

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

Materials Informatics Approach for Design of Si/Ge Layered Nanostructures
with Low Thermal Conductivity

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@fujitsu.com

近年電子機器の小型化が進む中、熱制御の重要性がますます高まっている。熱制御材料はその用途によって様々なものを使用されるが、その中で SiGe 系は主に低熱伝導率材料としての利用が期待されている。SiGe 系のような半導体材料では熱伝導の主な担い手がフォノン(格子振動)であるため、低熱伝導率材料として利用するためにはフォノン熱伝導率の低い材料の設計が必要となる。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 を適用して低熱伝導率材料設計を精度よく行うためには、熱伝導率との相関が強くなるような記述子を選択すること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。今回、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 Si/Ge モデル構造に対して P 値を用いた記述子を構築し、摂動分子動力学法により計算した積層方向の熱伝導率との相関について調べた。その結果、P 値の積層方向成分 P_z に積層方向の周期長 L の冪乗を掛けた値を記述子とすることで、積層方向の熱伝導率との相関が非常に大きくなる($R^2 = 0.82$)ことが分かった(図 1)。このような記述子を用いることで、異なる積層周期の膨大な数の構造の中から低熱伝導率構造の候補を効率良く($10^3 \sim 10^4$ 倍程度速く)絞り込むことが可能となった。

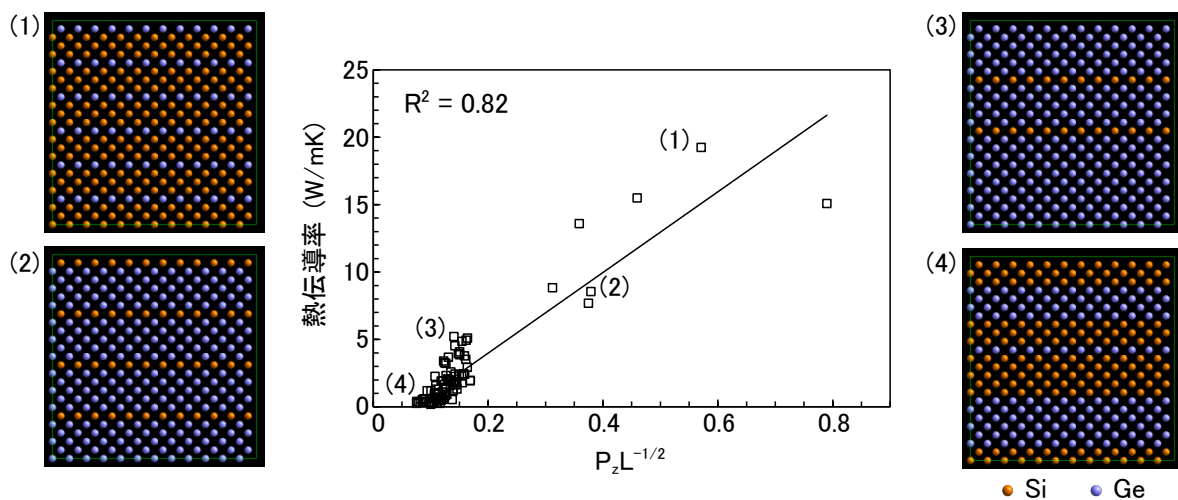


図 1 Si/Ge 積層構造の $P_z L^{-1/2}$ と積層方向の熱伝導率の関係

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