「新しい情報処理プラットフォームのためのアクティブ原子配線網に関する研究」

（H12年度～H14年度、第Ⅰ期）
研究代表者：橋詰富博（日立製作所） 他4機関

研究の概要・目標

1 何を目指している

2010年に限界を迎えるとされている半導体集積素子に代わるあたらしい情報処理プラットフォームを実現するために、配線機能と演算機能を堅密化したアクティブ相互結合網（原子配線網）を提案し、統合シミュレーション技術と作製プロセス技術を研究開発することにより具体化する。

（3年後の目標）
- アクティブ原子配線網（2層）の実現
- 原子・高分子を数個を含む小規模アクティブ原子配線網の信号応答特性を予測する統合シミュレーションの実現

（5年後の目標）
- 多層アクティブ原子配線網（3層以上）を実現し、あたらしい情報処理プラットフォームを提案
- アクティブ原子配線網シミュレータの完成

2 何を研究している

アクティブ相互結合網（原子配線網）の
- 機能予測の統合シミュレーション技術
- 作製プロセス技術
- 信号処理技術の多様化（光、磁性等）
- 信号計測技術

3 何が新しいのか

単一素子では無く、多数の素子を能動的に配線したシステムを、提案し実証すること。

諸外国の現状等

1 現状

2010年には現在の情報プラットフォームの集積度が限界（256Gビット相当）に達すると予想されている。これに代わる次世代情報プラットフォームの必要性は唱えられているが、模索状態に留まっている。

アクティブ原子結合網の要素技術と考えられるカーボンナノチューブは、極微小電極間の配線が検討され始めている段階である。

2 我が国の水準

諸外国同様に、次世代情報プラットフォームの研究開発の具体的な動きは無い。

アクティブ原子結合網の要素技術となる原子・高分子配線技術は、カーボンナノチューブを除いて、基板上配線技術（日立基礎研）、基板内配線技術（電総研）、分子被覆導線（東大）の3者の独擅場になっている。

