

IMa SS NEWS

Institute of Materials and Systems
for Sustainability
Nagoya University

Vol. 17
Aug. 2024

IMaSS NEWS Vol.17 Interview

マルチフィジックスシミュレーション部

数値計算で物の理を予言する

コンピューター上で仮想実験



Greeting

新所長・新副所長 ご挨拶

IMaSS YouTube channel

研究紹介動画《IMaSS未来予想図》

History

半導体の歴史+α



表紙写真説明

C-TECs 7階に設置の計算機システム。高性能コンピュータが並ぶ。パネルを操作しているのは洗平助教。

Contents

- 03 [特集] 研究グループインタビュー
数値計算で物の理を予言する
コンピューター上で仮想実験
- 09 研究報告
- 13 活動報告
- 13 ちょっと一息
IMaSS YouTube チャンネル紹介
- 14 新所長・新副所長 ご挨拶
- 15 新任教員・新任職員 ご挨拶
- 18 科学研究費補助金
- 19 受賞一覧
- 20 基礎知識
半導体の歴史+α

IMaSS 概要

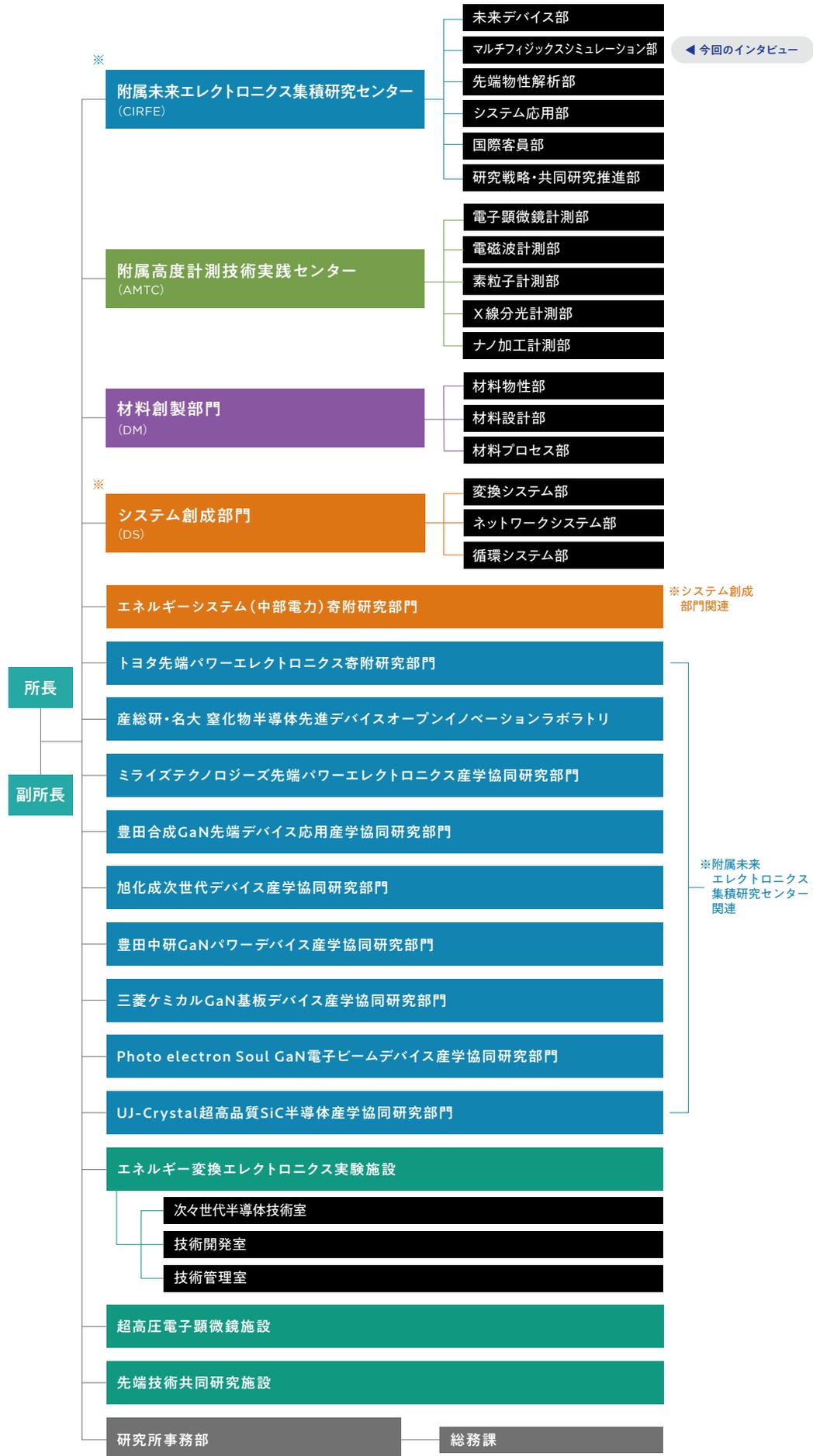
未来材料・システム研究所 (IMaSS) は、未来社会で革新的な省エネルギーを実現させるため、先端的な材料・デバイスそのものの根幹をなす要素技術に関する基礎研究から、それらを社会実装するための高度なエネルギー変換技術・システム、環境負荷低減技術、エネルギーインフラの制御技術等のシステム構築に至る、幅広い研究課題を一貫連鎖する研究拠点として、平成27年10月に前身のエコトピア科学研究所から改組する形で誕生しました。

