフーリエ則での計算結果を示す．

ンタクト直下において急峻な温度勾配が現れている事が特徴として挙げられる．さらに図 4.10(b) の MC 法とフーリエ則の差は特にフィン領域に現れていることがわかる．3 章で述べたように，フィンのように熱の拡散伝導性が強まる領域においては，熱流はおおよそ温度勾配に比例する特性を有す．そのため，MC 法では基板への熱はけがより促進されることが本結果から予測される．しかし一方で，Si 基板領域に着目するとフィン端における MC 法の温度はフーリエ則の約 13 倍となっており，この部分に熱流を抑制する要因があると考えられる．

そこでホットスポットでの生成熱がドレイン，ソースコンタクト，並びに Si 基板に対し，どのように伝導されているのかを MC シミュレータ上で計算した．まず，ドレイン，ソースコンタクト，並びに Si 基板へと排出される単位時間あたりの熱量をそれぞれ，Q_{DC}，Q_{SC}，Q_{Sub} と定義する．ある時刻 t〜$t+\Delta t$ において熱浴槽で消去された MC 粒子数を $N_{\mathrm{delete}}(t)dt$，新たに生成された MC 粒子数を $N_{\mathrm{create}}(t)dt$ とすると両者の差分から流入熱量が求められる．熱浴における計算時間ステップ Δt 毎に消去，生成された MC 粒子のエネルギーを加算していき，時間平均をとることで次式より排出熱量 Q が得られる．

$$Q = \frac{1}{t_{\mathrm{sim}}} \int_{t=0}^{t_{\mathrm{sim}}} dt (N_{\mathrm{delete}}(t) - N_{\mathrm{create}}(t)) E^{*} \tag{4.4}$$

ここで t_{sim} は計算時間を示している．計算結果を図 4.11 に示す．t_{sim} を十分大きく取ることで熱流の収束が得られることがわかる．

比較のため，フーリエ則の結果からも同様に排出量の算出を行った．フーリエ則では熱浴槽に対する流入面 (面積 S) に対し，温度勾配を面積分することで

$$Q = \left| -\kappa \int_{S} \nabla T d\mathbf{S} \right| \tag{4.5}$$

から熱浴槽に流れ込む熱量を求めることができる．図 4.12(a) に排出割合を計算した結果を示す．

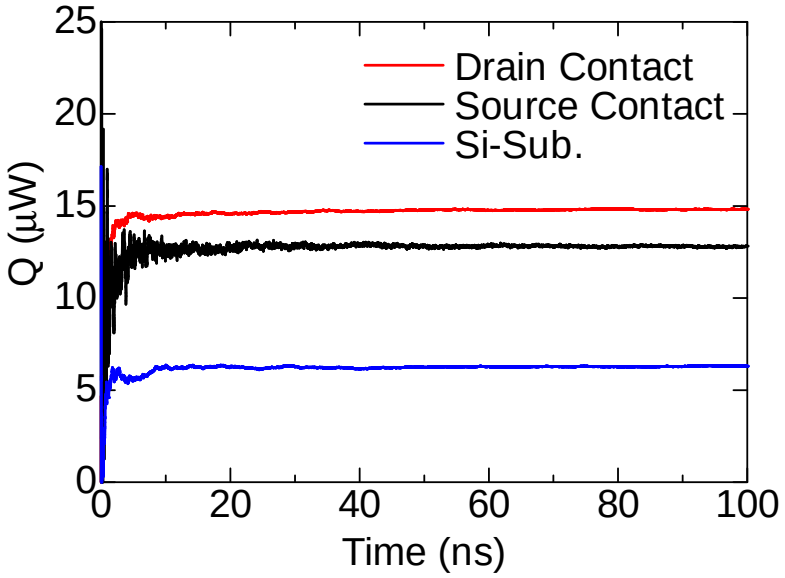

図 4.11: MC シミュレータより FinFET における熱排出量を計算した結果．それぞれ，ドレイン，ソースコンタクト，Si 基板への熱流量 Q_{DC}，Q_{SC}，Q_{Sub} を示している．

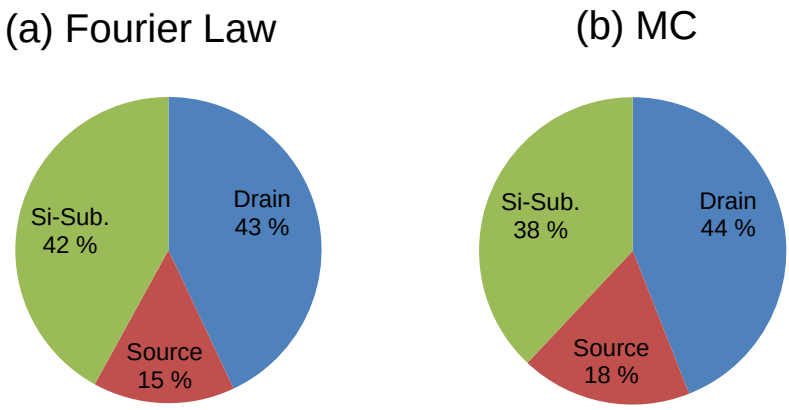

図 4.12: ホットスポットからドレイン，ソースコンタクト，Si 基板への熱排出割合を計算した結果．(a) フーリエ則，(b)MC 法から得た結果を示す．

比較のため，MC 法における排出割合を図 4.12(b) に示す．両者から得られる排出割合はほぼ同等の結果を示しており，共にドレインコンタクト，並びに Si 基板へ主に熱排出されていることがわかる．図 4.10 の結果より，MC 法では Si 基板への熱はけが促進されることが予測されたが，実際は基板への排出量にあまり大きな変化は見られない．これは **3.1** の図 3.2(b) で述べたように熱源幅が狭くなることで弾道輸送効果が顕在化し，熱流抑制が起こるためであると考えられる．

そこで FinFET における熱抵抗を算出し，フーリエ則と MC 法の計算結果の差について定量的評価を行った．図 4.13 に示すように FinFET 内部の熱抵抗を定義すると，各熱抵抗は表 4.2 に示

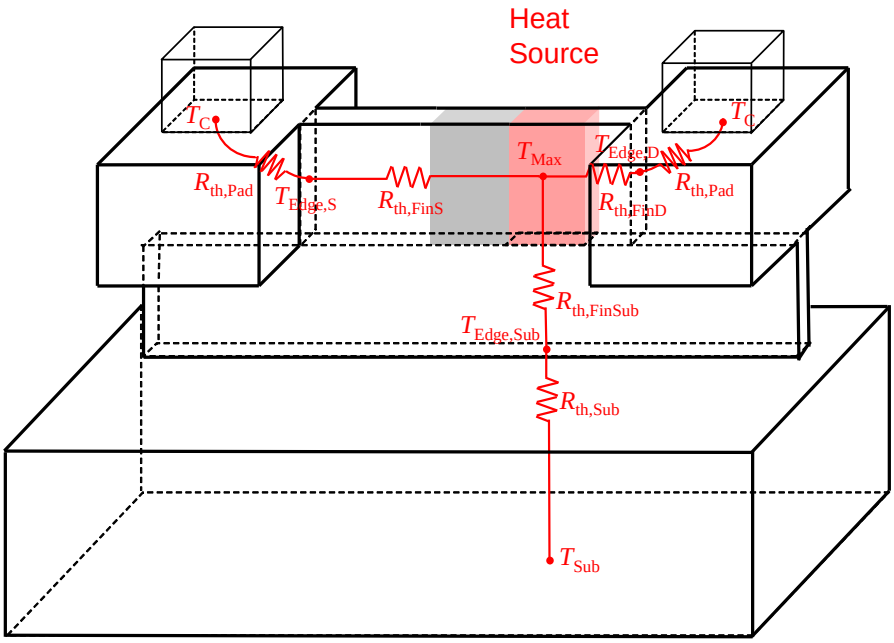

図 4.13: FinFET における熱抵抗 R_{th} の定義．$T_{\mathrm{Edge,D}}$，$T_{\mathrm{Edge,S}}$，$T_{\mathrm{Edge,Sub}}$，T_{C}，T_{Sub} はそれぞれの箇所における温度を示す．

表 4.2: 図 4.13 における各抵抗値 R_{th} の計算式.

