

シリコン・ナノポーラス構造におけるフォノン輸送

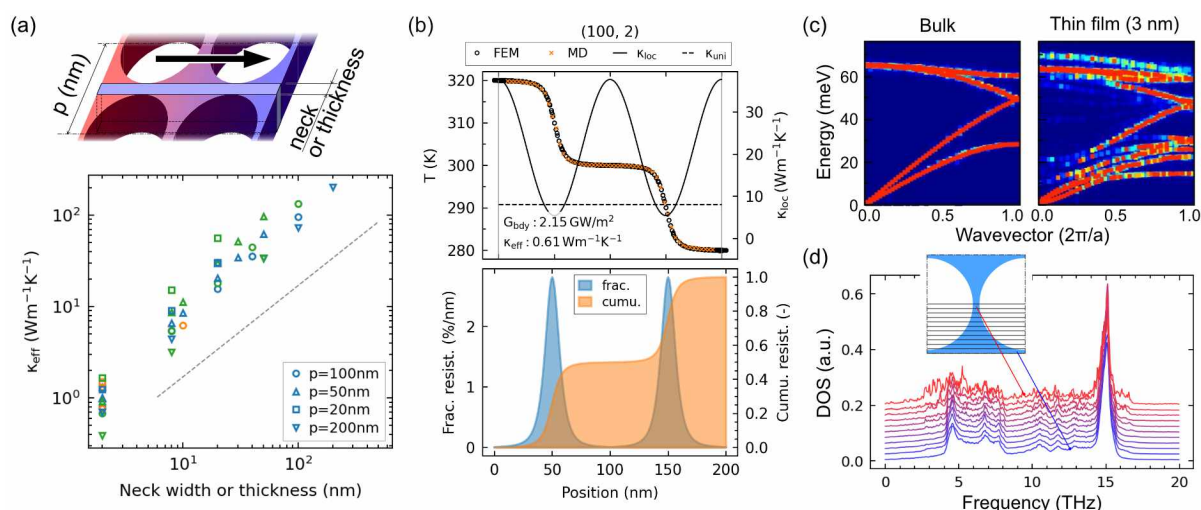
Phonon Transport in Silicon Nanoporous Structure

東大工¹, UCLA² °大西 正人¹, Yuxuan Liao^{1,2}, 塩見 淳一郎¹Univ. of Tokyo¹, UCLA², °Masato Ohnishi¹, Yuxuan Liao^{1,2}, Junichiro Shiomi¹

E-mail: ohnishi@photon.t.u-tokyo.ac.jp

シリコンのように熱伝導率の高い材料では、多結晶体やポーラス構造などのナノ構造を用いることで熱伝導を抑制し熱電変換効率向上が可能である。近年 10 nm 程度のネック長を有するナノポーラス構造の作製が実験で可能になっている。このスケールは室温における熱輸送に寄与するフォノン波長と同程度であり、ネック部分において波動性変調効果が生じている可能性がある。そこで本研究では、実験で作製可能な構造と同スケールのモデルを用い、実際のナノポーラス構造におけるフォノン輸送を詳細に解析した。

解析には粒子性・波動性の両方を考慮可能な分子動力学 (MD) 法を用い、図(a)上図に示すように熱流方向にポーラス2つを含む構造の有効熱伝導率 (κ_{eff}) を計算したところ、過去の実験と同様に κ_{eff} がネック長にほぼ比例して増加することが確認された。また、粒子性におけるフォノン散乱のみを考慮した ray-tracing 法やポーラス構造に対応する薄膜構造でも同程度の熱伝導率が得られた。これらの比較は、ネック部分の熱抵抗がポーラス構造の熱抵抗を決定していると考えられるが、ネック部でのバンド変調効果は実質的に無視できることを示唆している。本研究ではさらに、ポーラス構造の局所熱伝導率 (図(b)), フォノン分散 (図(c)), 局所状態密度 (図(d)) など詳細に解析し、ナノポーラス構造におけるフォノン波動性変調効果の可能性を明らかにした。



図：分子動力学を用いたシリコン・ナノポーラス構造におけるフォノン輸送解析。(a) ナノポーラス構造の有効熱伝導率とネック長の関係。青が MD 法，オレンジが ray-tracing 法，緑が薄膜の熱伝導率。点線は過去の実験から得られた近似線 [Nomura et. al. Mater. Today Phys. (2022)]. 薄膜の熱伝導率是对应するポーラス構造の断面積で修正した値。(b) 周期 100 nm, ネック長 2 nm のポーラス構造における熱輸送特性：温度分布と局所熱伝導率（上図），構造全体の熱抵抗に対する割合と累積熱抵抗（下図）。(c) バルク構造と薄膜構造の動的構造因子。(d) ポーラス構造の局所フォノン状態密度。