また、若手研究者の育成、産業界との共同研究も活発に行っています。



<https://www.imass.nagoya-u.ac.jp>

IMaSS Organization Chart



ことわり 数値計算で物の理を予言する コンピューター上で仮想実験

「運動方程式」と言えばニュートンの $F=ma$ (力=質量×加速度) を思い浮かべる方も多いと思いますが、この法則、現在は「古典力学」と呼ばれており、原子や電子といった微小なものの世界では「量子力学」の計算が不可欠となっています。

白石研究室では、原子や分子の並びや結晶が成長する道筋、結合の強さ、電子の動き方、速さ、連なり方、温度などの状況(条件)などを深く考え、量子力学の方程式に基づき、コンピューターを使って解を導き出すといった研究をしています。これにより、未知のミクロな現象の発見や新しい物理現象の予測(予言)が可能になります。また、より良い実験結果を導くために必要なプロセス(条件の変更)を提案する研究や、流れなどマクロな現象の研究も進めています。

今回は、実験研究の指針決定に理論研究で寄与し、時には思い込みを覆したり、常識を打ち破るような功績を残している白石研究室のみなさんにお話を伺いました。

〈インタビュー／2024. 6. 4 - 6. 10 IMaSS 広報委員会〉



白石研究室のみなさん

未来材料・システム研究所附属未来エレクトロニクス集積研究センター マルチフィジックスシミュレーション部

◎フロンティア計算物質科学研究グループ 代表/白石 賢二 教授

◎コンピュータシミュレーション物質科学研究グループ 代表/押山 淳 特任教授

人数/22人(教授:1 特任教授:1 准教授:1 助教:1 特任助教:1 研究員:2, 2 秘書:2, 1 D2:2 M2:5 B4:3)

白石 賢二 教授 (フロンティア計算物質科学研究グループ)

量子力学の考えに基づき コンピュータを使って予測

— 研究グループ名「フロンティア計算物質科学」ですが、みなさん共通の研究ですか？

「最先端の計算を使って導き出す」ということは共通していますが、それぞれに全く別の研究をしています。時々、共同で研究することもあるという人もいます。

未来エレクトロニクス集積研究センター (CIRFE / センター長 天野 浩教授) の中では、GaN (窒化ガリウム) のデバイスの劣化や動かなくなる原因、そのメカニズムを実験とほぼ同じモデルを計算機の中で作ってその対処法の提言をしています。例えば「GaN/酸化物界面の酸素の欠損はホールトラップになるので、それを消すにはマグネシウムと一緒に入れるといい」といったことを理論的に提案するんです。

— 「振動発電素子 (デバイス) の微視的な仕組みを解明」というプレスリリースをされましたね。

私には、世の中に大きく貢献したと自負している研究成果が4つあるんですが、これはその1つ。微小な振動により発電するという、SiO₂を使った電力を自給自足するデバイスなのですが、負の電荷がどう溜まるのかというメカニズムを量子力学により解明し、信頼性が一層上がるプロセスを予言したんですね。そして、実験したら予言通り信頼性が向上することが確認され、今年 (2024年) ある企業から製品化されました。

