

InAs ナノワイヤの熱伝導率に関する理論的検討: 回転双晶の影響

Theoretical study for thermal conductivity of InAs nanowires: effects of rotational twins

三重大院工, ○秋山 亨, 中村浩次, 伊藤智徳

Mie University, ○Toru Akiyama, Kohji Nakamura and Tomonori Ito

E-mail: akiyama@phen.mie-u.ac.jp

【はじめに】半導体ナノワイヤは次世代ナノデバイスの構成要素として注目されており、熱電素子としてもその適用が注目されている。特に半導体ナノワイヤにおいては熱伝導率の低減に伴う無次元性能指数 ZT の増大が報告[1,2]されており、化合物半導体ナノワイヤに対しても熱伝導率の測定がなされている。しかし、InAsナノワイヤにおいてその熱伝導率は結晶構造によらずバルクでの値(26 W/m/K at 300 K)より低くなることが報告されている[3]ものの、結晶構造および回転双晶がInAsナノワイヤの熱伝導率におよぼす影響については不明な点が多い。一方、理論的にはSiナノワイヤにおいてコアシェル構造あるいは積層欠陥を導入すると熱伝導率が変化することが提案されている[4]ものの、化合物半導体ナノワイヤの熱伝導率に対する検討はなされていない。そこで本研究ではInAsナノワイヤに注目し、経験的原子間ポテンシャルを用いた分子動力学計算によりInAsナノワイヤ結晶構造および回転双晶の熱伝導率におよぼす影響を検討する。

【結果および考察】Khor-Das Sarma 型の原子間ポテンシャル[5]を用いて、FIG.1 に示すような回転双晶を含んだ(同程度の直径を持つ)ナノワイヤモデルに対して分子動力学計算を実行し、Green-Kubo 公式により熱伝導率を算出する。FIG. 2 は計算によって得られた室温(300 K)における熱伝導率を六方晶性(ウルツ鉱構造の積層順をとる割合)の関数として示したものである。計算によって得られたナノワイヤの熱伝導率は、ナノワイヤ側面の影響によりバルク状態でのそれより低い値をとることがわかる。さらに、回転双晶を含むナノワイヤモデル[FIG. 1(a)および 1(b)]における熱伝導率は完全結晶の場合に比べさらに低い値(~5 W/m/K)をとる。これらの結果は、回転双晶を含むナノワイヤ側面の形状に依存して局在フォノンモードが変化し、それに伴って熱伝導率も大きく変化することを示唆している。

【参考文献】 [1] A. I. Hochbaum et al.: Nature **451** (2008) 163. [2] A. I Boukai et al.: Nature **451** (2008) 168. [3] F. Zhou et al.: Phys. Rev. B **83** (2011) 205416. [4] Y. He et al.: Phys. Rev. Lett. **108** (2012) 215901. [5] T. Ito et al.: Phys. Rev. B **40** (1989) 9715. [5]

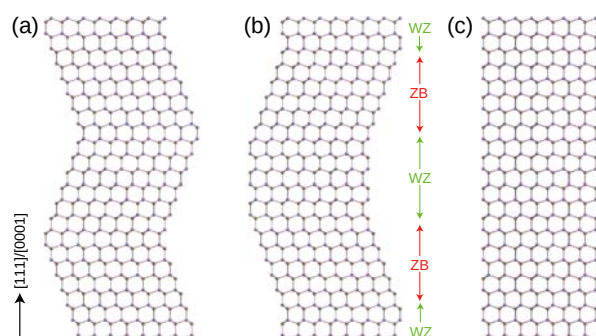


FIG. 1: Models of InAs nanowires with (a) ZB structure, (b) ZB-WZ twin-plane superlattices, and (c) WZ structures.

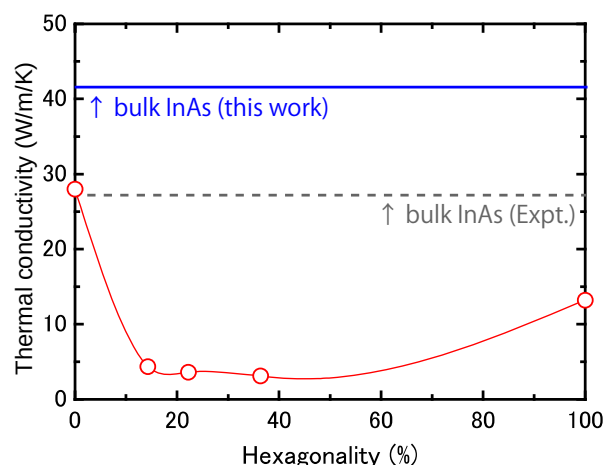


FIG. 2: Calculated thermal conductivity κ at 300 K of InAs nanowires (red circles) as a function of hexagonality. Values of κ in bulk InAs (horizontal lines) are also shown.