統合シミュレーション技術では、半導体プロセス（金材技研）、実験系と比較可能な大規模計算（東北大）で、世界の最先端レベルである。

分子被覆導線　内部が導電性、外部が絶縁性の高分子導線

研究進展・成果がもたらす利点

1 世界との水準の関係

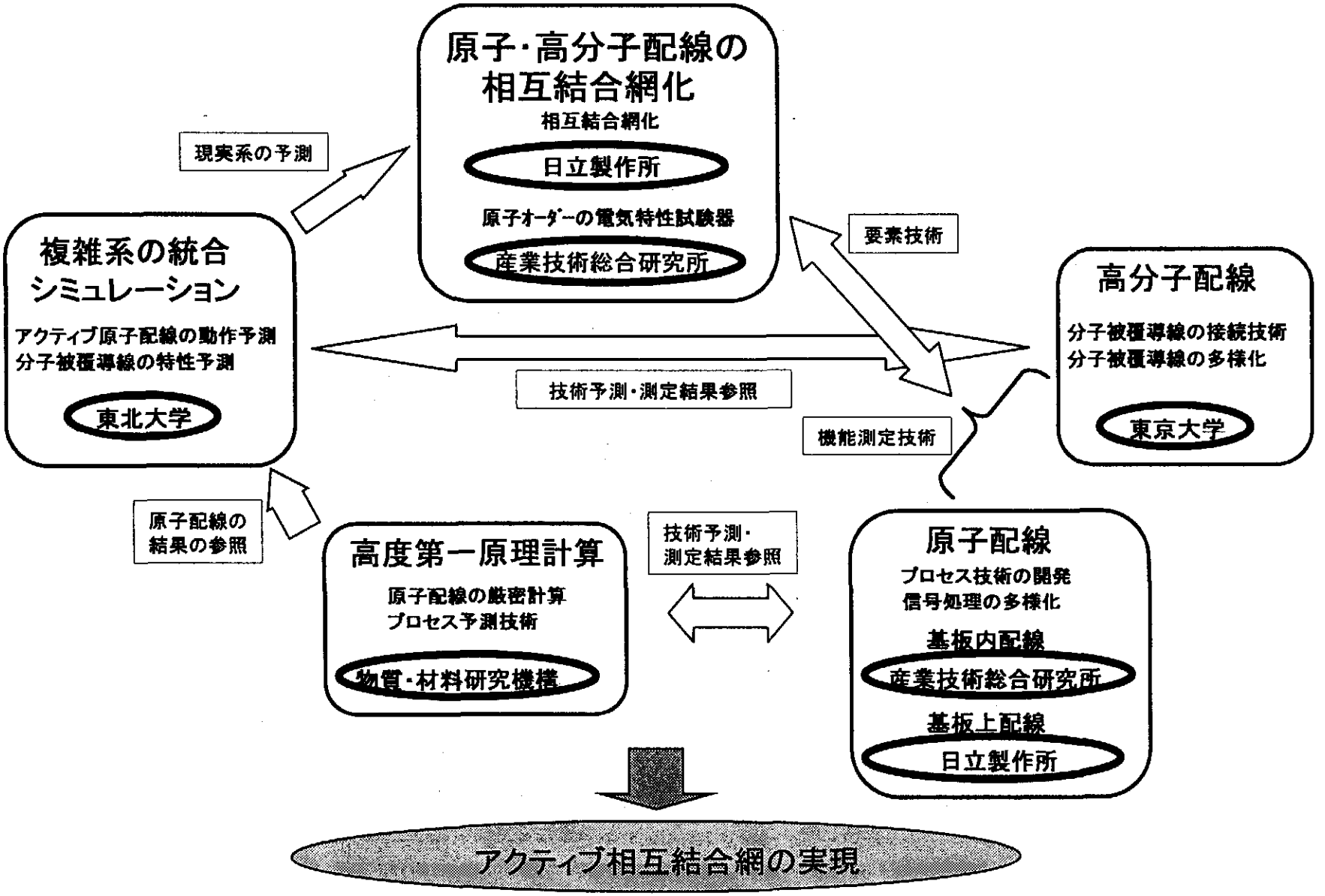
これまで真空管および半導体集積素子の二世代の情報処理プラットフォームは何れも欧米で発明された。早期にアクティブ相互結合網を実現し、 第3世代の情報処理プラットフォームを日本で提唱し、これまでにない世界で初めてのパラダイムを実現する。これが実現すると集積度の限界が3桁以上向上し、同時に低消費電力化が実現する。

さらに、統合シミュレーション技術についても、複雑系を扱えるレベルの計算手法を早期に実現し、世界水準を維持する。

2 波及効果

- ○次世代情報プラットフォームの基本特許を取得する。
- ○超並列処理が可能な次世代情報アーキテクチャー技術の実現を促進する。
- ○複雑系の信号処理系や、現実の材料化学プロセスを扱う統合シミュレーションが利用可能になる。
- ○分子被覆導線の実現のブレークスルーは、分子エレクトロニクス開発の起爆剤になる。
- ○配線構造（一次元構造）特有の新機能（磁性等）が出現するブレークスルーになれば、今までに無い超高密度記録素子等への応用につながる。

「新しい情報処理プラットフォームのためのアクティブ原子配線網に関する研究」 研究体制



科学技術振興調整費「新しい情報処理プラットフォームのためのアクティブ原子配線網に関する研究」所要経費一覧

研究項目	研究担当機関	研究担当者	平成12年度（千円）	平成13年度（千円）	平成14年度（千円）	第1期所要経費（千円）
新しい情報処理プラットフォームのためのアクティブ原子配線網に関する研究						
1．原子･高分子配線の相互結合網化に関する研究						
（1）相互結合網化に関する研究	（株）日立製作所　基礎研究所	橋詰　富博	26,053	19,829	15,964	61,846
（2）アトムテスターに関する研究	（独）産業技術総合研究所	三木　一司	3,024	68,812	32,916	104,752
2．原子配線の高度第一原理計算に関する研究	（独）物質・材料研究機構	大野　隆央	26,955	37,579	39,983	104,517
3．複雑系の統合シミュレーションに関する研究	東北大学 金属材料研究所	水関　博志	33,600	31,039	36,112	100,751
4．原子配線に関する研究						
（1）基板内配線に関する研究	（独）産業技術総合研究所	三木　一司	16,734	8,790	10,167	35,691
（2）基板上配線に関する研究	（株）日立製作所 基礎研究所	橋詰　富博	58,420	30,061	33,129	121,610
5．高分子配線（分子被覆導線）に関する研究	東京大学大学院　新領域創成科学研究科	伊藤　耕三	46,130	52,050	30,488	128,668
6．研究推進	文部科学省　研究振興局		211	211	211	633
合計			211,127	248,371	198,970	658,468