例えば高速道路の橋に亀裂が入っていないかのチェックに使用。車が通る振動で発電するので、ちょっとしたカメラと照明なら十分な発電量なんです。電池の交換は半永久的

に不要ですし、他にも水道管の中とかね、用途はたくさん考えられます。

役立つ研究が商品開発につながり 量産化

— 夢が現実になったと言えるようなデバイスですね。他にもまだ世の中に貢献している研究成果があるのでしょうか。

はい。USBメモリなどで知られるフラッシュメモリ、最近ではSiNを用いたものが使われていますが、SiNのフラッシュメモリは最初は車に載ったんですよ、2009年に。これも当初は、閾値^{※1)}が動いてしまうという不安材料があって依頼を受けた訳ですが、それも究明して論文発表しましたらそれがきっかけで自動車メーカーで採用されまして、今は全世界の車にこのSiN (シリコンナイトライド) のメモリが載っています。車って人の命を預かっているんで、信頼のおける理屈がないと絶対を買ってもらえないですから。でも信頼できれば買ってくれるんですね。今、市場規模はとんでもないことになっています。論文の引用はたったの9件ですけどね(笑)

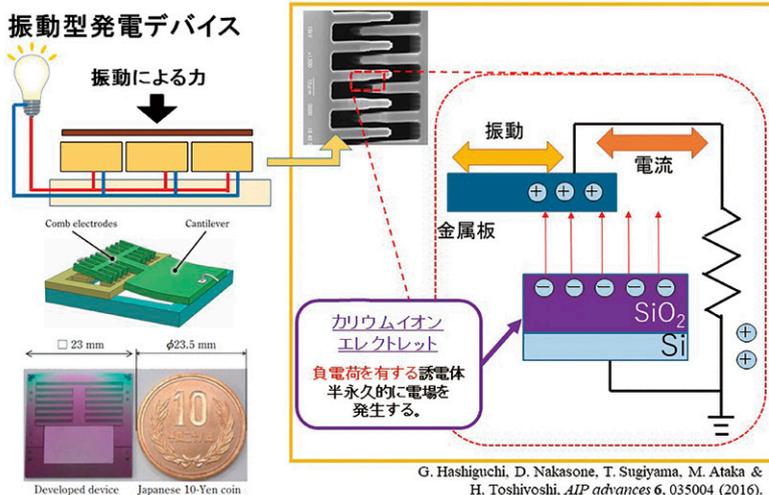
— 論文の引用数だけでは、世の中への貢献度は測れませんね。

2004年には、それまで世界で知られていた半導体開発のロードマップを書き換えることになった研究成果を発表しています。当時は「多結晶Siゲートの技術が2007までに確実に実現可能な技術」として予想されていたんですが、私は界面物理の新概念を創成して、この技術は「原理的にあり得ない」ということを証明してしまったんです。その時に示

※1) 閾値

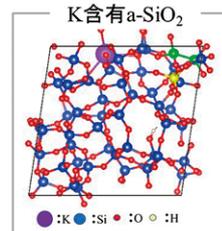
感覚や反応や興奮を起こさせるのに必要な、最小の強度や刺激などの (物理) 量。境界となる値。

CPU使用率、メモリー使用量等、通信トラフィック量等のパフォーマンスに対し閾値を設定し、その値を境として監視対象サーバーの正常/異常を判断する。

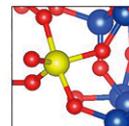


計算結果 | K含有a-SiO₂

シミュレーション後の構造解析



特徴的な局所構造が形成
黄:5配位Si構造



通常a-SiO₂内のSiは全て4配位
K原子の存在により5配位Si構造が形成された

白石教授が富岳を使って仕組みを解明し、さらに信頼性を上げる提案をしたことにより製品化となった

白石 賢二 教授

SHIRAIISHI, Kenji

1988年3月東京大学大学院理学系研究科物理学専攻課程博士課程修了(理学博士)、1988年4月~2000年12月NTT基礎研究所、2001年1月~2007年9月筑波大学大学院数理物質科学研究科助教授、2007年10月~2013年5月筑波大学大学院数理物質科学研究科教授、2013年5月~2015年9月名古屋大学大学院工学研究科教授、2013年10月~現在名古屋大学未来材料・システム研究所教授

