

波付きシリコン量子細線における音響フォノンとその熱輸送

Acoustic Phonons and Their Thermal Transport in Corrugated Silicon Nanowires

産総研 ○服部 淳一*, ウラジーミル ポボルチー, 多田 哲也

AIST ○Junichi Hattori*, Vladimir Poborchii, and Tetsuya Tada

*E-mail: j.hattori@aist.go.jp

背景 熱電材料の評価指標である性能指数 ZT が比較的高いことから、シリコン量子細線 (Si NW) は熱電材料としても注目されている [1, 2]. 半導体では熱は主にフォノンによって運ばれる. NW 構造は体積に対して表面積が大きく、表面におけるフォノンの散乱が盛んになるため、熱輸送特性はバルクよりも著しく悪くなる. これによって Si NW の高い ZT が実現している. 最近になって、熱輸送特性を更に劣化させる方法として、角柱状の Si NW に対し、一对の側面を波打たせる方法が提案され、既に実験によって効果が確かめられている [3, 4]. 本研究では、そのような波付き Si NW について、フォノンとそれによる熱輸送を理論的に調べ、波面形状との関係を明らかにする.

方法 まず、波付き Si NW を Fig. 1 のようにモデル化し、その波面形状は正弦関数で表現できると仮定した. 次に、Si NW における音響フォノンの状態を xyz 法 [5, 6] によって計算した. 得られた分散関係からは熱コンダクタンスや熱伝導率といった熱輸送特性を表す物理量が計算できる [7].

結果 Fig. 2 に、波付き Si NW における音響フォノンの分散関係を示す. 分散関係を構成する分枝のうち波数一周波数空間の原点を通過する分枝の原点における傾きは音速に等しい. 一般に、音速は熱輸送特性と正の相関があると考えられている. その音速を Fig. 3 に示す. 波面の振幅が大きくなるほど、また、波長が短くなるほど音速は低下することが分かる. 熱輸送特性も同様の傾向を示すと予想される. 実際に調べた結果については講演にて報告する.

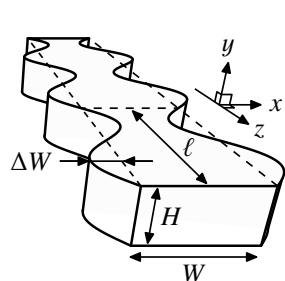


Fig. 1. Schematic view of a corrugated silicon nanowire (Si NW).

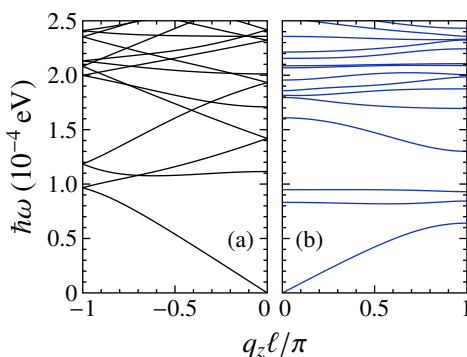


Fig. 2. Acoustic phonon dispersion relations of dilatational modes in a straight (a) and a corrugated (b) Si NW. Their width W and height H were set to $100\sqrt{2}$ nm and $100/\sqrt{2}$ nm, respectively. Also, the corrugation width ΔW and periodicity ℓ were set to $W/4$ and W , respectively. The horizontal axes represent the phonon wavevector along the z -axis, q_z , and the vertical axes the energy, $\hbar\omega$.

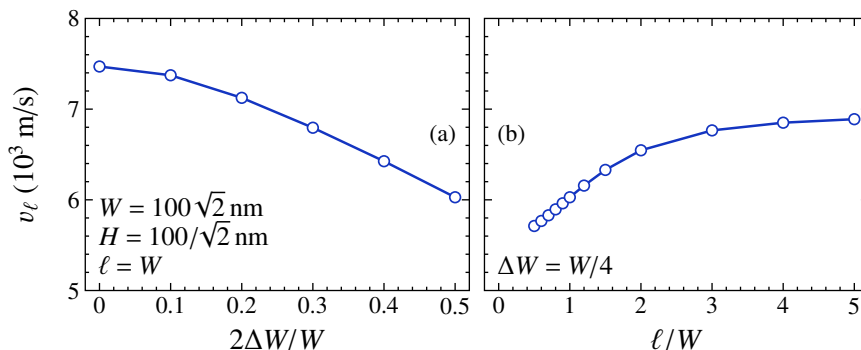


Fig. 3. Longitudinal sound velocity, v_ℓ , in corrugated Si NWs, plotted as a function of ΔW (a) and of ℓ (b).

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] C. Blanc *et al.*: Appl. Phys. Lett. **103** (2013) 043109. [4] V. Poborchii *et al.*: Ext. Abstr. JSAP Autumn Meet., 2014, 19p-A15-2. [5] W. M. Visscher *et al.*: J. Acoust. Soc. Am. **90** (1991) 2154. [6] S. Mizuno and N. Nishiguchi: J. Phys.: Condens. Matter **21** (2009) 195303. [7] J. Hattori and S. Uno: Jpn. J. Appl. Phys. **52** (2013) 04CN04.