

非対称欠陥を有するグラフェンナノリボンの熱整流効果の 非平衡分子動力学法による数値解析

Numerical analysis of thermal rectification effect in graphene nanoribbons
with asymmetric defects using nonequilibrium molecular dynamics

北大院工 〇(M2)平 翼玖, 田中 之博

Hokkaido Univ. 〇(M2)Tasuku Taira and Yukihiro Tanaka

E-mail: tasuku1203@eis.hokudai.ac.jp

近年, 半導体素子の高集積化技術の発展により, 多くのデバイスが高性能化を遂げている. しかし, 高集積化に伴い, 熱雑音による問題が無視できなくなるため, 性能の向上は制限される. その解決方法の1つは, 高い熱伝導率と熱整流効果



Fig.1. GNR with a triangular

を持つ物質をヒートシンクとして用いることであり, グラフェンナノリボン (GNR) はその有力な候補であると期待される. グラフェンナノリボンは, 炭素原子がハニカム格子状に並んだ2次元物質であり, sp^2 結合によって強固に結合しているため, 機械的強度や熱伝導性が非常に高い. 従来の研究では, 不純物や点欠陥を持つものや, 形状自体を非対称にしたものに対して, 熱整流効果の数値シミュレーションが数多く行われているが, Fig. 1のような, 三角形の非対称欠陥を導入した系はあまり取り扱われていない. この欠陥は弾性波において, 種々の振動モードに対し, 高い整流効果が得られることが報告された[1]. 本研究の目的は, 非平衡分子動力学法を用いて, 三角形の構造欠陥が, 熱の整流に対して有効か否かを調べることである. 系の平均温度を 300 K, 熱浴の温度を ± 10 K と設定し, 幅 10 nm, 長さ 10 nm のグラフェンナノリボンに対し, シミュレーションを行ったところ, 整流効率はほぼ 0 であった. さらに, 欠陥のサイズや系の平均温度を変化させたが, 単一の三角形欠陥では整流効率の上昇は見られなかった. そこで, Fig. 2 に示すように, 三角形の底辺近傍に切り込みのような欠陥を加えた. この欠陥配置は, フォノンの経路を制限し, 三角形欠陥の影響を強める効果が期待される. 結果として, 整流効率の向上が見られたため, 系の平均温度や熱浴の温度差を変化させ, 最適化を図った. 講演では上記についての詳細を述べる.

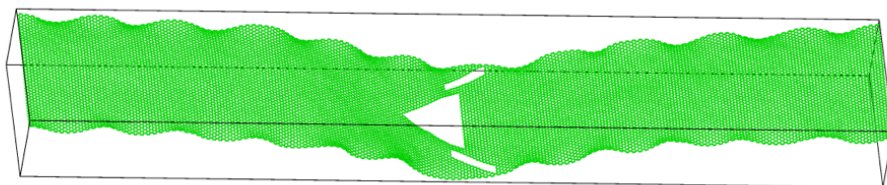


Fig.2. Vibration behavior of a GNR with the improved scatterer configuration

[1] Y. Tanaka, D. Kono and N. Nishiguchi, Jpn. J. Appl. Phys. **55**, 104301 (2016)