- 趣味・好きなこと
SKE48の応援をすること



した「こうでなければ」というプロセスを使ってIntelが、ハフニウムオキシド(Hafnium(IV) oxide)という絶縁膜を使った金属ゲートのLSIの開発に成功しました。それは今はTSMC等の半導体デバイス製造会社を作っています。

— 半導体に関する研究は、巨大な市場に影響がありますね。世の中への貢献を実感できる成果が多いのは嬉しいでしょうね。元々「世の中に役立つ」ことを意識して研究者を志したのですか？

大学を出てから13年間はNTTで、ずっと「せめて10年先、20年先に役立つことをやれ」と言われ続け、そういう感覚が定着したんだと思います。NTTでは、結晶成長のシミュレーション(物理現象をモデル化し、それを基にコンピュータ上で模擬実験をすること)をやっていました。そこでは何の産業界に貢献する成果もないまま、大学時代の先輩にあたる押山先生(後述)に勤務先の筑波大学へ助教授として引っ張ってもらって、量産化に近いことと、大学でしかできない、生命の起源とかそういったことをやり始めたんです。

— 結果として、その時の思いが、今量産化されている研究

のパワーの源となっているのかもしれないですね。大学では理学系研究科の道を選ばれていますが、子供の頃はどんな少年でしたか？

当時のことは結構よく覚えているんですが、幼稚園の頃は、とにかく園庭の片隅で一人アリンコをずっと見ていました。他の虫も好きで、芋虫を鼻に這わせたり家で飼ったり。小学生になっても、学校に到着する前に毛虫をいつもまでも眺めていたりして、勉強は全然できないし、当時は特殊学級へ入ることを勧められ、成績もずっと最低ラインでした。転機が訪れたのは、中学校で一次方程式を解いた時ですね。全てがわかって、元々凶鑑の虫は全部覚えるほど記憶力には自信がありましたし、他の科目も一緒に成績が良くなりました。

— 驚きの逸話に伺いたいことが尽きませんが、若者へメッセージを

研究対象によって視点を変えられるような、それでいて深く掘り下げて考える。そしてできたらやっぱり、世の中変えるようなつもりで、気概を持ってやり続けて欲しいなと思います。それをやっていかないと、次の日本はないと思っているので。計算だけでなく、もちろん実験においても。

ITRS 2003年

* ITRS = International Technology Roadmap for Semiconductors (国際半導体技術ロードマップ)

Table 45a Low Operating Power (LOP) Logic Technology Requirements—Near-term

Year of Production	2003	2004	2005	2006	2007	2008	2009
Technology Node	lp90						
DRAM % Pitch (nm)	100	90	80	70	65	57	50
MPU:ASIC Metal 1 (M1) % Pitch (nm)	120	107	95	85	76	67	60
MPU:ASIC % Pitch (nm)	107	90	80	70	65	57	50
MPU Printed Gate Length (nm)	65	55	45	40	35	32	28
MPU Physical Gate Length (nm)	45	37	32	28	25	22	20
Physical gate length low operating power (LOP) (nm) [1]	65	53	45	37	32	28	25
EOT equivalent oxide thickness (physical) for LOP (nm) [2]	1.6	1.5	1.4	1.3	1.2	1.1	1.0
Electrical thickness adjustment for gate depletion and inversion layer effects (nm) [3]	0.8	0.8	0.7	0.7	0.7	0.4	0.4
Equivalent electrical oxide thickness in inversion (nm) [4]	2.4	2.3	2.1	2.0	1.9	1.5	1.4
Nominal gate leakage current density limit (at 25°C) (A/cm ²) [5]	0.51	1.89	2.22	2.70	6.21	5.95	6.67

● 半導体開発のロードマップ

多結晶Siゲートの技術が2007まで確実に実現可能な技術として2004年の半導体ロードマップでは予想されたが、白石教授が第一原理計算で多結晶Siゲートの技術は実現不可能であることを発表したことによりこの技術がロードマップから消失。一方、実現に向けて予言した金属ゲート技術が、難しいが2008年から立ち上がると書き換えられた。(2003年と2005年のITRSロードマップより)

ITRS 2005年

Table 69a Thermal and Thin Film, Doping and Etching Technology Requirements—Near-term Years
Grey cells indicate the requirements projected only for near, intermediate, or long-term years.

