分子動力学法による低熱伝導率 SiGe 構造の探索

Design of SiGe Alloy with Low Thermal Conductivity: Molecular Dynamics Simulations

富士通研究所　°高橋 憲彦，金田 千穂子

Fujitsu Laboratories Ltd.

°Norihiko Takahashi, Chioko Kaneta

E-mail: n.taka@jp.fujitsu.com

SiGe 系は低環境負荷な熱電変換材料として主に高温領域で用いられており、近年ではナノ構造をデザインし、これを積極的に用いてフォノンを制御し熱伝導率を下げることで性能を向上させる試みもなされている。フォノン熱伝導の制御を効率よく行うためには、原子レベルでの構造と熱伝導率の関係を理解することが重要である。今回我々は、SiGe 混晶系における組成および原子配置のランダムさの違いや、SiGe 積層構造における積層周期の違いが熱伝導率に及ぼす影響について特に着目し、古典分子動力学法を用いて調べた。既存の分子動力学シミュレーションプログラム[1]を拡張し、Tersoffポテンシャル関数[2]を用いた摂動分子動力学法[3]により SiGe 系の熱伝導率計算を行った。

SiGe 系は全率固溶であり、任意の組成の混晶を作成することができる。そこで、種々の組成の SiGe 混晶系に対して Si 原子と Ge 原子の配置をランダムに変えた複数のモデル構造（ユニットセル内の原子数は 1728）を作成し、熱伝導率の計算（温度 T=1000K）を行った。これらモデル構造は、各組成においてとり得る基本単位構造（原子数は 8）のうち、Si-Ge 結合が最も多いものを a、b、c 軸方向に 6 倍し、その中からランダムに選んだ同数の Si 原子と Ge 原子を置換して作成している。また、置換率は 0.1～0.9（各組成における全 Si 原子数と全 Ge 原子数のうち少ない方を 1 とした割合）とした。図 1 に熱伝導率の計算結果を示す。いずれの組成でも、置換率 0 の場合と比較して置換構造の熱伝導率は大幅に（46%～97%）低下していることが分かる。これは、原子配置のランダムさが増したことによりフォノン伝導が低減されるためである。熱伝導率と構造的な特徴との関連性について、組成比をある値に決めた場合（例として Si : Ge = 4 : 4 とする）、その組成における置換率 0.1～0.9 の構造に対する Si-Ge 結合数と熱伝導率の関係を図 2 に示す。図 2 から、Si-Ge 結合数と熱伝導率には相関が見られ、Si-Ge 結合数が少ない構造ほど熱伝導率が低くなっていることが分かる。Si-Ge 結合数が少ないということは Si-Si および Ge-Ge 結合数が多いということであり、結合の分布に偏りがある状態と考えることが出来る。このような結合分布の偏りがフォノン熱伝導を低下させると考えられる。SiGe 積層構造においては、積層周期が大きい場合に熱伝導率が低くなる傾向にあり、混晶系と同程度の低熱伝導率が実現可能である。

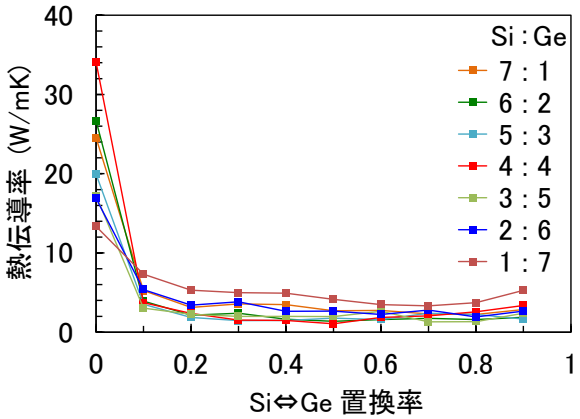

図 1　種々の組成および置換率に対する SiGe 混晶系の熱伝導率

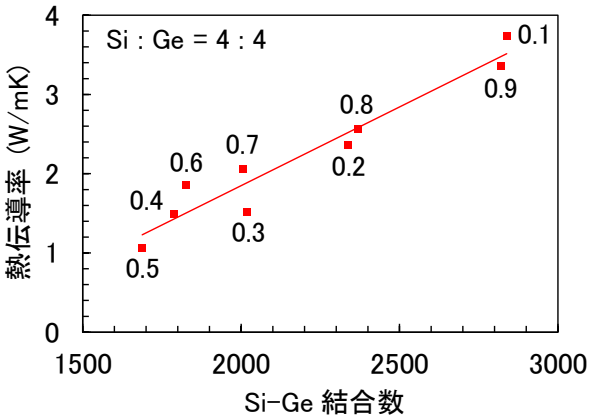

図 2　各置換構造に対する Si-Ge 結合数と熱伝導率の関係（グラフ中の数値は置換率）

[1] SCIGRESS (Fujitsu, 2014), http://jp.fujitsu.com/solutions/hpc/app/scigress/.
[2] J. Tersoff, Phys. Rev. B **37**, 6991 (1988); J. Tersoff, Phys. Rev. B **38**, 9902 (1988).
[3] M. Yoshiya, A. Harada, M. Takeuchi, K. Matsunaga, and H Matsubara, Mol. Simulat. **30**, 953 (2004).

© 2016年 応用物理学会