

フォノン輸送シミュレーションにおける境界条件の影響

Effects of boundary conditions on phonon transport simulation

阪大工 上野 晃弘, 小池 慎治, 森 伸也

Osaka Univ. A. Ueno, S. Koike, and N. Mori

E-mail: {ueno, koike, mori}@si.eei.eng.osaka-u.ac.jp

極微細構造における熱伝導には、フォノン輸送に対する弾道性や波動性が大きな影響を及ぼすと考えられる。そこで、フォノン輸送の弾道性や波動性を考慮可能な非平衡グリーン関数 (NEGF) 法に基づく熱輸送シミュレータの開発を目指し、本研究では、単純な 1 次元および 2 次元調和格子に対する熱輸送解析プログラムを作成した。特に、格子振動に対する境界条件がフォノン輸送シミュレーション結果に与える影響について調べた。

N_x 個の原子からなる 1 次元格子の高温領域における熱コンダクタンス K の長さ依存性を図 1 に示す。1 次元格子は母体原子 A と不純物原子 B から構成され、不純物の密度を $C = N_B / (N_A + N_B) = 0.1$ とし、2 種類の原子質量の比 $M = M_B / M_A$ を 0.5 から 2.0 の間で変化させた。不純物を周期的に配置した場合 (白丸), K は長さによらない弾道性を示した。不純物をランダムに配置した場合 (黒丸), N_x が大きい領域において、フーリエ則に従わず、 $K \propto N_x^{-1/2}$ なる異常拡散性を示した。この様子は、無限長ランダム格子における K の解析式 (赤点線) [1] と良い一致を示すことを確認した。

つぎに、境界条件の影響を調べるため、 $N_x \times N_y$ 個の原子からなる 2 次元単純正方格子 [2] における K の長さ N_x 依存性を調べた。その際、熱浴およびチャンネルの表面の境界条件を、自由端および固定端とした合計 4 種類の組み合わせについて計算を行なった (図 2)。すべての領域で自由端とした場合は、1 次元格子の場合と同様に、 $K \propto N_x^{-1/2}$ なる異常拡散性を示した。しかし、いずれかの表面を固定端とすると、 N_x が大きい領域において、フーリエ則より速く K が減少した。これらの様子は、異常拡散には極低波数のモードが寄与し、高波数モードは局在するためと考えられる。 [1] H. Matsuda and K. Ishii, Suppl. Prog. Theor. Phys., **45**, 56 (1970). [2] D. N. Payton III and W. M. Visscher, Phys. Rev. **154**, 802 (1967).

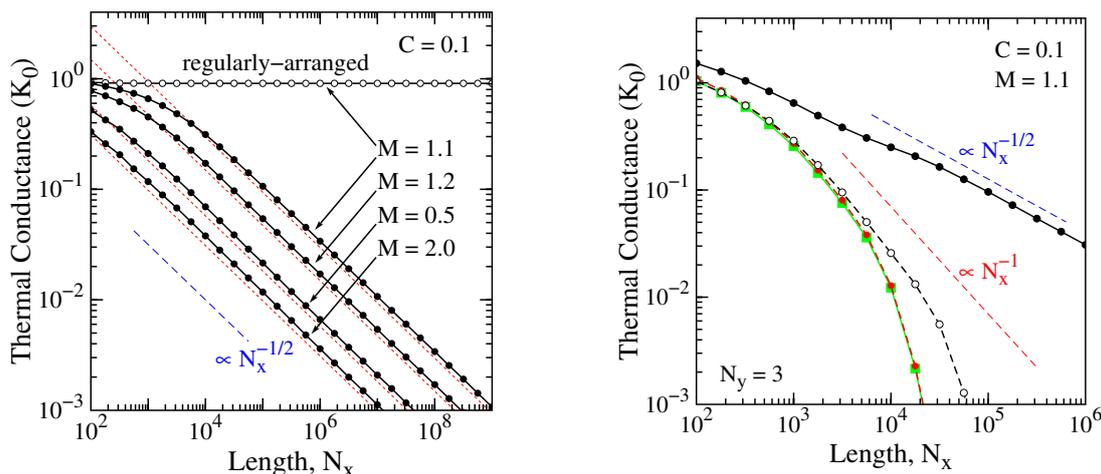


Fig. 1[left]: Length-dependent thermal conductance, K , of 1D atomic chains. Closed circles show K for atomic chains with random impurities and open circles with regularly-arranged impurities.

Fig. 2[right]: Length-dependent K of quasi-1D atomic wires with a width of $N_y = 3$. Black (white) marks show K for free surfaces in the channel and free (fixed) surfaces in the reservoirs; green (red) marks show K for fixed surfaces in the channel and free (fixed) surfaces in the reservoirs.