Year of Production	2005	2006	2007	2008	2009	2010	2011	2012	2013
DRAM % Pitch (nm) (contacts)	80	70	65	57	50	45	40	36	32
MPU:ASIC Metal 1 (M1) % Pitch (nm)(contacts)	90	78	68	59	52	45	40	36	32
MPU Physical Gate Length (nm)	52	28	25	23	20	18	16	14	13
Equivalent physical oxide thickness for bulk MPU:ASIC T _{ox} (nm) for 1E20-doped poly-Si [A, A1, A2]	1.1	1.0	1.0						
Equivalent physical oxide thickness for bulk MPU:ASIC T _{ox} (nm) for 1 SE20-doped poly-Si [A, A1, A2]	1.2	1.1	1.1	0.6					
Equivalent physical oxide thickness for bulk MPU:ASIC T _{ox} (nm) for 3E20-doped poly-Si [A, A1, A2]	1.3	1.2	1.2	0.71	0.54	0.41			
Equivalent physical oxide thickness for bulk MPU:ASIC T _{ox} (nm) for metal gate [A, A1, A2]				0.9	0.75	0.65	0.5	0.5	
Gate dielectric leakage at 100 °C (A/cm ²) bulk high-performance [B, B1, B2]	1.8E+02	6.4E+02	8.0E+02	9.1E+02	1.1E+03	1.8E+03	2.0E+03	2.4E+03	

芳松 克則 准教授

YOSHIMATSU, Katsunori

2001年京都大学大学院情報学研究所博士課程修了(博士(情報学))。
名古屋大学・同志社大学・科学技術振興機構の研究者を経て、2004年度から名古屋大学助教。2014年同大准教授。

● 趣味・好きなこと
ゲーム。幼いころから、阪神ファンです。
アナログなものも好みます。



芳松 克則 准教授 (フロンティア計算物質科学研究グループ)

古典物理学の未解決問題 「乱流の理論」に取り組む

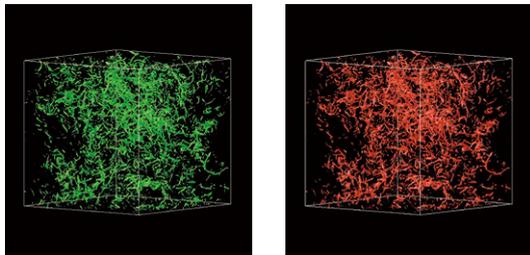
— 白石先生とは全く異なるとのことですが、芳松先生はどのような研究を？

メインで取り組んでいるのは「乱流の理論」です。これは、物理学の未解決問題の1つで、霧の中を探検するような難しさで、今のところゴールが見えていません。

流れというのは気体も液体も様々あり、人間の目に見えるもの、見えないものも様々存在しますが「流体」としては同じ扱いになります。これを計算して理論づけるというをしています。すると流れる場合もありますし、壁に何か突起があったりすると、そこには大なり小なり渦が発生します。

— 計り知れない膨大な動き(流れ)にどうやって向き合われているのでしょうか。

流体の基礎方程式は、ナビエ-ストークス方程式^(図1)です。式はきれいに書けるので、これを解けば良いのです。しかし、この方程式は、難しいことでもよく知られています。シミュレーションすると、大小様々な渦がそこかしこに出て



左(緑)：キチンと数値計算で算出した粒子。
右(赤)：あるモデルを使ってシミュレーションの結果。赤の方が計算量はグッと減る。

$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \nu \nabla^2 \mathbf{u} + \mathbf{F}$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$$

《凡例》u 流体の速度、ρ 流体の密度、p 圧力、F 外力、ν 単位密度当たりの粘性係数

● 図1：ナビエ-ストークス方程式

きます。未知関数の偏導関数を含む微分方程式が予期せぬ複雑な挙動をたくさん引き起こして、とても複雑な現象になってしまいます。これを どう扱うか？非常に厄介です。

— 具体的に「流体」「乱流」の予測はどんなところで使われるのでしょうか。

建築、自動車、機械、環境、数学でも使います。天気予報でも乱流計算を使っています。たとえば、気体をできるだけ遠くまで放出するには、流出口を直角に切るのか鋭角に切るのか、滑らかな形か、どんな形が良いのか、計算して予測することもあります。