研究成果の概要

課題名（研究代表者）：
「新しい情報処理プラットフォームのためのアクティブ原子配線網に関する研究」
（橋詰 富博）

【研究目標の概要】

２０１０年には現在の情報プラットフォームの集積度が限界に達すると予想されている。これに代わる次世代情報プラットフォームの必要性は唱えられているが、模索状態に留まっている。また、原子レベル配線の要素技術と考えられるカーボンナノチューブは、極微小電極間のデバイスが検討され始めている段階である。これまで真空管および半導体集積素子の二世代の情報処理プラットフォームは何れも欧米で発明された。第３世代の情報処理プラットフォームを日本で提唱し、これまでにない世界で初めてのパラダイムを実現することが重要である。これが実現すると集積度の限界が３桁以上向上し、同時に低消費電力化が実現する。さらに、統合シミュレーション技術についても、複雑系を扱えるレベルの計算手法を早期に実現することが必須である。

本研究では、原子レベル細線の配線機能と演算機能を堅密化したアクティブ配線網を、その統合シミュレーション技術と作製プロセス／信号計測技術を研究開発することにより具体化する。また、信号処理技術の多様化（光、磁性等）を計る。

第Ｉ期の目標：

1．原子配線（基板上および基板内）、高分子配線（分子被覆導線）の３種類の原子・高分子細線の内二つを相互接続できる技術を開発する。
2．「原子配線網」のパーツである個々の原子・高分子細線特有の物性を明らかにして、新しい情報処理プラットフォームのアイデアを構築する。原子・高分子細線の物性としては、現段階で、（１）原子・高分子細線の電気伝導度の制御、（２）原子・高分子細線に付加されているダイオード（微分負性抵抗を含む）特性の実証、トランジスタ素子の開発、（３）原子細線の磁性発現等の実証を試みる計画である。また、「原子配線網」は更に新しい機能を持つことを明らかにする。
3．複数個の原子配線あるいは高分子配線を含む小規模な統合シミュレーション技術を開発する。
4．原子・高分子細線の電気的特性を測定する手法を新たに開発し、ナノ領域の計測基盤技術を提供する。

【研究成果の概要】

1. パルスバルブを用いて、溶媒中の高分子配線を超高真空中の水素終端シリコン表面へ、直接導入する手法を開発した。この手法により、水素終端シリコン表面における基板上および基板内原子配線に高分子配線を組み合わせることができた。これと、水素終端シリコン表面におけるビスマス埋め込み細線技術を統合して、３種類の原子・高分子配線が複合化できる。また、微細電極を施したシリコン基板を用いて、水素終端シリコン表面に導入した高分子配線に電極を接続することが可能となった。高分子配線について、高分子の両端にチオール基が接続されている、新しい導電性高分子の合成に成功した。この導電性高分子と分子ナノチューブによる高分子配線は、金や白金でできた

微細電極や原子配線に自己組織化的に接続されると期待される。これらの技術をさらに組み合わせることにより、原子配線網を実現する基盤技術が整った。

2. ビスマス細線の構造を決定して、電子状態をシミュレーションにより求めることにより、埋め込み原子配線の導電特性についての知見が得られた。水素終端シリコン表面において個々の原子・高分子細線にアクセスするための基板作製技術を開発し、原子細線のダイオード特性、量子コンダクタンス等の性質を解明し始めた。また、高分子配線の特性を調べるための微細電極作製技術を開発して、個々の分子の導電性についてのドーピングや接点の影響を調べ始めた。開発した微細電極作製技術は汎用性が高く、ナノ構造の電気的特性を追及するプロジェクトから電極基板の提供を強く求められている（具体的には、文部科学省ナノテクノロジー総合支援プロジェクト等を通して、微細電極の提供を考えている）。また、計算機シミュレーションを用いて、原子配線や分子配線の電子状態等を検討し、５員環の構造を持つ有機ポリマーにおいて、平坦バンド強磁性のメカニズムによる強磁性を実現できることを予言した。