$R_{\mathrm{th,FinD}} = (T_{\mathrm{Max}} - T_{\mathrm{Edge,D}})/Q_{\mathrm{DC}}$
$R_{\mathrm{th,FinS}} = (T_{\mathrm{Max}} - T_{\mathrm{Edge,S}})/Q_{\mathrm{SC}}$
$R_{\mathrm{th,FinSub}} = (T_{\mathrm{Max}} - T_{\mathrm{Edge,Sub}})/Q_{\mathrm{Sub}}$
$R_{\mathrm{th,Pad}} = (T_{\mathrm{Edge,D}} - T_{\mathrm{C}})/Q_{\mathrm{DC}} = (T_{\mathrm{Edge,S}} - T_{\mathrm{C}})/Q_{\mathrm{SC}}$
$R_{\mathrm{th,Sub}} = (T_{\mathrm{Edge,Sub}} - T_{\mathrm{Sub}})/Q_{\mathrm{Sub}}$

す計算式を用いて見積もることが出来る．その計算結果を図 4.14 に示す．それぞれホットスポット中心からドレイン，ソースコンタクト，および Si 基板への熱伝導経路上における熱抵抗を示したものである．まず，フィン領域における熱抵抗に着目すると，フーリエ則が MC 法から得られた結果と比較しておおよそ 0.5〜0.8 倍熱抵抗を過小評価していることがわかる．これは 3 章で述べた準弾道輸送効果の影響に起因したものである．薄膜領域においての熱伝導はフォノン-境界散乱

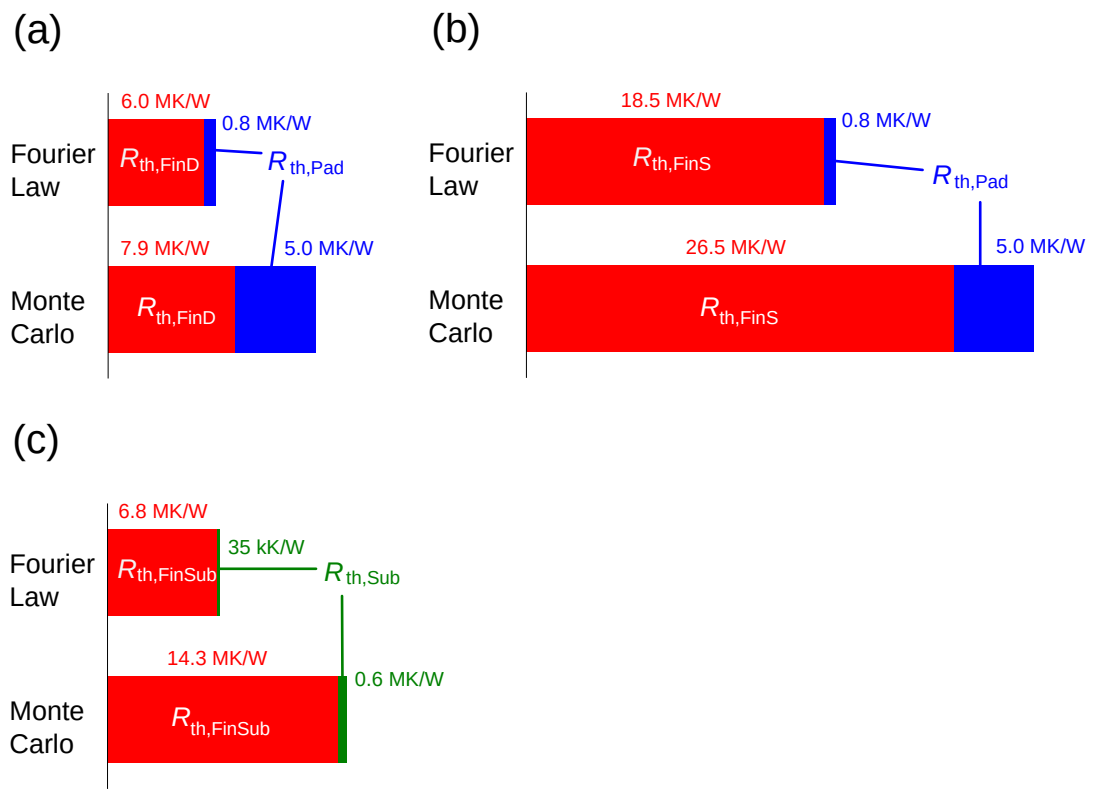

図 4.14: ホットスポットから (a) ドレイン，(b) ソースコンタクト，(c) 並びに Si 基板への熱伝導経路上における熱抵抗の算出値．表 4.2 の計算式より得た．

の影響で拡散的伝導性が強まるためフーリエ則での近似が有効となってくると予測されるが，これは熱伝導経路長がフォノン平均自由行程と比較して十分に長い場合である．図 3.20 の結果より，フーリエ則での近似が成立するのに必要な伝導距離は 100 nm 程度であることがわかる．そのため，本計算で用いた数 10 nm といったオーダーのデバイスでは準弾道輸送効果の影響による熱抵抗の増大が起こる．特に着目すべき点は同じ膜厚を持つフィン領域であっても，基板方向に対する熱抵抗にはフーリエ則と MC 法の差がより大きく現れており，これは先述のように **3.1** の図 3.2(b) で示したような熱源幅が狭くなることで弾道輸送効果が増大することに起因するものだと考えられる．

一方で，図 4.14(a)(b) のパッド部位，及び図 4.14(c) の Si 基板における熱抵抗に着目すると，フィン領域と比較してフーリエ則と MC 法から得られた熱抵抗の差がより大きく，1 桁オーダーの差が現れている．これは弾道輸送効果の影響がより強まるためであると考えられる．原因は次のように考えられる．弾道輸送効果の影響は，3 章で示したようにフォノン平均自由行程と輸送距離の兼ね合いで決まってくる．ホットスポットからフィン中を伝導してきたフォノンがパッドや基板領域に入射すると，フィン領域と比較してフォノンの平均自由行程が急激に増大する．さらにパッド部においてはフィン端からコンタクトまでの距離が非常に短いため，フォノン平均自由行程と比較して熱輸送距離が非常に小さくなる．そのため弾道輸送効果が特に強く現れ，フーリエ則が熱抵抗を過小評価しやすくなると考えられる．輸送距離 100 nm を想定した場合にいても，図 3.20 に示したように薄膜と比較して，バルク中の熱抵抗は特にフーリエ則との乖離が大きくなる傾向がある．加えて，このような経路断面積が急激に拡大する領域では，**3.1** の図 3.2(b) で述べたような熱源幅が狭くなることによる弾道輸送効果の増大と同様の現象が起こると考えられる．つまり，この場合ではフィン端から発せられる輻射フォノンがパッドや基板中の熱流を大きく抑制することが予測される．その効果は，図 4.10(b) に示したように特に Si 基板において強く現れていることがわかるが，一方で Si 基板領域は伝達経路の断面積が非常に大きいため，熱抵抗は他と比較してほぼ無視できるほど小さく，計算結果にほとんど影響を与えない．結果として，フィン-Si 基板間の伝導で現れ

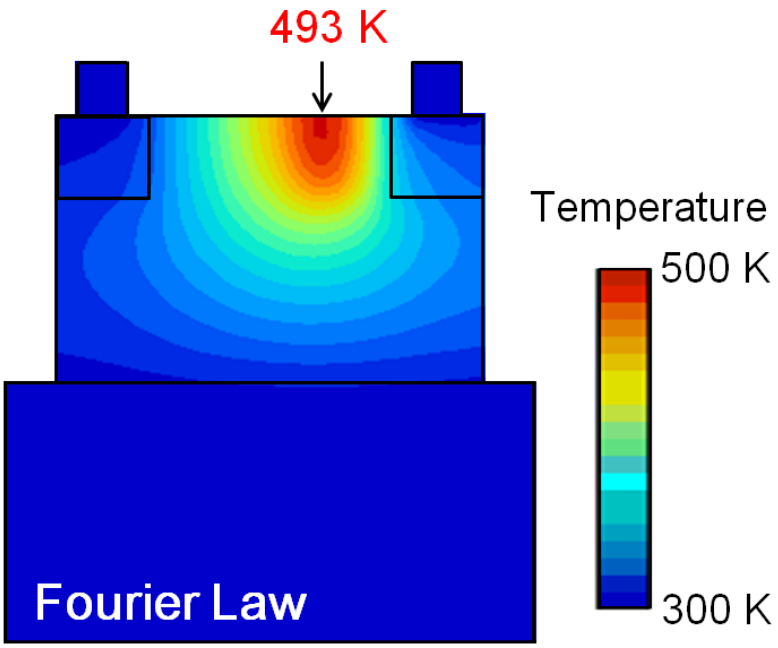

図 4.15: 熱伝導方程式 (フーリエ則) を用いて図 4.7 の MC 法の計算結果を再現した結果.