建築物で、アメリカ ワシントン州のタコマ橋^{※2)}という全長約1.65kmの橋が完成後4か月で激しい振動により崩壊した(1940年)際、桁の風下に発生した大きな渦が原因で、構造物が風を受けて生じる振動についての研究が急速に進展したと言われています。

— 「乱流」に取り組むようになったのは？

大学のとき、工学部だったのですが、元々数学が好きだったこともあり、卒業研究では微分幾何に触れていました。その後、担当教員の異動を機に「流体力学」と出会いました。学位を取った後、運よく名大の金田 行雄先生(現 名誉教授)のところでポスドクになり、その後、助手(当時)に採用され現在に至ります。

金田先生は数学に強いこと、理論家としても、スーパーコンピュータを使った乱流の研究でも有名なので、大いに影響を受けています。

乱流は、複雑な現象の解明その理論の構築においては、いろんな可能性についてあるかないかを判別していくのが大事です。「ないことを証明できる唯一の学問」である数学との相性も良いです。

— 若い人達へ向けてメッセージを

今は、機械学習、AIが大きな期待を集めています。しかし、しっかりとした論理を展開する能力はAIが主体になっても大

※2) タコマ橋

タコマナローズ橋。風によるあまりに大きい振動が生じていたため、ワシントン大学のフォーカーソン博士とそのグループが、調査のために撮影していたため、崩壊事故の一部始終が記録されることになった。この詳細な記録は貴重な技術財産となった。

事だと思えます。また、シミュレーションの結果が正しいのかどうか、AIが出している結果が妥当なのかどうかは、検証しないとイケないです。その検証は、これまでの研究との整合性や論理がもとになります。数学や物理の基礎を大事にして欲しいと思えます。

洗平 昌晃 助教 (フロンティア計算物質科学研究グループ)

新しい二次元物質の創成を目指して

— 主に二次元物質^{※3)}について研究中とのことですね。

二次元物質の原子スケールでの構造や性質について計算機シミュレーションを用いて予測しています。二次元物質というのは周期性をもって配列したシート状の物質のことで、三次元結晶に比べて極めて薄い物質になります。半導体はますます微細化、集積化が進んでいるので、非常に薄い二次元材料には大きな期待が寄せられています。また、三次元結晶では存在しない新しい特性が生じることも示唆されていて、基礎サイエンスの観点からも注目を浴びています。二次元物質の中でも、シリコンやゲルマニウム、スズなどの14族^{図2)}元素から構成される二次元物質に対して、若手研究者同士でユニットを組んで研究を続けて来ました。

— 学内の若手研究者同士で組んでいたのですか？

はい。名古屋大学の研究力強化促進事業「若手新分野創成研究ユニット」の1つとして、結晶成長を専門とする黒澤准教授(当時助教)、物性評価を専門とする大田准教授(当時助教、現福岡大学)、計算物質科学を専門とする私とで研究を進めてきました。ユニットとしての活動は2019年度でひと区切りとなりましたが、この活動で交流を深めた学内外のメンバーと共に科研費学術変革領

● 図2: 14族(周期表より)

5	6	7
3	C	N
13	14	15
Al	Si	P
31	32	33
Ga	Ge	As
49	50	51
In	Sn	Pb
81	82	83
Tl	Pb	B

※3) 二次元物質

厚みが原子1個分から数個分、大体1nm程度以下の物質のこと。多くの二次元物質は、三次元の層状物質の1層だけを取り出すことで得られます。即ち、二次元材料が他の材料と異なる大きな特長は「はがせる」こと。これまで、Siに代表される三次元物質を使った半導体デバイスの更なる微細化には、二次元物質の開発が必須と言われている。

域研究(B)に申請していました。今年度の採択を受けて、改めて14族二次元物質の研究開発に注力しています。

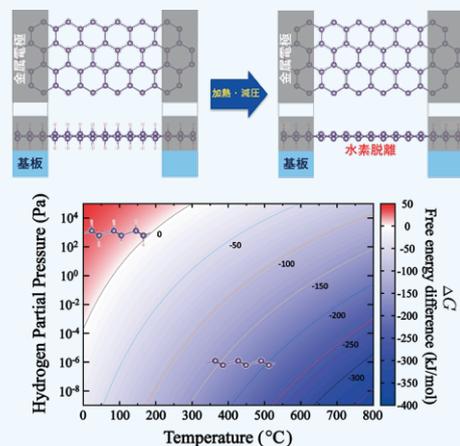
— 少しご紹介いただけますか？

シリコンやゲルマニウムの二次元物質であるシリセンやゲルマネンは非常によく電気を流すことが理論的に予測されています。現在これらは金属上において合成に成功していますが、それではその優れた性質が最大限に利用できないことも知られています。シリセンやゲルマネン固有の性質を測定するためにはどのように合成すればよいのか？そのシナリオを提唱しました。

