

シリコン量子細線における弾道的フォノン熱輸送に与えるドーパント質量の影響

Impact of Dopant Mass on Ballistic Phonon Thermal Transport in Silicon Nanowires

立命館大総研¹, 立命館大理工², JST, CREST³ ○服部 淳一^{1,3}, 宇野 重康^{2,3}Ritsumeikan Univ.¹, JST, CREST² ○Junichi Hattori^{1,2,*} and Shigeyasu Uno^{1,2}

*E-mail: jhattori@fc.ritsumeai.ac.jp

背景 熱電変換デバイスにおける熱電変換効率 η は、デバイスを構成する熱電材料の性能指数 $ZT = S^2\sigma T/(\kappa_e + \kappa)$ に依存している。ここで、 S はゼーベック係数、 σ は電気伝導度、 T は絶対温度、 κ_e は電子熱伝導度、 κ はフォノン熱伝導度である。シリコン量子細線(Si NW)は $T \approx 200$ K で実用化の目安である 1 に迫る ZT を示し [1], 熱電材料として注目されている。しかし、室温($T = 300$ K)における ZT は 0.5 程度であり [1, 2], 実用化には ZT の向上が不可欠である。 ZT を高める方法の一つに、ドーピング濃度の最適化がある。熱電変換デバイスには n 型と p 型の熱電材料が必要であるため、Si NW にはドーピングを施すことになる。 S , σ 及び κ_e はキャリア濃度に依存し、また、それらの依存性は互いに異なるので、高 ZT を実現するための最適なキャリア濃度が存在する [3]。したがって、そのようなキャリア濃度を狙ってドーピング濃度を調節すれば、 ZT を高められるはずである。ここで注意すべきは、 κ もドーピング濃度に依存することである。Si NW 中に導入されたドーパントは、その Si との質量差によって、あるいは、原子半径の違いに由来するひずみによってフォノンを散乱し、熱輸送を妨げる [4]。しかし、このフォノン熱輸送に与えるドーパントの影響については、未だ十分に調べられていない。本研究では、Si NW におけるフォノンによる熱の弾道輸送に与えるドーパントの影響について、特に、その質量の影響に焦点を絞って解析する。

計算 まず、Figs. 1(a) 及び 1(b) に示すような単位胞を持つ ^{28}Si NW について、Fig. 1(c) に示すように無作為に選んだ単位胞中の一部の ^{28}Si を ^{75}As に置換した場合のフォノン分散関係を格子動力学法 [5] によって計算した。ただし、 ^{28}Si から ^{75}As への置換によって変わるのは原子の質量のみとし、平衡位置及び原子間ポテンシャルの形状は変わらないものとした。次に、得られた分散関係から熱コンダクタンス [6] を計算した。その際、フォノンはいかなる散乱も受けず、弾道的に伝導すると仮定した。以上の計算を ^{75}As の数を変えて繰り返し、熱コンダクタンスの変化を調べた。

結果 Fig. 2 に、熱コンダクタンスと ^{75}As の濃度との関係を示す。 ^{75}As の濃度が高くなるにつれて、熱コンダクタンスは小さくなると分かる。これは、純粋な ^{28}Si NW における質量の空間分布の秩序性が、 ^{75}As のドーピングによって損なわれることに起因している。質量分布の秩序性が低下すると、純 ^{28}Si NW では縮退していたフォノンモードが分裂し、分散曲線の傾きが緩やかになる。これは群速度の低下を意味し、このために熱コンダクタンスは低下することになる。

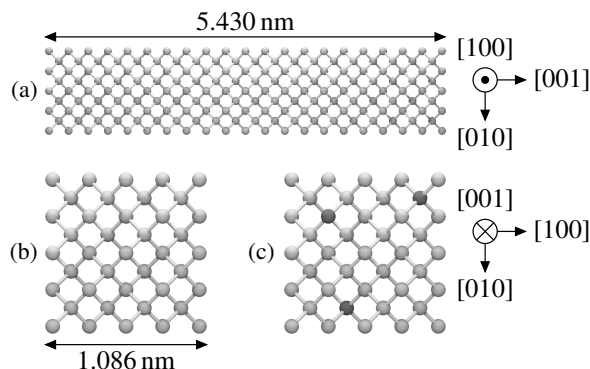


Fig. 1. (a) Unit cell of the Si NWs considered in this work. (b, c) Cross sections of the NWs without and with dopants, which are shown by the dark atoms.

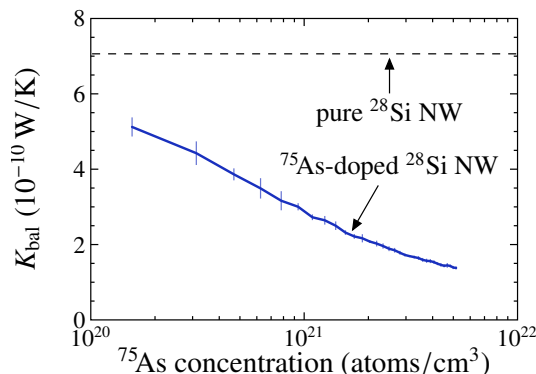


Fig. 2. Ballistic thermal conductance of ^{28}Si NWs randomly doped with ^{75}As , plotted as a function of ^{75}As concentration.

参考文献 [1] A. I. Boukai *et al.*: Nature **451** (2008) 168. [2] A. I. Hochbaum *et al.*: Nature **451** (2008) 163. [3] L. Shi *et al.*: Appl. Phys. Lett. **95** (2009) 063102. [4] M. Asheghi *et al.*: J. Appl. Phys. **91** (2002) 5079. [5] A. Paul *et al.*: J. Comput. Electron. **9** (2010) 160. [6] J. Hattori and S. Uno: Ext. Abstr. Solid State Devices and Materials, 2012, p. 672; to be published in Jpn. J. Appl. Phys.