表 4.3: 図 4.15 のフーリエ則による計算で図 4.7 を再現するために用いた実効的な κ の値．それぞれフィン，パッド，Si 基板領域で想定した κ を示す．

	κ (Wm^{-1}K^{-1})
フィン	7.3
パッド	7.5
Si 基板	9.6

る準弾道輸送効果の影響は非常に軽微なものとなる．MC 法の計算結果は，フーリエ則で使用した熱伝導率の値を調整することで再現することができる．再現結果を図 4.15 に示す．この時，熱伝導方程式で使用した実効的な熱伝導率値を表 4.3 に示す．フィン部位に適用した熱伝導率の値はおおよそ 1/2 程度となっているが，パッド部位，および Si 基板に対しては 1/10 以下の値を使用しなければならない．過去のフーリエ則による解析では例えばパッドのような領域の熱伝導率を考慮する場合，その形状を伝導方向に対し無限に伸ばした構造から得られた実験値と同等であると想定し，使用されてきた．本研究の場合では膜厚 30 nm の薄膜 Si の熱伝導率がこれに相当する．しかし，今回のフーリエ則による再現で得られた実効的なパッドの熱伝導率に着目すると，30 nm 薄膜 Si の熱伝導率 [16](〜 30 WK^{-1}m^{-1}) と比較して約 1/4 倍となっていることがわかる．また，Si 基板に関してはバルク Si の熱伝導率と比較して約 1/14 倍であり，想定とは大きく異なることがわかる．したがってフーリエ則での解析において，本研究で用いたような複雑な素子構造を持つナノスケールデバイスに対し，部分的に既知の熱伝導率を使用することは，準弾道輸送効果により増大する熱抵抗を，大きく過小評価してしまうため注意が必要である．

4.2.4 今後の課題

本研究では，熱源からゲート酸化膜を通じてゲート電極へ捌ける熱ルートを考慮していない．そこで，ゲート電極への熱はけの影響力がどれほど存在するのか熱回路モデルを用いて検証した．図 4.16(a) に本計算で用いた等価熱回路モデルを示す．ここで，熱源からソースコンタクトへ向かう経路上における T_{Gate} をゲート電極下部のチャネル中心部の温度と定義し，図 4.16(b) に示すように $R_{\mathrm{th,FinS}}$ をゲート直下までの $R_{\mathrm{th,FinS1}}$ とゲート直下からの $R_{\mathrm{th,FinS2}}$ に分割した．それぞれの値は，図 4.7，図 4.8 で示した温度分布，並びに図 4.12 で示した熱流の値より算出したものを用いた．ゲート電極への熱はけを導入するにあたり，ゲート酸化膜の熱抵抗 $R_{\mathrm{SiO_2}}$，および，Si と酸化膜間の界面熱抵抗 R_{int} を考慮する必要がある．表 4.4 に $R_{\mathrm{SiO_2}}$，および R_{int} の算出式と値を示す．**4.2.1** で述べたように酸化膜の熱伝導率 $\kappa_{\mathrm{SiO_2}}$ は 1.38 Wm^{-1}K^{-1} であり Si の 100 分の 1 程度であるが，膜厚が nm オーダーであるため $R_{\mathrm{SiO_2}}$ は小さくなる．そのため，$R_{\mathrm{SiO_2}}$ の値はデバイス中の熱抵抗値 (図 4.14 参照) と比較して非常に小さい値であることがわかる．一方で，R_{int} に着目すると相対的に非常に大きい [17]．そのため，結果的に熱源からゲート電極へのルート上の熱抵抗は大きくなる．界面熱抵抗 R_{int} は Si 基板上に酸化膜を形成し，その上面に設置した金属の温度応答より得られる熱抵抗値の酸化膜厚依存性をプロットすることで求めることができる．その値は単位断面積あたりの量を $r_{\mathrm{th,int}}$ として，おおよそ経験的に 2 $\times 10^{-8} W\mathrm{m}^2\mathrm{K}^{-1}$ 程度であることが知られている [18]．この実験値を用いて表 4.4 の式より接地面積に相当する値を算出することで熱抵抗を得ることができる．この界面熱抵抗の生成要因として，Si 表面ラフネスによる酸化膜との接合面積の減少等が考えられてきたが [17]，現在のところ詳しい原因はわかっていない．

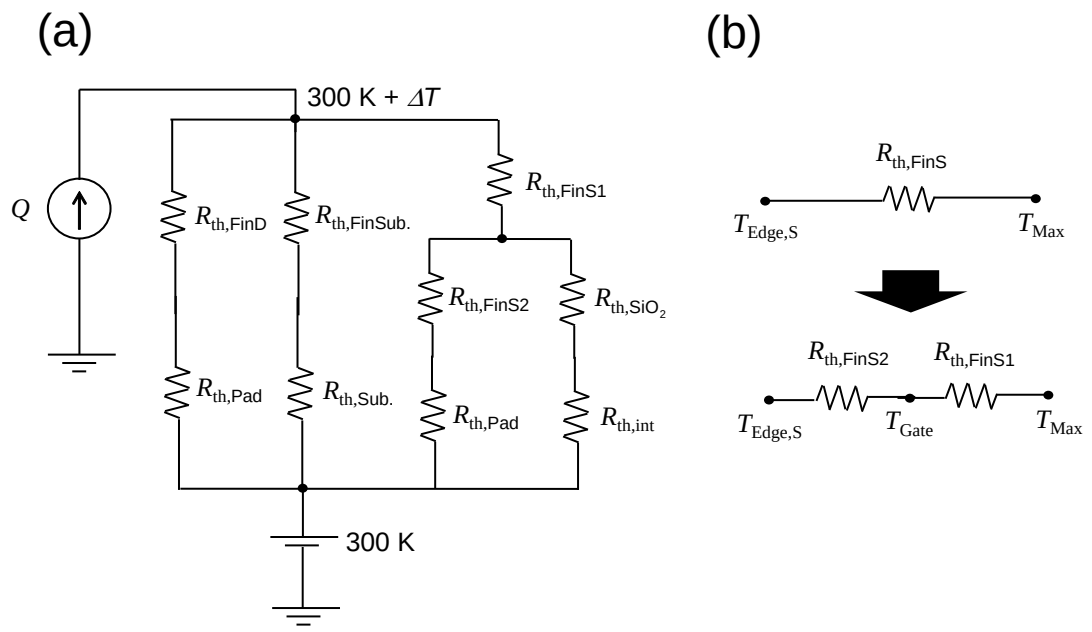

図 4.16: (a) ゲートへの熱はけを考慮した FinFET における等価熱回路モデル．(b)$R_{\mathrm{th,FinS}}$ の分割法.

図 4.17 に熱源からソース，ドレインコンタクト，基板，ゲート電極に対して熱が逃げる割合を等価熱回路モデルより計算した結果を示す．両者の計算結果はほぼ同等の割合を示しているが，MC 法では準弾道性に起因した熱抵抗増大がフィン端に顕在化する分，ドレイン，ソースコンタクト，並びに基板への熱流が抑制され，結果的にゲートへの熱逃げが相対的に大きくなる．しかし依然として，主となる熱経路は熱源からドレインコンタクト，並びに Si 基板へのルートであり，ゲートへの熱逃げは相対的に小さい．表 4.5 に FinFET 中における最高到達温度を等価熱回路モデルより見積もった値の比較を示す．両手法共に，ゲートへの熱パスを考慮しても最高到達温度に大きな変化は見られず，ゲート熱逃げの影響力が低いことを示唆している．しかし，本計算は MC 法から得られた結果から熱抵抗のみを抽出し，フーリエ則に立脚した等価熱回路モデルを用いて解析したものである．より正確な予測を行うためには厳密に MC シミュレータ上でゲートへの熱逃げを再現する必要がある．MC シミュレーション上で実現するためには，Si から酸化膜への界面熱抵抗の概念を新たに付加しなければならない．さらに，酸化膜等の異種材料中における伝導，また電極との界面熱抵抗等今後シミュレータの高精度化に向けて新たな機構の導入，およびその最適化が必要となってくる．

表 4.4: 酸化膜の熱抵抗 $R_{\mathrm{SiO_2}}$ と，界面熱抵抗 $R_{\mathrm{th,int}}$ の算出式と計算結果．ここで L_{Gate} はゲート長を示す.