シリセンやゲルマネンが水素化した層状物質は安定に合成することができます。それら層状物質の各層はとても弱く結合しているので1枚ずつ剥がすことが可能です。単層の水素化したシリセンやゲルマネンから水素が脱離すれば理想的な二次元物質^{※4)}が出来上がるわけですが、それが可能であることをシミュレーションによって示しました。

— 水素も外れて二次元物質ができるんですか？

水素が外れる温度領域と圧力領域があるんです。当初、シミュレーションによってこのことを導き出しましたが、実際に加熱・減圧することで水素が脱離することを黒澤先生が確認しています。したがって、水素化した二次元物質が飛んで行ってしまうようにしっかり固定してから水素を脱離すれば、シリセンやゲルマネン固有の性質を測定することが実験的に可能になるはず。この実現に向けて、今も黒澤先生と大田先生と共に研究を進めています。



洗平 昌晃 助教

ARAIDAI, Masaaki

2007年東京理科大学理学研究科博士後期課程修了(博士(理学))。早稲田大学・東北大学・筑波大学の研究員等を経て、2013年から名古屋大学助教。

● 趣味・好きなこと
ドライブ・ビリヤード

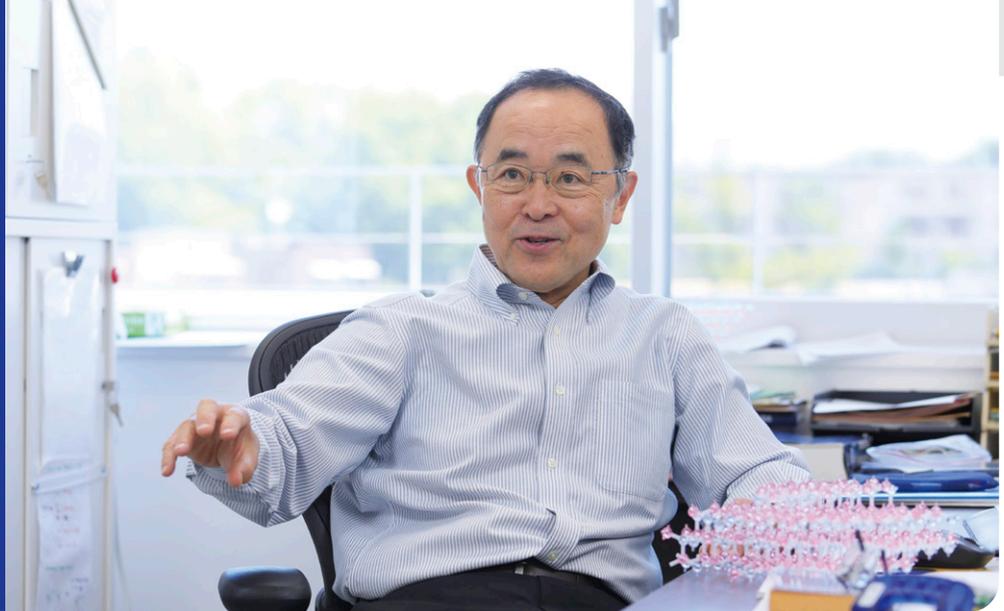


押山 淳 特任教授

OSHIYAMA, Atsushi

1981年東京大学博士課程修了(理学博士)、同大助手、1983年IBM Watson Res Ctr 研究員、1985年NEC Lab 研究員、1995年筑波大学教授(物理学系)、2007年東京大学教授(物理学専攻)、2018年名古屋大学特任教授(IMaSS)

● 趣味・好きなこと
酒飲むこと、ちっちゃい子とお話すること、50歳までつくばで草サッカーしてました今は見るだけ、高校時代は管弦楽団でフルート吹いていました。今は音も出ないけど。



