

参考資料配付

平成24年6月6日
科学技術振興機構（JST）
Tel：03-5214-8404（広報課）
筑波大学
Tel：029-853-2040（広報室）
東京大学
Tel：03-5841-1790（工学系研究科/工学部 広報室）

グラフェン-ダイヤモンド複合構造の高効率な放熱特性を発見

ポイント

- 優れた電気伝導特性を持つグラフェンは、次世代の配線材料として有力視
- グラフェン-ダイヤモンド複合構造に、優れた電気伝導特性と高効率な放熱特性を発見
- オール炭素系材料を用いた次世代デバイス構造の設計指針が提示された

JST 課題達成型基礎研究の一環として、筑波大学 岡田 晋 准教授らは、ダイヤモンドとグラフェン^{注1)}（2次元グラファイトシート）の複合構造が、優れた電気伝導特性とともに、高い放熱特性を示すことをシミュレーション解析により発見しました。

現在の半導体デバイスでは、配線材料として銅が使用されています。しかし、デバイスの高集積化に伴って、いかに銅配線の発熱を避けるかが課題となり、より電気抵抗の低い材料や、熱を効率よく配線の外に放出する構造の探索が盛んに進められています。なかでも、グラフェンは室温での電気抵抗が最も低い金属である銀に匹敵するほど優れた電気伝導特性を持つため、次世代配線材料の候補として有力視されています。

本研究チームは、グラフェン配線で発生する熱を効率よく外部に放出する構造として、グラフェンを同じ炭素系材料であるダイヤモンドで両側から挟み込む構造に着目しました。シミュレーション解析によると、この構造のグラフェン配線は本来の優れた電子輸送特性^{注2)}を保ちつつ、グラフェンで発生する熱を効率的にダイヤモンドに逃がせることが分かりました。これにより、グラフェン-ダイヤモンド複合構造が、高性能ヒートシンク付きの機能的配線として利用できる可能性が明らかになりました。

本研究結果は、優れた電気伝導特性を持つグラフェン配線の具体的構造を、発熱の回避法とともに示しており、炭素系素材を用いた次世代デバイスの設計指針として期待されます。

本研究は、東京大学 大学院工学系研究科 機械工学専攻 丸山 茂夫 教授、塩見 淳一郎 准教授、東京理科大学 山本 貴博 講師と共同で行ったもので、本研究成果は米国物理学会誌「Applied Physics Letters」のオンライン版で6月4日に公開されました。

本成果は、以下の事業・研究領域・研究課題によって得られました。

戦略的創造研究推進事業 チーム型研究（CREST）

研究領域：「次世代エレクトロニクスデバイスの創出に資する革新材料・プロセス研究」
（研究総括：渡辺 久恒（株）EUVL基盤開発センター 代表取締役社長）

研究課題名：「計算科学によるグラファイト系材料の基礎物性解明とそのデバイス応用における設計指針の開発」

研究代表者：岡田 晋（筑波大学 大学院数理物質科学研究科）

研究期間：平成21年10月～平成27年3月

JSTはこの領域で、微細化パラダイムのみでは実現できない機能・性能を持つ、革新的かつ実用化可能なエレクトロニクスデバイスを創製するための材料・構造の開発およびプロセス開発を行っています。上記研究課題では、グラファイトやグラフェン、並びにグラフェン誘導構造を有するナノスケール炭素物質群に対して、量子力学に立脚した計算科学的手法による基礎物性解明を行い、グラファイト系デバイスの設計指針の提示を行っています。

＜研究の背景と経緯＞

これまで半導体エレクトロニクスデバイスでは、回路の微細化による高集積化・高速化・低消費電力化など、複数の性能を同時に向上させる努力がなされてきました。しかし、微細化に伴って大きくなる配線の電力ロスや製造コストの沸騰という技術的・経済的な限界も迎つつあります。そこで近年、この問題の解決のため、新しい材料やプロセス、新しいデバイス構造の研究開発が盛んに行われています。

なかでも注目されているのがカーボンナノチューブやグラフェンなどの炭素系材料です。炭素系材料は、低次元性・ナノメートルスケールの微細性・優れた電子輸送特性を持つことから、従来のシリコンに代わる新規材料としてだけでなく、金属配線に替わる新たな配線材料の有力候補なのです。炭素系素材はまた、ダイヤモンドに見られるような非常に強固な原子間結合をもち、高い熱伝導性^{注3)}を示すことが知られています。従って、複数の炭素系素材を組み合わせたハイブリッド構造を作れば、高い電子伝導性と熱伝導性を同時に持つ理想的なオールカーボン配線が実現可能だと考えられます。