$R_{\mathrm{SiO_2}} = t_{\mathrm{ox}}/(\kappa_{\mathrm{SiO_2}} W L_{\mathrm{Gate}})$	0.5 $\mathrm{MKW^{-1}}$
$R_{\mathrm{th,int}} = r_{\mathrm{th,int}}/(W \cdot L_{\mathrm{Gate}})$	13.4 $\mathrm{MKW^{-1}}$

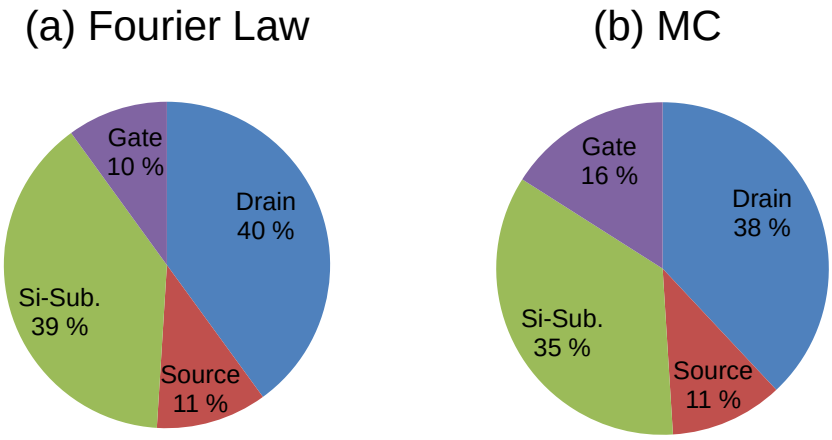

図 4.17: FinFET 等価熱回路モデルに基づいてホットスポットからドレイン，ソースコンタクト，Si 基板，ゲート電極への熱排出割合を計算した結果．(a) フーリエ則，(b)MC 法から得た結果を示す．

表 4.5: FinFET 中の最高到達温度 300 K + ΔT を図 4.16 の熱回路モデルより見積もった結果．フーリエ則，並びに MC 法の比較を示す．

Fourier Law	398 K (w/o Gate Heat Path)
	391 K (w/ Gate Heat Path)
Monte Carlo	493 K (w/o Gate Heat Path)
	480 K (w/ Gate Heat Path)

4.3 まとめ

MC 法による温度解析を現実的デバイス構造へと拡張した結果以下の知見を得ることができた.

- デバイス構造としてバルク FinFET 構造を想定し，温度特性解析を行いフーリエ則との比較を行った結果，MC 法の結果では格子温度の上昇がより顕著になることがわかった.
- フーリエ則と MC 法によるドレイン，ソースコンタクト，並びに基板への排出割合は同等の値を示すことがわかった.
- 温度分布から素子内部の熱抵抗値を見積もった結果，パッド部位，および Si 基板における熱抵抗において特に MC 法とフーリエ則の計算結果に差が現れる．フィン端のような熱経路断面積が拡張する領域ではフォノン平均自由行程が急激に増大するため，弾道輸送効果の影響が強まり，実効的な熱抵抗増大が特に顕著となる.
- ゲート酸化膜への排熱ルートを熱回路上で考慮した．その結果，ゲート電極への熱逃げの影響は比較的軽微であることがわかった.

参考文献

[1] E. Pop and K. E. Goodson, “ Heat Generation and Transport in Nanometer-Scale Transistors, ”Proceedings of the IEEE **94**, 1587 (2006).

[2] R. Wang, J. Zhunge, C. Liu. R. Huang. D. W. Kim, D. Park, and Y. Wang, “ Experimental Study on Quasi-Ballistic Transport in Silicon Nanowire Transistors and the Impact of Self-Heating Effects, ”IEDM Tech. Digest 2008, 31.3.

[3] C. Fiegna, Y. Yang, E. Sangiorgi, and A. G. O'Neill, “ Analysis of Self-Heating Effects in Ultrathin-Body SOI MOSFETs by Device Simulation, ”IEEE Trans. Electron Devices **55**, 233 (2008).

[4] T. Takahashi, N. Beppu, K. Chen, S. Oda, and K. Uchida,“ Thermal-Aware Device Design of Nanoscale Bulk/SOI FinFETs: Suppression of Operation Temperature and Its Variability, ” IEDM Tech. Digest 2011, 34.6.

[5] C. Auth, C. Allen, A. Blattner, D. Bergstrom, M. Brazier, M. Bost, M. Buehler, V. Chikarmane, T. Ghani, T. Glassman, R. Grover, W. Han, D. Hanken, M. Hattendorf, P. Hentges, R. Heussner, J. Hicks*, D. Ingerly, P. Jain, S. Jaloviar, R. James, D. Jones, J. Jopling, S. Joshi, C. Kenyon, H. Liu, R. McFadden, B. McIntyre, J. Neirynck, C. Parker, L. Pipes, I. Post, S. Pradhan, M. Prince, S. Ramey, T. Reynolds, J. Roesler, J. Sandford, J. Seiple, P. Smith, C. Thomas, D. Towner, T. Troeger, C. Weber, P. Yashar, K. Zawadzki, and K. Mistry, “ A 22nm High Performance and Low-Power CMOS Technology Featuring Fully-Depleted Tri-Gate Transistors, Self-Aligned Contacts and High Density MIM Capacitors, ” VLSI Tech. Digest 2012, 131.

[6] S. Sinha, E. Pop, R. W. Dutton, and K. E. Goodson,“ Non-equilibrium phonon distributions in sub-100 nm silicon transistors, ”Trans. of the ASME **128**, 638 (2006).

[7] E. Pop, K. Banerjee, P. Sverdrup, K. E. Goodson, “ Localized heating effects and scaling of sub-0.18 micron CMOS devices, ”IEDM Tech. Digest 2001, 31.1.

[8] S. Mazumder, and A. Majumdar, “ Monte Carlo Study of Phonon Transport in Solid Thin Films Including Dispersion and Polarization, ”ASME J. Heat Trans. **123**, 749 (2001).

[9] D. Lacroix, K. Joulain, and D. Lemonnier, “ Monte Carlo transient phonon transport in silicon and germanium at nanoscales, ”Phys. Rev. B **72**, 064305 (2005).

[10] A. Mittal, and S. Mazumder, “ Monte Carlo study of phonon heat conduction in silicon thin films including contributions of optical phonons, ”ASME J. Heat Trans. **132**, 052402 (2010).

[11] K. Kukita, I. N. Adisusilo, and Y. Kamakura, " Impact of quasi-ballistic phonon transport on thermal properties in nanoscale devices: A Monte Carlo approach, "IEDM Tech. Digest 2012, 17.5.

[12] J. -P. Colinge, *FinFETs and Other Multi-Gate Transistors* (Springer, Berlin, 2007).

[13] M. Shrivastava, M. Agrawal, S. Mahajan, H. Gossner, T. Schulz, D. K. Sharma, and V. R. Rao, " Physical Insight Toword Heat Transportand an improved Electrothermal Modeling Framework for FinFET Architectures "IEEE Trans. Electron Devices **59**, 1353 (2012).

[14] Y. Kamakura, N. Mori, K. Taniguchi, T. Zushi, and T. Watanabe, " Coupled Monte Carlo Simulation of Transient Electron-Phonon Transport in Nanoscale Devices, "Prof. SISPAD 2010, 89.

[15] M. Kaviany, *Essentials of Heat Transfer: Principles, Materials, and Applications* (Cambridge University Press, Cambridge, 2011).

[16] A. J. H. McGaughey, E. S. Landry, D. P. Sellan, and C. H. Amon, " Size-dependent model for thin film and nanowire thermal conductivity, "Appl. Phys. Lett. **99**, 131904 (2011).

[17] E. Pop, R. Dutton, and K. E. Goodson, " Thermal Analysis of Ultra-Thin Body Device Scaling, "IEDM Tech. Digest 2003, 36.6.

[18] T. Yamane, N. Nagai, S. Katayama, and M. Todoki, " Measurement of thermal conductivity of silicon dioxide thin films using a 3ω method, "J. Appl. Phys. **91**, 9772 (2002).

第5章　結論

本研究では，ナノスケールデバイス熱特性解析に威力を発揮する熱輸送シミュレーションとして MC 法に着目して，これら手法の高効率化，高精度化を行うと共に温度解析へと応用し，さらに現実的デバイス構造の熱伝導特性解析へと発展させた．その結果，従来の熱伝導解析手法における精度上の問題点を明確化することができ，さらに今後重要となるナノスケールデバイスにおける熱伝導の素過程について新たな知見を得ることができた．その具体的内容をまとめると以下のようになる．

1章　序論

本章では，近年のナノスケール MOSFET について説明し，熱伝導特性を知ることの重要性について述べた．さらに従来の代表的な熱伝搬解析手法を列挙し，モンテカルロ法が精度と実用性の兼ね合いからナノスケールデバイスに対応したツールとして優位である点を述べた．

2章　フォノン輸送解析のためのモンテカルロシミュレータの開発

本章では，フォノン分散関係に関する物理モデルや，熱伝導 MC シミュレータに導入したアルゴリズムに関する基本概念を解説すると共に，熱伝導計算に対し，高効率化をもたらす新規アルゴリズムの提案と検証，並びに分散関係を高精度化した結果について述べた．

