

分子動力学法による Si ナノワイヤの熱伝導シミュレーション —波付き構造と酸化被膜の影響の比較—

Molecular Dynamics Simulation of Thermal Conduction in Si Nanowires: A Comparison Between Effects of Corrugated Structure and Oxide film

○小出 隆太¹, 富田 基裕^{1,2,3}, 渡邊 孝信¹ (早大理工¹, 明大理工², 学振特別研究員 PD³)

○R.Koide¹, M.Tomita^{1,2,3}, T. Watanabe¹ (Waseda Univ.¹, Meiji Univ.², JSPS Research PD³)

E-mail: koide@watanabe.nano.waseda.ac.jp

【はじめに】

Si ナノワイヤ(SiNW)の熱伝導率 κ はバルク Si に比べ 1~2 桁ほど低下することが明らかになり、熱電材料の候補材料として注目されている[1]。SiNW であれば、レアメタルを含む従来の主要な熱電材料に比べて大幅にコストを下げる事が可能となるため、熱電変換の普及に拍車をかける可能性がある。当グループはこれまで、酸化膜で覆われた現実的な SiNW を対象に、分子動力学(MD)法を用いて熱伝導率低下のメカニズムを調査してきた[2]。SiO₂/Si 界面付近の Si 格子の乱れによって低エネルギー領域に無秩序なフォノン状態が出現し、その状態密度の増大と熱伝導率低下の間に明確な相関があることを見出している。一方、SiNW における熱伝導率低下は表面フォノン散乱の増大で説明できるという考え方もある。実際、表面に周期的な皺を付けた波付き構造で熱伝導が低下するという報告がなされている[3]。しかし、波付き SiNW でも現実には表面は酸化膜で覆われているはずであり、熱伝導率低下の真の要因が波付き構造にあるのか、酸化被膜の影響にあるのか明確でない。そこで、今回、分子動力学シミュレーションで波付き SiNW 構造の熱伝導率を計算し、酸化被膜の有無の影響を調査した。

【計算方法】

Fig.1 に作製した波付き SiNW のモデルを示す。直径 5.0 nm、長さ 16nm の SiNW モデルを用意し、周期的に深さ $\delta_1=0.8\text{nm}$ の窪みを設けた。窪みのピッチは $\delta_2=4\text{nm}$ 、 8nm の 2 通りに設定した。続いて、SiNW を表面から一原子層ずつ O 原子を挿入して酸化膜を形成した。比較対象として、波付き SiNW の最大直径 5.0nm 径、狭窄部の直径に当たる 3.4 nm 径、および中間の 4.2 nm 径のまっすぐな SiNW モデルも用意した。これらのモデルを用いて、NW の一端に 275 K の低温熱浴、他方の端に 325K の高温熱浴を設けて非平衡 MD シミュレーションを行い、熱伝導率 κ を算出した。原子間相互作用モデルには、当グループが開発した SiO₂/Si 界面用の Extended Stillinger-Weber ポテンシャル[4]を採用した。

【解析結果】

Fig.2 に非平衡 MD 計算で得られた各種 SiNW の熱伝導率の酸化膜厚依存性を示す。いずれの SiNW モデルでも、酸化膜厚の増大に伴い κ が単調に減少した。ピッチ $\delta_2=8\text{nm}$ の波付き SiNW の κ は直径 5.0 nm のストレート NW のそれに近いが、酸化膜厚の増大とともにその差は小さくなった。ピッチ $\delta_2=4\text{nm}$ の波付き SiNW の未酸化時の κ は直径 4.2 nm のストレート NW のそれと近い値だが、酸化膜厚の増大とともに両者は逆転した。未酸化時の波付き SiNW モデルを比較すると、窪みの数が多いモデルで顕著な κ の低下が見られるが、これが表面散乱の増加によるものなのか、単なる SiNW の平均直径の差なのかは区別できない。ただし、波付きの有無によって酸化膜厚依存性に若干の差が見られたことから、波付け加工自体にも、熱伝導率を低下させる効果があると考えられる。講演当日は、フォノン状態密度の変化の解析結果と合わせて、波付け加工と酸化膜が与える影響を議論する。

なお、本研究は JST-CREST の助成を受けて実施した。

[1] A. I. Boukai et al., Nature 451 168 (2008). [2] T.Zushi et al., Phys. Lett. B 91, 115308 (2015). [3] A. L. Moore et al., Appl. Phys. Lett 93, 083112(2008). [4] T.Watanabe et al., ECS 33 (6)901-902 (2010).

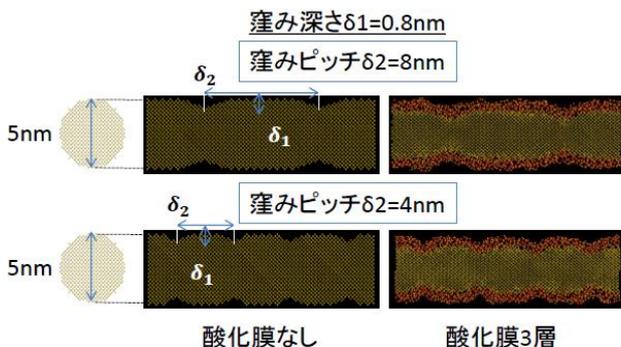


Fig.1 波付き SiNW モデル

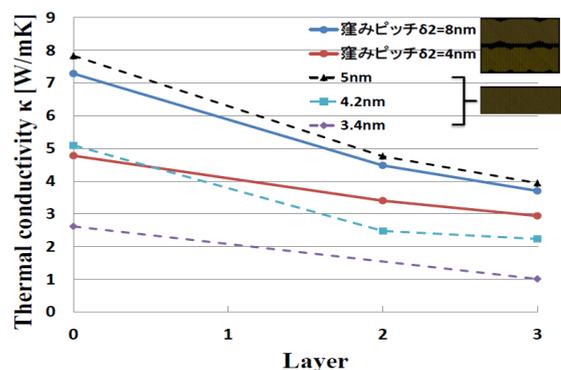


Fig.2 各 SiNW の熱伝導率の酸化膜厚依存性