押山 淳 特任教授 (コンピューティクス物質科学研究グループ)

フラッシュメモリの記憶の根幹をフローティングステートと命名

— 押山先生は白石教授と学生時代に同じ研究室のご出身とか。

そう、7年違いです。彼が大学にいた頃、私は学位を取ってすぐ助手になって。その後IBM (アメリカ)、NEC、筑波大学と渡り歩いて最後東京大学に戻る前だったんですけど、彼はNTTにいた時で、助教授のポストが空いていたので筑波大学へ招いたんです。それで、私は立つ鳥跡を濁して行ったものだから、色々大変だったと思いますが、それでまた付き合いが始まりました。

— それで今度は白石先生からお声掛けされたのですね。
東京大学は定年になったんですけども、「富岳」という

文科省の成果創出加速プログラムに携わっていたので、どこかに所属したいということで声を掛けてもらいました。

こちら(名古屋大学)に来てからは、GaN(窒化ガリウム)のエピタキシャル成長^{※4}で、原子がどういう風に来て成長していくかというような計算をしていました。

— 富岳はこれまでどのような研究に利用されていたのですか？

例えばフラッシュメモリー^{※5}。あれってものすごい。メモリーのユニットに三次元的に100層とか200層とか積み重ねて、電子を捕まえたり離したりさせてるんです。でも、驚くことにどうしてメモリとして働くのか、未だ解明されていないですよ。みんな使っているけど。

その材料として使っているのは、アモルファス(非晶質)の窒化シリコン(SiN) なんだけれど、これには空間があって、そこに電子が捕まってメモリとして働くと提唱して、僕が「フローティングステート」って名前をつけたんですよ。

— その提唱(予言)を確認させてくれるような未来の研究者にメッセージを

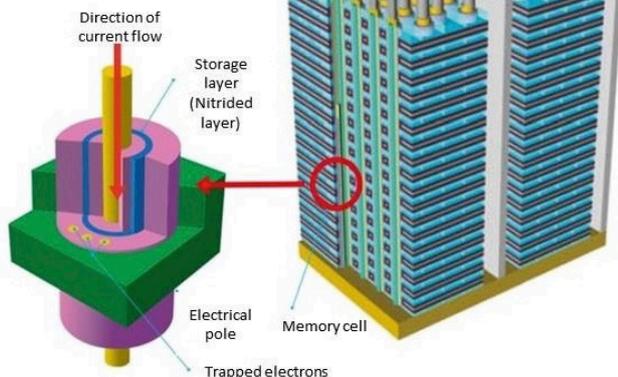
先ほどのフローティングステートは、私が東大で教授だった時代の学生の松下くんが、事実として多くの人が知っていることに対して「何でそうなるのかわからん」と言い出して、計算して、その状態を見つけたんです。研究では、ちょっとしつこくしつこく調べて自分で考えることが大事ですよ。

自分に置き換えて考えてみても、計算して予測した通りの結果になった時はとても嬉しいんだけど、予測と違った時、どうして違うのかを考えて、新たな予測を導き出すことができた時に喜びを感じますから。

(聞き手・文/広報委員会 植木、小西)

BiCS

Greater capacity because current also flows vertically in a stacked structure



● 物質内包空間に存在するfloating電子状態とそのメモリー機能発現の第一弾原理計算による解明：フラッシュメモリーSiNの場合

SiNの内包空間に漂う Floating State は、結晶中の欠陥あるいはアモルファス中の構造非一様性によって生み出された局所空間に閉じ込められ(Localized Floating State)、H不純物に対するrobustなnegative-Uギャップ状態を作る。おそらくこれがフラッシュメモリーの機能を担っている。
《日本物理学会にて 2013年9月19日》

※4) エピタキシャル成長

半導体製造の薄膜結晶成長技術のひとつで、半導体の単結晶の基板の上に、新しく単結晶の薄膜を成長させること。エピタキシャル成長の利点は基板上に基板と同一、または異なった材料で、導伝度や抵抗を自由に制御でき、構造の自由度が増す点である。

※5) フラッシュメモリー

瞬時にデータを読み書きできて、電源を切ってもデータが消えないメモリ。USBメモリ、SDカードなど有名。元東芝の舛岡 富士雄氏が1980年代に開発した。