3. 高分子配線のモデルケースと考えられる導電性の有機分子について、素子（基板表面）と配線（有機分子）との良質な結合を実現するために、精密な第一原理計算によりチオール結合の可能性を調べた。そのため、(i) 化合物半導体表面及び金属表面とチオール分子との結合状態を第一原理的に解析するとともに、(ii) 化合物半導体表面上へのチオール分子吸着を実験的に確認し、さらに(iii) チオール分子の直接吸着の基板となる化合物半導体表面の構造を実験的に解析した。また、高分子配線（分子被覆導線）の安定構造と電子状態を第一原理計算により求めた。シクロデキストリン（CD）の種類（大きさ）により安定性がことなり、最適な組み合わせを予言できた。また、高分子と金属電極との接続方法の確立のため、Au(111)面への高分子（チオフェン）吸着過程のシミュレーションを行い、吸着サイトと吸着エネルギーを求めた。さらに吸着による芳香族環への影響は小さいことを示した。ベンゼンに対する置換基の I-V 特性への影響を第一原理計算とグリーン関数法の組み合せにより求めた。これらの計算を基に、複数個の高分子配線を含む小規模な原子配線網について、電気導電性と接触抵抗を系統的に計算中である。

4. 電気特性試験器（アトムテスター）の設計及び作製は、当初想定していた走査型トンネル電子顕微鏡から原子間力顕微鏡へと基盤技術を変更した。特徴的なのは、アトムテスターの粗動アクチュエータ部分（ピエゾモータ）で、機械的に堅固に作ってあるために、粗動中でも除振特性が優れている。このアトミックプローブ一個のアトムテスターの動作チェックは既に完了した。現在、アトムテスターを２プローブ化中である。アトミックプローブが２つの場合に特有の問題があることが分かった。極低温で無ければ、電子顕微鏡で相対位置をモニターできるが、これが今の場合は不可能である。そこで、独自パターンを電子ビーム露光で作製して相対位置補正をした。スケール補正や走査方向の補正等がほぼ終了し、現在は擬似的に作製した１次元導電ラインの試験測定を行っている。