- 従来の MC 法では長い棒形の構造を用い，有限温度差中の熱流を求めることで熱伝導率の計算を行っていたが，フォノン平均自由行程よりも十分に長い構造が必要であるため計算負荷が大きいことが欠点であった．本研究では，本研究では MC 粒子に対する重み付与を工夫することで，1 粒子法による熱伝導率の計算を可能とし，従来法と比較して計算時間を大幅に軽減することができた．
- 従来法には近似化したフォノン分散モデルが適用されていたため，輸送特性に対しパラメータ任意性が存在することが問題であった．その課題に対して，現実的フォノン分散関係を適用し，フォノン速度やエネルギー分布といった情報に対しての不確定性を取り除き，物理モデルの高精度化を図った．シミュレータを用いて薄膜 Si および Si ナノワイヤにおける熱伝導率の解析を行った結果，実験値を再現するためには拡散的な界面散乱を考慮する必要性があることがわかった．

3章　熱伝導に対する準弾道輸送効果の解析

本章では，開発した熱輸送 MC シミュレータを，単純 Si 構造中の温度分布解析へと応用し，微細構造中の熱輸送に関する基本特性を調べた結果について述べた．

- 半導体デバイス内部の温度解析はこれまで熱伝導方程式や熱回路等，フーリエ則に基づくものが主流であったが，フォノンの平均自由行程よりも小さな構造中では，その法則適用の前提条件が破綻するため，精度が疑問視される．本研究では，バルク Si 棒の両端に温度一定の熱浴を設けその長さを様々に変化させることで，拡散から弾道へと変化する熱伝導機構の遷移過程を調べた。その結果，デバイス長がフォノン平均自由行程 (∼100 nm) を下回ると熱伝導は弾道的特性を示し，フーリエ則が破綻することが明らかになった．

- また，微細構造の温度解析における分散モデルの精度について検証した．その結果，弾道輸送領域では，熱伝導特性は構造サイズやフォノン平均自由行程に依存せず分散から与えられる情報によって決定されるため，正確なシミュレーションに向けてフォノン分散モデルの精度が特に重要であることが示唆された．

4 章　ナノスケールデバイスの熱特性解析

本章では，熱輸送 MC シミュレータを現実的デバイス構造の熱特性解析へと応用した結果について述べた．

- 現実的なデバイス構造を考慮した温度解析には，現在でもフーリエ則に基づくシミュレータが広く用いられており，MC シミュレータの適用事例はこれまでほとんど報告されていなかったが，今回開発した熱輸送 MC シミュレータを用いれば，実際のデバイス構造中において，弾道輸送効果がどの程度重要となるのかを把握することができる．本研究では，解析対象としてバルク FinFET を取り上げ，その直流通電時の発熱特性を解析した．その結果，フーリエ則を用いた場合と比較して，MC 法はより高温のホットスポット出現を予測することがわかった．

- MC 法で得られた温度分布を分析したところ，熱経路の断面積が急激に拡張する領域では特に弾道輸送の影響が顕在化し，熱抵抗値が増大することがわかった．

シミュレータのさらなる発展に向けて

本論文を通して明らかになった課題を各章ごとに列挙する．

- 2 章における課題は，MC シミュレータによる 22 nm 直径を持つ Si ナノワイヤにおける熱伝導率の過大評価である．本研究では，シミュレータに導入した物理モデルがバルク Si におけるフォノン分散関係であることから，今後シミュレータのさらなる高精度化に向け，微細ワイヤ中で顕在化するフォノンの波動性の影響等を加味する必要があると考えられる．

- 3 章における課題は，弾道領域における計算精度である．デバイス構造を MC シミュレータ上で再現するに当たり，コンタクト電極を熱浴とした場合，デバイスの微細化に伴い，コンタクトからの輻射が熱流を律速する．そのため，厳密にはコンタクト材料のフォノン分散等の物理モデルの導入が必要となる．

- 4 章における課題は，ゲート電極への熱にげの影響である．本研究では，実験的に得られた界面熱抵抗を考慮し，フーリエ則に基づく熱回路モデルでその影響を見積もったが，厳密な評価を行うためには MC シミュレータに界面熱抵抗の概念を導入する必要がある．そのため，

Si から酸化膜への伝導，さらに酸化膜中における伝導，また電極との界面抵抗等，界面や異種材料中におけるフォノン伝導を今度シミュレータ上でモデル化する必要性がある．

付 録 A　フーリエの法則と熱伝導方程式

ここではフーリエの法則に基づく古典的な熱伝導方程式について述べる．

A.1　フーリエの法則

図 A.1 のように，系内で一様に温度 T_{h} を有す断面積 S，厚さ L の平板がある．今平板の右面を温度 T_{l} に一瞬で低下させて保持し，右面は T を保つようにすると，左面の高温側から右面の低温側へと熱が伝導する．この時，平板内部における温度は (ii)，(iii) に示すように時間経過と共に低下する (非定常状態) が，十分な時間が経つと，(iv) のように物体内の温度は変化しなくなる (定常状態)．この時，平板内に流入した熱の量だけ物体外に熱が流出した状態となるため，定常状態では構造内の熱は減少することも増加することもない．このように構造内の温度が局所的に異なり，高温から低温方向へ熱が温度勾配に沿って移動する現象を熱伝導と呼ぶ．図 A.1 のような温度勾配が x 方向にのみ存在する場合，熱経路単位断面積，単位時間当たりに通過する熱量，すなわち熱流束 q は温度勾配 dT/dx に比例し，次式で表される．

$$q = -\kappa \frac{dT}{dx} \tag{A.1}$$

この関係はフーリエの法則と呼ばれる．比例定数 κ は単位温度勾配，単位断面積，単位時間あたりに伝導する熱量を表したものであり，熱伝導率と呼ばれる．これは物質の種類と温度，圧力等といった状態によって決定される物性値であり，値が大きいほど熱が伝達しやすい事を示している．

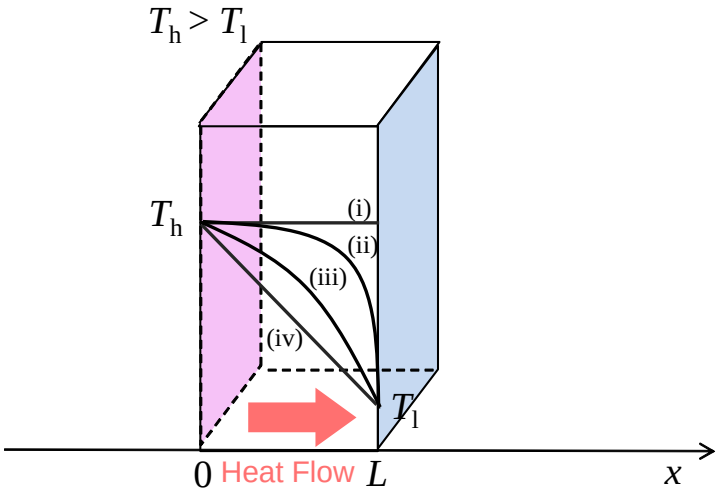

図 A.1: 平板内における温度変化.

A.2　熱伝導方程式の導出

熱伝導方程式は，フーリエの法則を用いて熱伝搬構造中における微小体積への熱収支を考慮することにより導出される．以下図 A.2 のように，構造内部に対し辺の長さ dx,dy,dz を有す微小六面体の体積要素を仮定する [1].

A 面 (面積 $dy \times dz$) に対し，単位時間当たり流入する熱量 q_x はフーリエの法則から

$$q_x = -\kappa \frac{\partial T}{\partial x} dydz \tag{A.2}$$

を用いて求められる．また B 面 (面積 $dy \times dz$) から流出する熱量 q_{x+dx} は次式のようになる．

$$\begin{aligned} q_{x+dx} &= q_x + \frac{\partial q_x}{\partial x} dx \\ &= -\kappa \frac{\partial T}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x}\left(\kappa \frac{\partial T}{\partial x}\right) dxdydz \end{aligned} \tag{A.3}$$

式 (A.2) と式 (A.3) との差から流入熱量から流出熱量を差し引いた熱量が得られ，

$$q_x - q_{x+dx} = \frac{\partial}{\partial x}\left(\kappa \frac{\partial T}{\partial x}\right) dxdydz \tag{A.4}$$

となる．同様に y 方向、z 方向における流入，流出熱量差はそれぞれ，

$$q_y - q_{y+dy} = \frac{\partial}{\partial y}\left(\kappa \frac{\partial T}{\partial y}\right) dxdydz \tag{A.5}$$

$$q_z - q_{z+dz} = \frac{\partial}{\partial z}\left(\kappa \frac{\partial T}{\partial z}\right) dxdydz \tag{A.6}$$

となる．

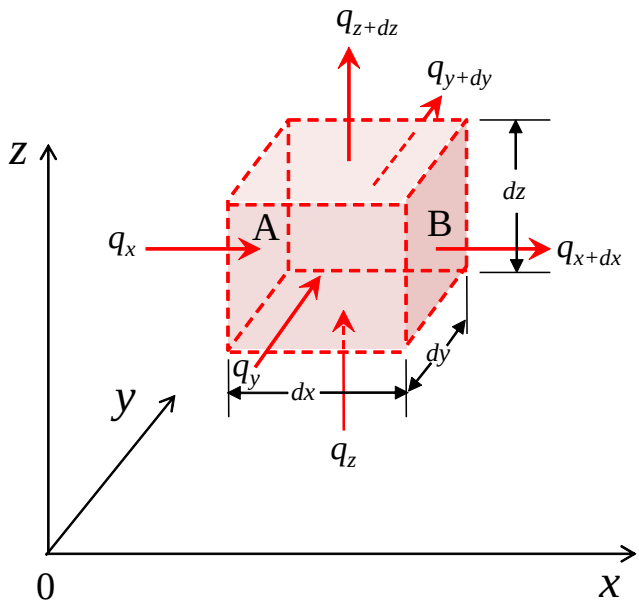

図 A.2: 物体内の微小直六面体.

