

ひずみシリコン量子細線の熱輸送特性評価における熱浴寸法の影響

Effects of heat bath size on thermal transport characterization of strained silicon nanowires

○服部 淳一 (産総研)

○Junichi Hattori (AIST)

E-mail: j.hattori@aist.go.jp

背景 シリコン量子細線(Si NW)は、ゲート・オール・アラウンド構造による高いポテンシャル制御性から次世代トランジスタのチャネル材料として、また、電荷輸送能力に対する低い熱輸送能力から熱電変換材料としても注目されている。著者らは Si NW の熱輸送特性を数値的に評価し、種々のひずみによって変化することを示した [1–3]。その中で、熱輸送特性の評価結果が Si NW に接続する熱浴の構造に依存することも示した [3]。これは、Si NW と熱浴の界面で起こるフォノン反射を考えれば、その様相は熱浴の構造によっても変わるはずであるから、当然のことと言える。しかしながら、熱輸送特性を評価する際には熱浴の構造にも注意を払わなくてはならないという示唆は重要である。そこで本稿では、熱浴の大きさに注目し、ひずみ Si NW の熱輸送特性の評価結果がそれによってどのように変わるのかを調べる。

方法 まず、Fig. 1 に示すような Si NW の両端に半無限長の熱浴を接続した構造に対し、熱浴の間隔を変えて構造最適化を行い、Si NW に軸方向のひずみを加えた。その際、熱浴の原子は固定した。次に、熱浴間のフォノン透過係数を非平衡グリーン関数法で計算し、熱コンダクタンスを評価した。以上の手順をひずみ、さらに、熱浴の断面積を変えて繰り返し、Si NW の熱輸送能力に与えるひずみの影響が熱浴の断面積によってどのように変わるのかを調べた。

結果 長さ 5.159 nm、断面 1.086 nm × 1.086 nm の Si NW の熱コンダクタンスと軸方向ひずみとの関係を Fig. 2 に示す。熱浴の断面も 1.086 nm × 1.086 nm の場合、ひずみが大きくなるにつれて熱コンダクタンスは小さくなっている。これは、Si NW と熱浴との界面でのフォノン反射が強まるのが主因と考えられる。Si NW の熱輸送能力に与えるひずみの影響は、熱コンダクタンス減少の程度が圧縮ひずみと引っ張りひずみとで異なる部分に現れていると考えられる。熱浴の断面がわずかに大きくなると、熱浴と Si NW とでフォノン・モードの不一致が顕著になり、熱コンダクタンスは大幅に減少する。熱浴の断面が更に大きくなると、熱浴におけるモードが増えることで熱コンダクタンスは回復していくが、完全には回復せず、ひずみの影響も不明瞭なままである。

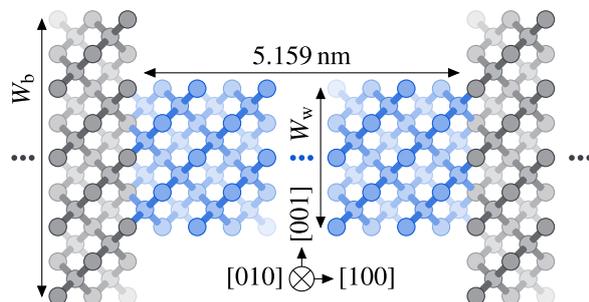


Fig. 1. Side view of a [100]-oriented Si nanowire (NW) connecting two heat baths. The NW and heat baths have square cross sections with side lengths of W_w and W_b , respectively. A strain is applied to the NW parallel to it.

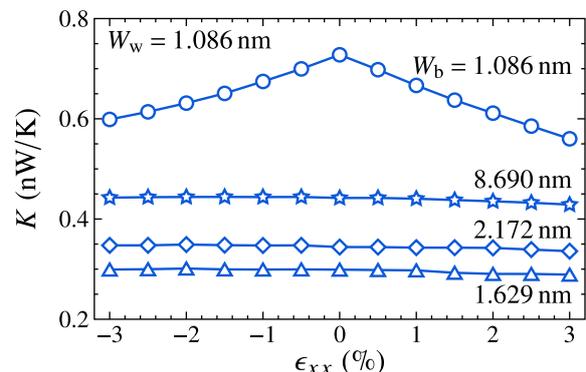


Fig. 2. Thermal conductance of the Si NW as a function of the axial strain calculated for different W_b 's.

謝辞 本研究は日本学術振興会の科学研究費助成事業の支援を受けたものである (20K04611)。

参考文献

- [1] J. Hattori *et al.*, Jpn. J. Appl. Phys. **55**, 04EP07 (2016).
- [2] J. Hattori, Ext. Abstr. JSAP Autumn Meet., 2018, 21a-135-9 [in Japanese].
- [3] J. Hattori, Ext. Abstr. JSAP Spring Meet., 2019, 10p-W934-11 [in Japanese].