

モンテカルロ法による n 型 Si のゼーベック係数の算出

Calculation of Seebeck Coefficient of n-Type Silicon Using Monte Carlo Method

阪大院工¹, JST CREST² ○ インドラ ヌル アディスシロ¹, 久木田 健太郎¹, 鎌倉 良成^{1,2}Osaka Univ.¹, JST CREST² ○ Indra Nur Adisusilo¹, Kentaro Kukita¹, Yoshinari Kamakura^{1,2}

E-mail: indra@si.eei.eng.osaka-u.ac.jp

【はじめに】 ナノからメソスケールに及ぶ構造のエンジニアリングによって熱電変換素子の性能向上を目指す研究が数多く報告されており [1]、解析式 [2] や NEGF 法 [3] などの数値シミュレーション技術も活用されている。一方、モンテカルロ (MC) 法は、電子-フォノン相互作用等の散乱過程の詳細な取り込みや複雑な構造の考慮などが可能なため、熱電性能の予測にも有用と考えられるが、比較利用されるケースは少ない。今回我々は、n 型 Si を対象として、熱電性能指数を決める 1 つの要素であるゼーベック係数 S について MC 法を用いた評価を行った。

【シミュレータの概要】 今回、Fig. 1 のようなドナー密度一定の n 型 Si 領域を考え、1 次元ポアソン方程式と結合した電子の MC シミュレータを用いて内部の電位分布を計算した。エネルギーバンドや散乱過程 (音響フォノン散乱とバレー間フォノン散乱を考慮) には Jacoboni ら [4] のモデルを用い、MC 粒子は全ての境界において鏡面反射するものとした。また、ポアソン方程式の境界条件としては、素子両端の電位を 0 に固定した。このような仮定の下で、系内に温度の異なる領域を設定し、熱起電力がどのように発生するのかを調べた。

【シミュレーション結果】 Fig. 2 に定常状態における電位分布のシミュレーション結果を示す。内部にステップ状に高温領域を設けたところ、温度差 $\Delta T = 100$ K による電子濃度の変化が生じ、それに伴う起電力 ΔV の発生が確認された。また、図では 2 種類の N_D に対する結果を比較したが、キャリア濃度による ΔV の相違 (高ドープ領域ほど ΔV が小さい) も定性的には妥当な結果といえる。ただ、 $S = \Delta V / \Delta T$ を見積もったところ、実験結果 [5] と比べて 1 桁近く低い値となった。その 1 つの原因としては、今回考慮していないフォノンドラッグの影響 [6] などが考えられるが、シミュレーション方法や条件の妥当性も含め議論を行う予定である。

【参考文献】

- [1] A. I. Boukai et al., Nature **451**, 168, 2008.
- [2] A. J. Minnich et. al., Phys. Rev. B **80**, 155327, 2009.
- [3] R. Kim et al., J. Appl. Phys. **110**, 034511, 2011.
- [4] C. Jacoboni et al., Rev. Mod. Phys. **43**, 645, 1983.
- [5] T. H. Geballe et al., Phys. Rev. **98**, 940, 1955.
- [6] J. Ma et al., J. Appl. Phys. **112**, 073719, 2012.

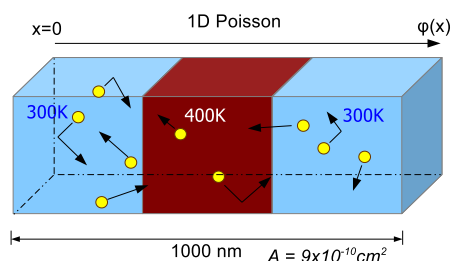


Fig. 1. Simulation domain diagram showing Monte Carlo particles inside a box under the influence of one dimensional Poisson solver.

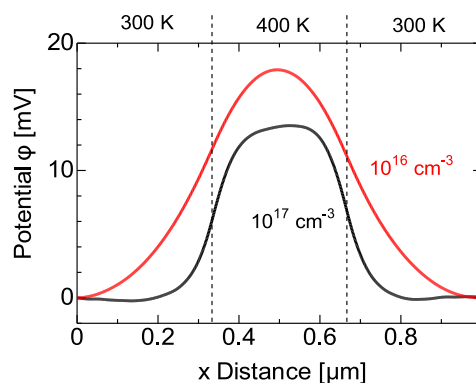


Fig. 2. Results of potential distribution along x-axis for each donor density. $N_D = 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ (Black), $N_D = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ (Red).