式 (A.4)〜(A.6) より微小六面体に対する全流入熱量と全流出熱量との差 Δq_1 が得られる．

$$\begin{aligned}\Delta q_1 &= (q_x + q_y + q_z) - (q_{x+dx} + q_{y+dy} + q_{z+dz}) \\ &= \left[\frac{\partial}{\partial x}\left(\kappa\frac{\partial T}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(\kappa\frac{\partial T}{\partial y}\right)\frac{\partial}{\partial z}\left(\kappa\frac{\partial T}{\partial z}\right)\right] dxdydz \end{aligned} \tag{A.7}$$

一方で，この微小体積要素が時間 dt に dT だけ温度上昇するのに必要な単位時間当たりの熱量 Δq_2 は次式で示される．

$$\Delta q_2 = C_V \frac{\partial T}{\partial t} dxdydz \tag{A.8}$$

ここに、C_V は単位体積あたりの比熱を示す．ΔQ_1 と ΔQ_2 は等しい熱量を示すので，式 (A.7) と式 (A.8) より，

$$C_V \frac{\partial T}{\partial t} dxdydz = \left[\frac{\partial}{\partial x}\left(\kappa\frac{\partial T}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(\kappa\frac{\partial T}{\partial y}\right)\frac{\partial}{\partial z}\left(\kappa\frac{\partial T}{\partial z}\right)\right] dxdydz \tag{A.9}$$

したがって

$$C_V \frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}\left(\kappa\frac{\partial T}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(\kappa\frac{\partial T}{\partial y}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(\kappa\frac{\partial T}{\partial z}\right) \tag{A.10}$$

ここで熱伝導率が温度により変わらないと仮定すると上式は次のようになる．

$$C_V \frac{\partial T}{\partial t} = \kappa\left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2}\right) \tag{A.11}$$

すなわち，熱伝導方程式

$$C_V \frac{\partial T}{\partial t} = \kappa \nabla^2 T \tag{A.12}$$

が得られる．

ここで構造内部に熱源が存在すると想定し，その熱生成率を Q と仮定する．微小六面体内部に単位時間当たりに発生する熱量を Δq_3 とすると，

$$\Delta q_3 = Q \cdot dxdydz \tag{A.13}$$

となる．この時，$\Delta q_2 = \Delta q_1 + \Delta q_3$ が成立するので，式 (A.7)，式 (A.8)，及び式 (A.13) より以下に示す熱伝導方程式 [2] が導出される．

$$C_V \frac{\partial T}{\partial t} = \kappa \nabla^2 T + Q \tag{A.14}$$

参考文献

[1] T. L. Bergman, A. S. Lavine, F. P. Incropera, and D. P. DeWitt, *Fundamentals of Heat and Mass Transfer* (Wiley, Hoboken, 2011).

[2] 平田 哲夫，田中 誠，石川 正昭，羽田 喜昭，“ 例題でわかる伝熱工学，”(森北出版株式会社，東京, 2005).

付 録B　シミュレーションフロー

本研究で用いた MC シミュレータの実行手順について説明する．図 B.1 にシミュレーションの手順を示す [1,2]．シミュレータではまず物理系の定義，及びシミュレーションパラメータの入力を行う．具体的には **2.2.2** で述べたフォノン状態密度や群速度の定義，および **2.3.2** で述べた散乱確率式のパラメータやシミュレーション構造，並びに構造内部の初期温度分布の設定を行う．温度分布に従い，1〜N^* 番までラベリングした全ての MC 粒子に対し，フォノン周波数 ω，分枝 p，運動ベクトル $\mathbf{u}$，及び位置座標 $\mathbf{r}$ といった初期状態を決定し，シミュレーション時間 t には 0 を代入する．その後，適用される各種散乱確率のモデル式を決定する．

まず，粒子番号 1 を選択し，式 (2.19) により自由走行後の位置座標 $\mathbf{r}(t+\Delta t)$ を求める．その後，シミュレーション境界を通過したか否かでフォノン-境界散乱 B(**2.3.2** 参照) の有無を判定する．フォノン-境界散乱 B が起きた場合，境界における鏡面性の度合いで鏡面反射か拡散反射を決定する．例えば境界の鏡面性の度合いが S % であった場合，$[1,0]$ の一様乱数 R_{Spec} を用いて，

$$\frac{S}{100} > R_{\mathrm{Spec}} \tag{B.1}$$

が成立する時は鏡面反射，その他の場合は拡散反射による $\mathbf{r}$ および $\mathbf{u}$ の終状態選択を行う．鏡面反射に対しては例えば，z 方向に対する境界を MC の粒子が通過した場合，次のような座標更新を施すことで実行する [3]．

$$(x,y,z) \to (x,y,2L_z - z) \tag{B.2}$$

ここで，$z = L_z$ を境界面と定義し，計算時間ステップ Δt 前に領域 $z < L_z$ に存在した MC 粒子が座標更新により領域外 $z > L_z$ に飛び出た場合を想定している．境界面が $x = L_x$，$y = L_y$ の場合も同様の座標更新を行う．拡散反射の場合の座標更新は **2.4.2** にて述べたランバート則に従う $\mathbf{r}$ および $\mathbf{u}$ を再決定する．次に $[1,0]$ の一様乱数 R_{Scat} を用い，まずフォノン-フォノン散乱確率 P_{U} と比較し，

$$R_{\mathrm{Scat}} < P_{\mathrm{U}} \tag{B.3}$$

が成立する時，フォノン-フォノン散乱を実行し，式 (2.21) に従うフォノン周波数 ω，式 (2.11) に従う運動ベクトル $\mathbf{u}$ の再決定を行う．もし式 (B.3) が成立せず，かつ

$$R_{\mathrm{Scat}} < P_{\mathrm{U}} + P_{\mathrm{d}} \tag{B.4}$$

が成立する場合はフォノン-欠陥散乱を実行し，式 (2.11) による $\mathbf{u}$ の再決定のみを行う．さらにもし式 (B.4) が成立せず，かつ

$$R_{\mathrm{Scat}} < P_{\mathrm{U}} + P_{\mathrm{d}} + P_{\mathrm{b}} \tag{B.5}$$

が成立する場合はフォノン-境界散乱 A を実行し，欠陥散乱の時と同様の $\mathbf{u}$ 決定を実行する．この自由走行，散乱の過程を全ての MC 粒子に対して実行する ($i = N^*$) まで繰り返す．これが計算時間ステップ Δt 間における流れである．$i = N^*$ となった後は，エネルギー密度分布 $u(x,y,z)$ の集計を行い，**3.2.1** で述べた手法より構造内部における温度分布 $T(x,y,z)$ を算出する．この時，$T(x,y,z)$ に時間的変動が見られれば，計算時間を $t+\Delta t$ とし，散乱確率のモデル式に対し $T(x,y,z)$ をフィ