＜研究の内容＞

今回の研究では、将来の電子デバイスとして注目されているグラフェンナノリボン^{注4)}と呼ばれる原子1個分の厚さをもつグラファイトの長いリボンを、両端からダイヤモンドで挟み込んだ複合系(図1)について、その構造安定性と電子状態を第一原理電子状態計算法^{注5)}を用いて詳細に調べました。ここでは、グラフェンナノリボンとダイヤモンドは炭素原子間の共有結合によって接合されています。

シミュレーションの結果、グラフェン-ダイヤモンド複合構造はエネルギー的に安定で、伝導電子のスピンの1方向にそろった強磁性金属状態であることが分かりました(図2)。グラフェンとダイヤモンドの境界近くを流れているスピン分極した(スピンのそろっている)電子を使えば、グラフェンナノリボンは単に電荷を運ぶ配線としてだけでなく、スピンも活用できる配線材料として応用可能と考えられます。ダイヤモンドに挟まれていないグラフェンナノリボンが電気伝導特性の非常に優れた金属状態を示すことはこれまでも知られていました。しかし、ダイヤモンドに挟まれたグラフェンナノリボンも同様に電気伝導特性の非常に優れた金属状態を示すことは、本研究によって初めて明らかになったことです。グラフェンナノリボンの電子状態がダイヤモンドの有無にかかわらず保持されるのは、ダイヤモンドとの界面においてグラフェン領域の π 電子^{注6)}が完全に終端されるためであると考えられます。

さらに、この複合系の熱伝導特性を非平衡分子動力学法^{注7)}を用いて調べました。その結果、グラフェン領域からダイヤモンド領域への界面熱コンダクタンス^{注8)}は $7.01 \pm 0.05 \text{ GWm}^{-2} \text{ K}^{-1}$ と計算されました(図3)。このグラフェン-ダイヤモンド間の界面熱コンダクタンスは、高い熱伝導性で知られるカーボンナノチューブ-シリコン間の界面熱コンダクタンスよりも2桁高く、グラフェンで発生した熱が速やかにダイヤモンド領域へ拡散することを示しています。

以上のことから、本研究で提案されたグラフェン-ダイヤモンド複合構造が、高い電子伝導性と発熱を回避できる高い熱伝導性とを同時に利用できる、優れた配線構造であることが分かりました。

＜今後の展開＞

今後は、より大規模なグラフェン-ダイヤモンド複合構造について電子輸送シミュレーションを行い、配線材料としての具体的な特性を明らかにしていきます。その結果は、炭素系材料を用いた次世代デバイスの新たな設計指針となるものと期待されます。

<参考図>

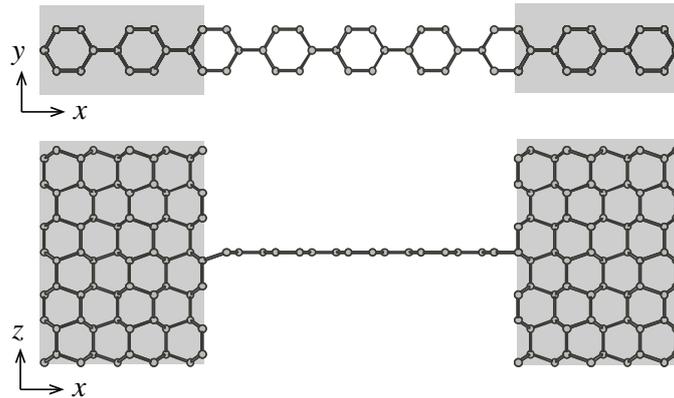


図1 グラフェン-ダイヤモンド複合構造

第一原理電子状態計算により得られた、グラフェン-ダイヤモンド複合構造のエネルギー安定状態。灰色の部分にダイヤモンド構造であり、その間にグラフェン構造が挟まれている。

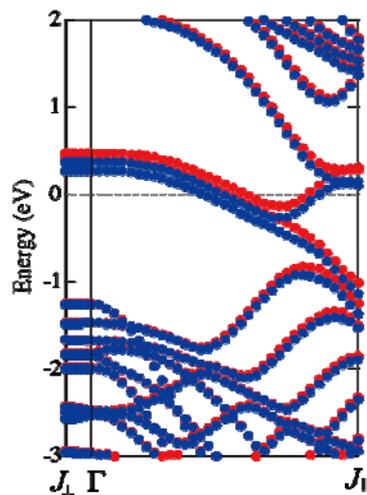


図2 グラフェン-ダイヤモンド複合構造の電子状態

第一原理電子状態計算により得られた、グラフェン-ダイヤモンド複合構造の電子状態を表すバンドダイアグラム。エネルギーはフェルミ準位を基準としている。また、青線、赤線はそれぞれ異なる電子スピン状態を表し、伝導電子がスピン分極していることが分かる。

