## 分子動力学法を用いた SiGe 混晶内の低エネルギー局在フォノンの振動モード解析

Vibration Mode Analysis of Low Energy Localized Phonon in SiGe by Molecular Dynamics

早大理工<sup>1</sup>,明大 MREL<sup>2</sup>,明大理工<sup>3</sup>,<sup>O</sup>富田 基裕<sup>1,2</sup>,Sylvia Yuk Yee Chung<sup>1</sup>,

## 横川 凌<sup>2,3</sup>, 小椋 厚志<sup>2,3</sup>, 渡邊 孝信<sup>1</sup>

Waseda Univ.<sup>1</sup>, MREL<sup>2</sup>, Meiji Univ.<sup>3</sup>, °M. Tomita<sup>1,2</sup>, S.Y.Y. Chung<sup>1</sup>,

R. Yokogawa<sup>2,3</sup>, A. Ogura<sup>2,3</sup>, and T. Watanabe<sup>1</sup>

## E-mail: tomita\_motohiro@watanabe.nano.waseda.ac.jp

【はじめに】IV 族混晶半導体は、合金散乱による低い熱伝導特性を有し、バンドチューニングに よるキャリア移動度の向上も可能であることから、熱電変換材料として高い潜在能力を持ってい る。近年、非弾性X線散乱法により、SiGeのフォノン分散関係を評価したところ、低エネルギー 側に一般的な光学・音響モードとは異なる新たなモードが存在することが明らかになった[1]。ま た、この振動モードが MD 法による計算でも再現できていることも確認できている。しかしなが ら、この新たなモードがどのように振動していて、SiGe の熱伝導率の低さとどのように関係して いるのか明らかにできていなかった。フォノン振動モードの解析は一般的に動力学行列の固有値 計算で行われるが、原子配置のランダム性が重要な SiGe では実在しないフォノンも導出されるた め、解析が困難であった。そこで、本研究では分子動力学(MD)計算とフーリエ解析によって上記 振動モードの平均二乗変位を求め、その振動状態を解析した。

【計算モデル】Si<sub>0.8</sub>Ge<sub>0.2</sub>混晶モデルについてMD計算を行った。計算に用いたモデルをFig.1に示す。 サイズは単位格子30×4×4個分で、3次元周期的境界条件を課している。原子間ポテンシャルについ てはStillinger-Weberポテンシャルを用いた[2,3]。フォノンの分散関係はMD計算から得られた原子 運動履歴から動的構造因子を求めることにより解析した[3,4]。また、フォノンモードの平均二乗 変位は各原子の変位履歴に対してフーリエ変換、バンドパスフィルタ、逆フーリエ変換を作用さ せることで抽出した。

【結果】Fig.2に(a)Si原子および(b)Ge原子のフォノン分散関係(PDR)、(c)「点におけるGe原子のフォ ノン状態密度(DOS)、(d)SiGe構造の断面図、(e)「点3 THzのフォノン振動(Fig.2bの青×印で表示)に 対する平均二乗変位をそれぞれ示した。PDRを見ると、非弾性X線散乱法によって観測されていた、 2~4 THzの領域に波数分散のない、水平かつブロードなモードがMD計算の結果でも存在している ことがわかる。このモードはSiおよびGe原子どちらにも見られるが、Ge原子の方がDOSが大きく、 低エネルギーの振動モードはGe原子が主体ではないかと予測できる。次に、「点3 THzのフォノン 振動に対する平均二乗変位を見ると、Siに囲まれたGeの一部が特に振動しており、それぞれの振 動が点在しているように見える。以上の結果より、低エネルギーのフォノンモードはフォノン分 散が水平であること、平均二乗変位の大きい部分が点在していることから、SiGeの熱伝導率低減 に関与していると考えられる。今後は、この振動モードの群速度や緩和時間などの解析を行って いく。

【謝辞】本研究は、JST-CREST (JPMJCR19Q5)およびJSPS科研費・若手研究(20K14793)、科研費・ 研究活動スタート支援(20K22418)により補助を受けて実施された。

[1] R. Yokogawa et al., APL 116, 242104 (2020). [2] F. Stilinger et al., PRB 38, 5262 (1985).

[3] M. Tomita et al., JJAP 57, 04FB04 (2018). [4] J.A. Thomas et al., PRB 91, 115308 (2015).



Fig.1 Schematic of Si<sub>0.8</sub>Ge<sub>0.2</sub> model. and distribution of Ge clusters.

Fig.2 Phonon dispersion relationship (PDR) of (a) Si and (b) Ge atoms, (c) Ge-DOS, (d) X-section of model, and (e) displacement intensity of 3 THz.