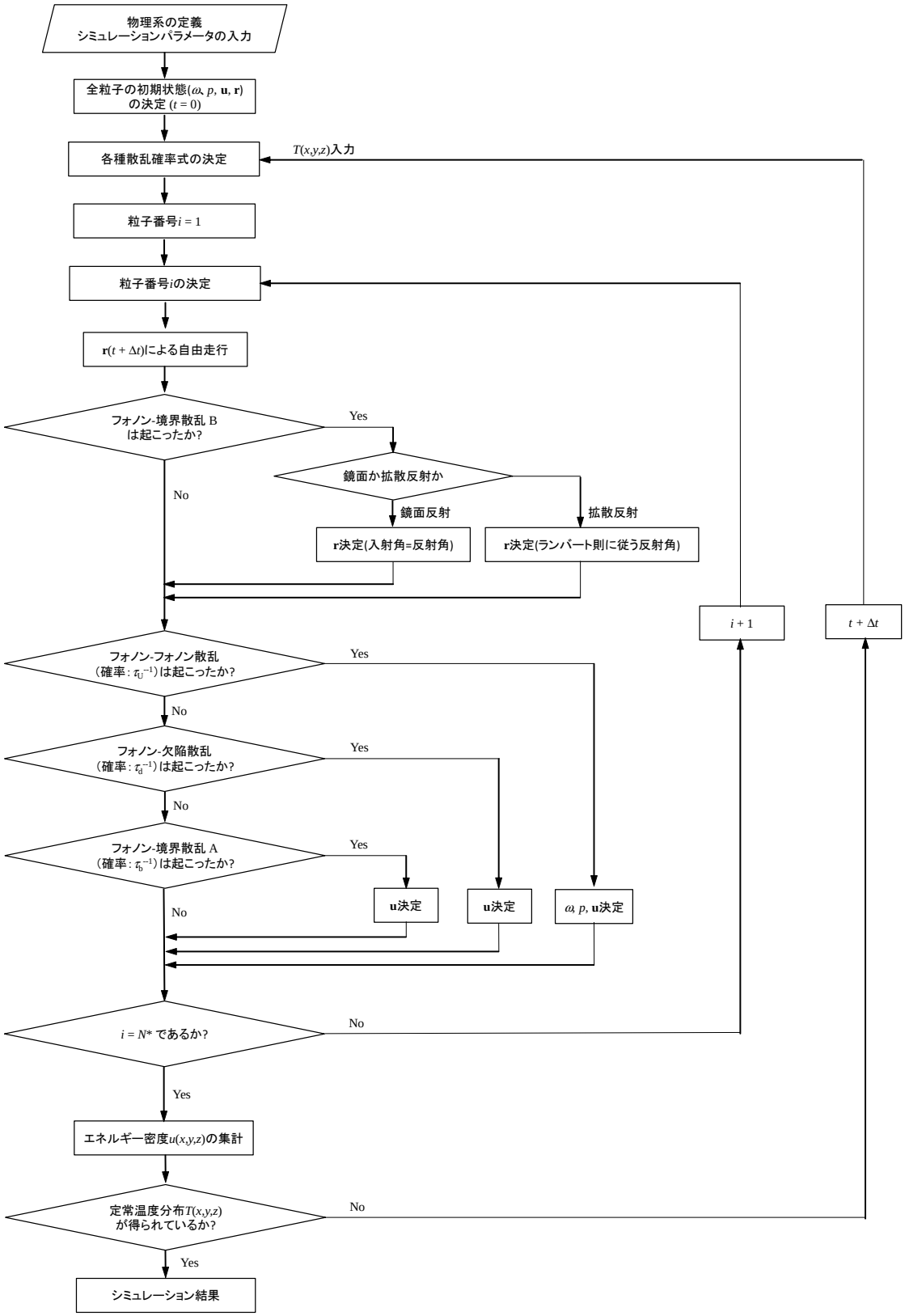

図 B.1: フォノン輸送 MC シミュレーションのフローチャート.

ードバックする．この過程を $T(x, y, z)$ が変動しなくなるまで繰り返すことでシミュレーション構造における定常温度分布を得ることが出来る．

参考文献

[1] C. Jacoboni and P. Lugli, *The Monte Carlo Method for Semiconductor Device Simulation* (Springer, Berlin, 1989).

[2] 津田孝夫, “ モンテカルロ法とシミュレーション -電子計算機の確率的応用-, ”(培風館, 東京, 1971).

[3] 鎌倉良成, “ モンテカルロ法による半導体中のキャリア輸送シミュレーションに関する研究, ” 大阪大学大学院研究科電子情報エネルギー工学専攻，博士課程学位論文，(2003).

謝辞

本論文は，大阪大学大学院工学研究科電気電子情報工学専攻　鎌倉良成准教授の御指導の下，筆者が同専攻博士後期課程在籍中に得た研究成果をまとめたものです．鎌倉准教授には終始懇切丁寧な御指導と有益な御助言を賜わりました．ここに謹んで深謝の意を表します．

本論文の作成にあたり，大阪大学大学院工学研究科　伊藤利道教授，大阪大学大学院工学研究科　森田瑞穂教授，大阪大学サイバーメディアセンター　小田中紳二教授，大阪大学大学院工学研究科　森伸也准教授には有意義な御助言と御指導を頂き，本論文の質を大きく高めることが出来ました．ここに深く御礼申し上げます．

本論文に対して御検討，御教示頂きました大阪大学大学院工学研究科　森勇介教授，片山光浩教授，尾崎雅則教授，栖原敏明教授，近藤正彦教授，大森裕教授，八木哲也教授に深く感謝の意を表します．

筆者が本研究に携わる機会を下さり，丁寧なる御指導と有意義な御助言を賜わりました大阪大学大学院工学研究科谷口研二名誉教授（現奈良工業高等専門学校校長）に厚く感謝の意と御礼申し上げます．

本研究を遂行するにあたり，様々な御指導を頂いた大阪大学大学院工学研究科　松岡俊匡准教授，白川仁特任教授，河崎達夫招聘教授に深く感謝致します．

本研究を遂行するにあたって，電子-フォノン統合デバイスシミュレータ開発に向け，有意義な議論をして頂きました慶応義塾大学大学院理工学研究科　植松真司教授，神戸大学大学院工学研究科　土屋英昭准教授，立命館大学理工学研究科　宇野重康准教授，ミリニコフゲナディ博士，三成英樹博士（現ソニー），立命館大学　服部淳一博士，神戸大学　木場隼介氏，山本将央氏（現ダイキン工業），高橋浩樹氏（現パナソニック），中村健志氏，クレンデネン啓示氏に深く御礼申し上げます．

本研究を進めるにあたって，分子動力学法における熱伝導解析に関して多くの御助言を頂きました早稲田大学理工学術院　渡邉孝信教授，早稲田大学　神岡武文博士，早稲田大学　図師知文氏に深く感謝致します．

本研究の過程にあたり，活発な議論をして頂いた慶応義塾大学理工学部電子工学科　内田建教授，大阪大学産業科学研究所　柳田剛准教授，大阪大学大学院基礎工学研究科　中村芳明准教授，静岡大学大学院工学研究科　池田浩也准教授，愛媛大学大学院理工学研究科 石川史太郎准教授，大阪大学大学院工学研究科　森藤正人助教，ルネサスエレクトロニクス　竹田裕博士，慶応義塾大学　高橋綱己博士，静岡大学　ファイズ サレ氏に深く感謝致します．

本研究を遂行するにあたり，同じ研究グループとして有意義な議論をしていただいた山内祥充氏，桐原正治氏，岸田悠治氏（現パナソニック），三田拓司氏（現総務省近畿総合通信局），中野慎介氏（現日本電信電話），林淳一氏（現京阪電気鉄道），田口翔一氏，太田俊史氏（現関西電力），大見剛史氏（現川崎重工業），井鷺洋介氏（現呉市），平松佑己氏（現パナソニック），渡辺龍太氏（現ローム），インドラヌルアディスシロ氏，脇村豪氏に感謝致します．

研究室内での活動を行う際に，様々なご協力をいただいた鎌田隆嗣博士，Jo Ikkyun 氏，崔冀氏，Bae Jungnam 氏，Radhapuram SAI CHANDRA TEJA 氏，岩崎紘介氏，大原賢治氏，出井良明

氏，平井雄作氏，浅野智大氏，山根梨江氏に感謝致します．そして，研究を事務的な面で支援していただいた古田典子元秘書，清水友子元秘書，岩原加代子秘書に感謝致します．

最後に筆者が本研究を遂行するにあたり終始支援して下さり，激励を頂いた祖父，祖母，父，母，弟に心より深く感謝の意を表します．

研究業績

論文

1. **K. Kukita** and Y. Kamakura, “ Monte Carlo simulation of phonon transport in silicon including a realistic dispersion relation, ”J. Appl. Phys. **114**, 154312-1-8 (2013).

2. **K. Kukita**, I. N. Adisusilo, and Y. Kamakura, “ Monte Carlo Simulation of Thermal Conduction in Silicon Nanowires Including Realistic Phonon Dispersion Relation, ”Jpn. J. Appl. Phys. **53**, 015001-1-5 (2014).

3. **K. Kukita**, I. N. Adisusilo, and Y. Kamakura, “ Monte Carlo simulation of diffusive-to-ballistic transition in phonon transport, ”J. Comput. Electr. publised online. DOI:10.1007/s10825-013-0511-6

国際会議

1. T. Zushi, **K. Kukita**, Y. Kamakura, K. Taniguchi, I. Ohdomari, and T. Watanabe, “ Simulation on the heat transport in a silicon nano-structure covered with oxide films,” 2009 International Conference on Solid State Devices and Materials (SSDM 2009), Sendai, Japan, Oct. 7-9, 2009.