課題名（研究代表者）：　新しい情報処理プラットフォームのためのアクティブ原子配線網に関する研究（橋詰 富博）

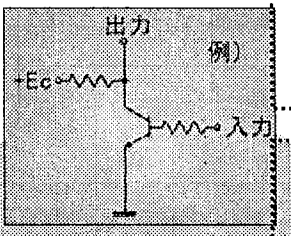
要素技術融合へのシナリオ
小規模デモンストレーション

第Ⅰ期で達成した要素技術　　開発中要素技術　　第Ⅱ期に開発する要素／複合技術

末端付き高分子配線（導電性高分子＋分子ナノチューブ）

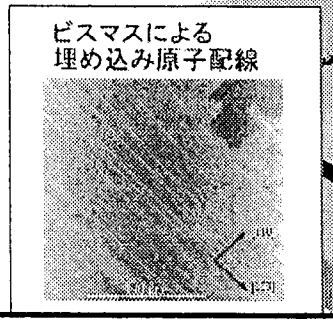
アトムテスター・SPMによる評価

導電性の理論評価
→原子配線網の統合シミュレーション



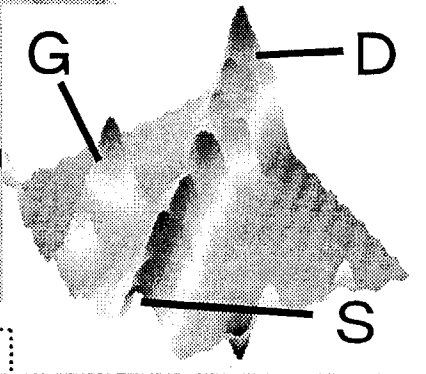
原子配線網の小規模デモンストレーション

SPMナノ加工による極微細電極設置



分子トランジスタ

銀配線



基盤内原子配線

パルスバルブによる高分子配線導入

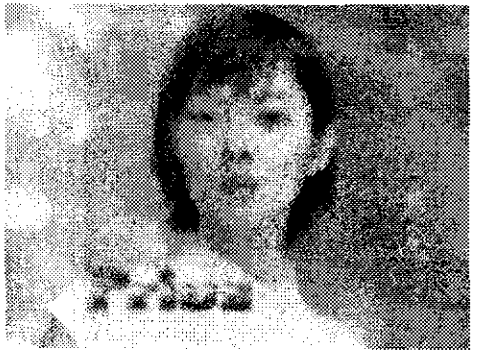
高分子末端と電極接合

化学合成により一体化した機能性分子

原子配線素子
三端子動作

課題名（研究代表者）： 新しい情報処理プラットフォームのためのアクティブ原子配線網に関する研究（橋詰 富博）

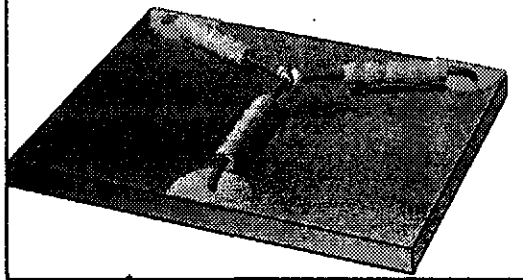
アクティブ原子配線網の将来像
原子・高分子複合による能動素子



入力

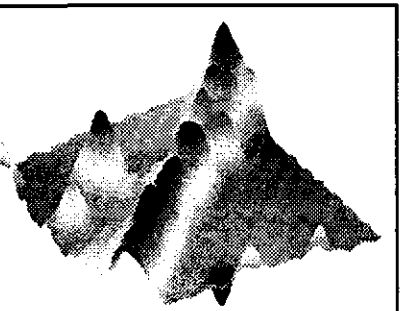
超並列演算

出力

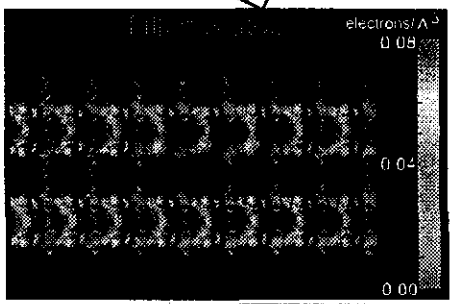


高分子配線
東大

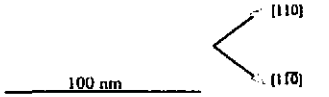
原子配線網



原子配線 日立



理論
シミュレータ
東北大
物材機構



基板内原子配線
産総研

研究成果公表等の状況

課題名（研究代表者）：新しい情報処理プラットフォームのためのアクティブ原子配線網に関する研究
（橋詰 富博）

【研究成果発表等】

	原著論文による発表	左記以外の誌上発表	口頭発表	合　計
国内	０（２）　件	８　件	１１０　件	１１８（２）件
国外	４９（７）　件	５　件	９９　件	１５３（７）件
合計	４９（９）　件	１３　件	２０９　件	２７１（９）件

（注：既発表論文について記載し、投稿中の論文については括弧書きで記載のこと）

【特許出願等】　１２件　（国内　６件、国外　６件）

【受賞等】　０件　（国内　件、国外　件）

【主要雑誌への研究成果発表】

Journal	Impact Factor	ｻﾌﾞﾃｰﾏ 1	ｻﾌﾞﾃｰﾏ 2	ｻﾌﾞﾃｰﾏ 3	ｻﾌﾞﾃｰﾏ 4	ｻﾌﾞﾃｰﾏ 5	合計
Phys. Rev. Lett.	6.46				2		2
Appl. Phys. Lett.	3.91		2				2
J. Chem. Phys.	3.52			1		2	3
Phys. Rev. B.	3.07		2		3		5
J. Cryst. Growth	2.70		4				4
J. Phys. Chem. A.	2.36			1			1
Chem. Phys. Lett.	2.20				2		2
Surf. Sci.	2.18				1		1
Appl. Surf. Sci.	1.64	3	3		3		9
J. Phys.	1.49	1					1
Mater. Trans. JIM	1.07			2			2
Jpn. J. Appl. Phys.	1.03	3	2	2		1	8
主要雑誌小計		7	13	6	11	3	40
発表論文合計		8(1)	25	7(5)	15(3)	7	62(9)