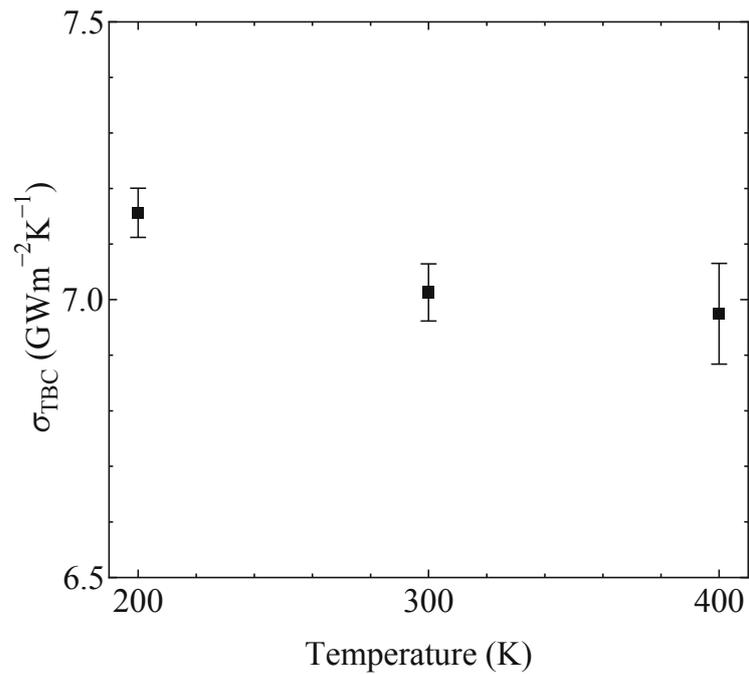


図3 グラフェン-ダイヤモンド間の界面熱コンダクタンスの温度依存性

非平衡分子動力学法により計算された、グラフェン-ダイヤモンド界面での界面熱コンダクタンスの温度依存性。200 Kの低温領域から400 Kの高温領域の幅広い温度領域にわたって、 $7 \text{ GWm}^{-2} \text{ K}^{-1}$ 程度の高い界面熱コンダクタンスを示している。

<用語解説>

注1) グラフェン

炭素原子一層からなる2次元のシート状物質で、炭素原子が蜂の巣状に六角形のネットワークを組んでいます。グラファイトはグラフェンが幾層にも積み重なった構造といえます。

注2) グラフェンの優れた電子輸送特性

2次元物質であるグラフェンは従来の3次元物質に比べて特異な電子状態を持ち、電子移動度が極めて大きい物質です。室温での移動度は $200,000\text{ cm}^2\text{ V}^{-1}\text{ s}^{-1}$ と見積もられ、この値を電気抵抗に換算すると、室温での抵抗が最も小さい銀よりも小さい抵抗値です。

注3) ダイヤモンドの高い熱伝導性

ダイヤモンドは炭素の同素体の1つで、バンドギャップが 5.47 eV の絶縁体です。ダイヤモンドの中の炭素原子の熱振動がフォノンとなって結晶中を伝わりやすいため、非常に熱伝導性が高い物質として知られています。触ると冷たく感じるのはこの高い熱伝導性のためです。

注4) グラフェンナノリボン

炭素原子1個分の厚さを持つグラフェンの細線をグラフェンナノリボンと呼びます。その幅によって異なった電子的特性を示し、新規デバイス材料として注目されています。

注5) 第一原理電子状態計算法

量子力学の基本法則に基づいて物質中の電子状態を、精密に求める方法。本研究の計算では、第一原理計算法の1つである「擬ポテンシャル法」を用いて計算しました。

注6) π 電子

分子の中で隣り合った原子同士について、電子軌道の重なりが作る π 結合に関与する電子を π 電子といいます。炭素原子の4つの価電子のうち、3つは隣接する炭素原子との結合に使われ、残りの1つが自由電子のように自由に動き回れる電子(π 電子)としてグラフェン上を運動します。

注7) 分子動力学法

古典力学におけるニュートン方程式を、与えられた原子間のもとで解き、物質の安定性やダイナミクスを解析するシミュレーション方法です。

注8) 界面熱コンダクタンス

触れている2つの物質の境界面での、片方の物質からもう片方の物質への熱の伝わりやすさを表します。数字が大きいほど、熱が伝わりやすいことを意味します。

<論文名>

“Graphene-diamond hybrid structure as spin-polarized conducting wire with thermally efficient heat sinks”

(グラフェン-ダイヤモンド複合構造：高効率放熱機能を備えたスピン偏極導線)

<発表者>

筑波大学 数理物質科学研究科 准教授

岡田 晋 (オカダ ススム)

<お問い合わせ先>

<JSTの事業に関すること>

木村 文治 (キムラ フミハル)

科学技術振興機構 戦略研究推進部

〒102-0076 東京都千代田区五番町7 K's 五番町ビル

Tel : 03-3512-3526 Fax : 03-3222-2063

E-mail : crest@jst.go.jp