2. Y. Kamakura, H. Minari, T. Zushi, T. Watanabe, G. Mil’nikov, **K. Kukita**, S. Uno, and N. Mori, “ (Invited) Computational Simulation of Electron and Phonon Transport in Nanoscale Si Structures, ” Fourth International Symposium on Atomically Controlled Fabrication Technology, Osaka, Japan, Oct. 31-Nov. 2, 2011.

3. **K. Kukita**, and Y. Kamakura, “ Monte Carlo Simulation of Transient Phonon Transport in Silicon Nanostructures, ” 15th International Conference on Thin Films 2011 (ICTF-15), Kyoto, Japan, Nov. 8-11, 2011.

4. **K. Kukita**, and Y. Kamakura, “ Monte Carlo simulation of transient phonon transport in silicon nanostructures, ” International Symposium on Materials Science and innovation for Sustainable Society Eco-materials and Eco-innovation for Global Sustainability (ECO-MATES 2011), Osaka, Japan, Nov. 28-30, 2011.

5. N. Mori, **K. Kukita**, T. Kitayama, H. Minari, G. V. Mil’nikov, Y. Kamakura, S. Uno, K. Kodama, and M. Kuzuhara, “ Multiscale Simulation for Electronic Devices Innovation, ” The 3rd Global COE International Symposium on Electronic Devices Innovation, Osaka, Japan, Dec. 16-17, 2011.

6. **K. Kukita**, and Y. Kamakura, “ Monte Carlo Simulation of Phonon Transport in Silicon Thin films Including Realistic Dispersion Relation, ” 15th International Workshop on Computational Electronics (IWCE 2012), Madison, USA, May 22-25, 2012.

7. **K. Kukita**, I. N. Adisusilo, and Y. Kamakura, “ Impact of Quasi-Ballistic Phonon Transport on Thermal Properties in Nanoscale Device: A Monte Carlo Approach, ” 2012 International Electron Devices Meeting (IEDM 2012), San Francisco, USA, Dec. 10-12, 2012.

8. **K. Kukita**, I. N. Adisusilo, and Y. Kamakura, “ Influence of Phonon Dispersion Relation on Thermal Resistance in Silicon Nanostructures, ” 16th International Workshop on Computational Electronics (IWCE 2013), Nara, Japan, June 4-7, 2013.

9. I. N. Adisusilo, **K. Kukita**, and Y. Kamakura, “ Monte Carlo Simulation of Seebeck Coefficient of Si Nanostructure, ”The 2013 International Meeting for Future of Electron Devices (IMFEDK 2013), Osaka, Japan, June 5-6, 2013.

10. Y. Kamakura, **K. Kukita**, I. N. Adisusilo, S, Koba, and H. Tsuchiya, “ (Invited) Simulation Study on Quasi-Ballistic Heat Transfer Effect in FinFETs, ” 2013 International Conference on Solid State Devices and Materials (SSDM 2013), Fukuoka, Japan, Sept. 24-27, 2013.

11. **K. Kukita**, I. N. Adisusilo, and Y. Kamakura, “ Monte Carlo Simulation of Phonon Transport in Silicon Nanowires Including Realistic Dispersion Relation, ” 2013 International Conference on Solid State Devices and Materials (SSDM 2013), Fukuoka, Japan, Sept. 24-27, 2013.

学会発表

1. **久木田健太郎**，鎌倉良成，図師知文，渡邉孝信，大泊巌，谷口研二, “ Si ナノデバィス中の電子および熱輸送に関するモンテカルロシミュレーション, ” 第 56 回春季応用物理学関連連合講演会，筑波大学，茨城県，2009 年 3 月.

2. 図師知文，渡邉孝信，**久木田健太郎**，鎌倉良成，谷口研二，大泊巌, “ 酸化膜に覆われたシリコンナノ構造中の熱輸送シミュレーション, ” 第 56 回春季応用物理学関連連合講演会，筑波大学，茨城県，2009 年 3 月.

3. **久木田健太郎**，鎌倉良成, “ モンテカルロ法による Si ナノ構造中のフォノン伝導過渡応答特性解析, ” 秋季第 72 回応用物理学会学術講演会，山形大学，山形県，2011 年 9 月.

4. **久木田健太郎**， 鎌倉良成, “ フルバンドモンテカルロ法による Si 薄膜中のフォノン輸送特性解析, ” 第 59 回春季応用物理学関連連合講演会，早稲田大学，東京都，2012 年 3 月.

5. **久木田健太郎**，インドラ ヌル アディスシロ，鎌倉良成, “ フォノン準弾道輸送効果が FinFET の熱伝導特性に与える影響, ” 第 60 回春季応用物理学関連連合講演会，神奈川工科大学，神奈川県，2013 年 3 月.

6. インドラ ヌル アディスシロ，**久木田健太郎**，鎌倉良成,“ モンテカルロ法による n 型 Si のゼーベック係数の算出, ” 第 60 回春季応用物理学関連連合講演会，神奈川工科大学，神奈川県，2013 年 3 月.

7. 鎌倉良成，インドラ ヌル アディスシロ，**久木田健太郎**,“ 高濃度ドープ Si のゼーベック係数の計算, ” 第 60 回応用物理学会春季学術講演会, 神奈川工科大学，神奈川県，2013 年 3 月.

8. Indra Nur Adisusilo，**久木田健太郎**，鎌倉良成,“ Monte Carlo Simulation of Seebeck Coefficient of Si Nanostructure with Barrier Layers, ” 第 74 回応用物理学会秋季学術講演会，同志社大学，京都府，2013 年 9 月.

研究会

1. **久木田健太郎**， 鎌倉良成,“ モンテカルロ法による Si ナノ構造中のフォノン輸送シミュレーション, ” 電気情報通信学会　シリコン材料・デバイス (SDM) 研究会，機械振興会館，東京都，2011 年 11 月.

2. **久木田健太郎**，鎌倉良成,“ モンテカルロ法による Si ナノ構造中のフォノン輸送解析, ” ゲートスタック研究会-材料・プロセス・評価の物理-第 17 回研究会，東レ総合研修センター，静岡県，2012 年 1 月.

3. **久木田健太郎**， 鎌倉良成,“ 現実的分散モデルを用いた Si 薄膜中のフォノン輸送モンテカルロ・シミュレーション, ” 電気情報通信学会　シリコン材料・デバイス (SDM) 研究会，機械振興会館，東京都，2012 年 11 月.

4. 鎌倉良成, **久木田健太郎**, Indra Nur Adisusilo,“ (招待講演) ナノスケールデバイスの自己発熱と熱輸送に関するシミュレーション解析, ” 電気学会 ナノエレクトロニクス集積化・応用技術調査専門委員会「ナノデバイスの熱管理工学」, 早稲田大学, 東京都, 2012 年 11 月 30 日.

5. **久木田健太郎**， インドラ ヌル アディスシロ， 鎌倉良成,“ フォノン準弾道輸送効果がナノスケールデバイスの熱伝導特性に与える影響, ” ゲートスタック研究会-材料・プロセス・評価の物理-第 18 回研究会，ニューウェルシティ湯河原，静岡県，2013 年 1 月.

6. インドラ ヌル アディスシロ，**久木田健太郎**，鎌倉良成,“ モンテカルロ法を用いた Si ナノ構造の熱電変換性能に関する解析, ” 電気情報通信学会　シリコン材料・デバイス (SDM) 研究会，機械振興会館，東京都，2013 年 11 月.

7. インドラ ヌル アディスシロ，**久木田健太郎**，鎌倉良成,“ Si ナノ構造の熱電変換性能に関するシミュレーション解析, ” ゲートスタック研究会-材料・プロセス・評価の物理-第 19 回研究会，ニューウェルシティ湯河原，静岡県，2014 年 1 月.

8. **久木田健太郎**，インドラ ヌル アディスシロ，鎌倉良成,“ モンテカルロ法によるシリコンナノワイヤのフォノン輸送シミュレーション, ” ゲートスタック研究会-材料・プロセス・評価の物理-第 19 回研究会，ニューウェルシティ湯河原，静岡県，2014 年 1 月.

受賞

1. Student Travel Award (15th International Workshop on Computational Electronics, IWCE 2012), Madison, USA, May, 2012.
2. 安田賞 (ゲートスタック研究会-材料・プロセス・評価の物理-第 18 回研究会), ニューウェルシティ湯河原，静岡県，2013 年 1 月 25 日.
3. IEEE Electron Devices Society (EDS) Japan Chapter Student Award, 東京大学, 東京都, 2013 年 2 月 4 日.