

マテリアルズ・インフォマティクスを適用した 低熱伝導率 Si/Ge 積層構造の探索

Design of Si/Ge Layered Structure of Low Thermal Conductivity Using Materials Informatics

富士通研究所 ◯高橋 憲彦, 劉 宇, 金田 千穂子

Fujitsu Laboratories Ltd.

◯Norihiko Takahashi, Yu Liu, and 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期待されており、近年ナノ構造界面でのフォノンの散乱を利用して熱伝導率を下げることで性能を向上させる取り組みが活発になされている。熱伝導率を計算により求める手法はいくつかあるが、古典分子動力学法であっても計算コストは非常に大きいため、組成や原子配置が異なる膨大な数の構造一つ一つに対して計算を行うのは現実的ではない。そこで、我々は熱伝導率計算と比較して圧倒的に計算コストが低いフォノンモードの計算を行い、マテリアルズ・インフォマティクス(MI)の手法を適用して低熱伝導率構造の候補を絞り込みながら効率の良い材料設計を行う取り組みを行っている。

MI を適用する際は、記述子をどのように選択するのがポイントの一つとなる。我々はフォノンモードごとの空間的な局在性を表す指標となる Participation Ratio (P 値)[1]に着目し、これを利用して低熱伝導率構造の予測を行っている。前回、同一の積層周期を持ったいくつかの Si/Ge モデル構造に対して、積層方向の熱伝導率と P 値の熱伝導率方向成分が極めて強い相関を持つことを示した[2]。より一般的な積層構造を取り扱うためには、様々な積層周期の構造を含めることが望ましい。そこで今回、対象とする構造の範囲を広げ、異なる積層周期の構造を含む場合の熱伝導率と P 値の相関について調べた。

モデル構造としては、Si 層と Ge 層が計 24 層(ユニットセル内原子数は 1728)からなる Si/Ge 積層構造で、Si 層と Ge 層の積層周期および比率を変化させた全 92 通りの構造を用いる。各構造の積層方向の熱伝導率は、摂動分子動力学法により計算する。P 値の積層方向成分 P_z は、任意の周波数領域に存在するモードに対する値の平均値として評価し、下限値と上限値をそれぞれ独立に変化させて求める。また、今回記述子としては P_z に L の冪乗(L は積層方向の周期長)を掛けたものを用いる。図 1 に、記述子を $P_z L^{-1/2}$ とした場合の各構造の積層方向の熱伝導率、および積層周期の異なる 4 つの構造を例として示す。相関係数の二乗値(R^2)は 0.82 であり、強い相関を持っていることが分かる。このことから、積層構造の探索範囲を広げた場合でも、P 値を用いた低熱伝導率 Si/Ge 積層構造の予測が可能である。

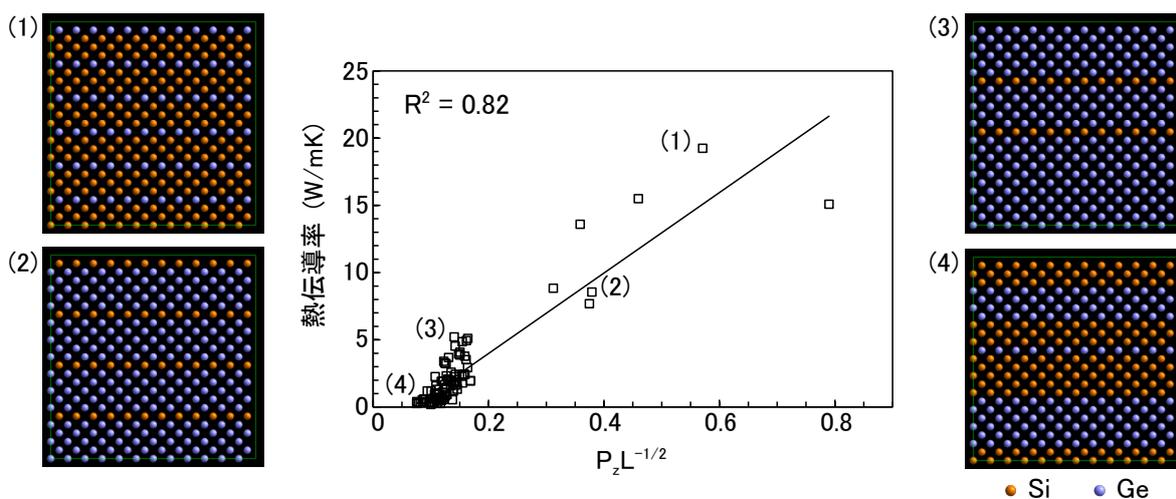


図 1 Si/Ge 積層構造の $P_z L^{-1/2}$ と積層方向の熱伝導率の関係

[1] A. Bodapati et al., Phys. Rev. B **74**, 245207 (2006).

[2] 高橋 他、第 78 回応用物理学会秋季学術講演会 講演予稿集、6a-C22-7 (2017).