

アモルファス GeS/単結晶 PbTe 界面における熱輸送機構

Heat transport mechanism in the amorphous GeS/ single-crystalline PbTe interface

阪大院基礎工¹, 阪大院工², 静岡大³

○石部 貴史¹, 吉矢 真人², 中嶋 聖介³, 石田 明広³, 中村 芳明¹

Grad. School of Eng. Sci.¹, Grad. School of Eng.², Shizuoka Univ.³

○Takafumi Ishibe¹, Masato Yoshiya², Seisuke Nakashima³, Akihiro Ishida³, Yoshiaki Nakamura¹

E-mail: ishibe.takafumi.es@osaka-u.ac.jp

【背景・目的】近年、電子デバイス内での発熱がデバイス性能を劣化させるため、効率的な放熱方法の確立が求められている。放熱を妨げる要因は、デバイス内のナノスケール界面の高い熱抵抗にある。そこで、界面熱抵抗低減に向けて様々な研究が行われている[1]。従来研究では、ある界面に特化した計算が行われているが、実際には歪や欠陥があり、現実の系に対して界面熱抵抗を予測することは難しい。このため、我々は、歪や欠陥の無い理想的界面を用いて普遍的な界面熱輸送物理を明らかにすることを目指した。通常、異なる結晶間の界面では、格子不整合により歪、欠陥が形成され、普遍的・汎用的物理の構築は難しくなる。そこで、格子不整合の無いアモルファス/結晶界面に注目した。ここでは、歪、欠陥がほぼ無いため、アモルファス材料、結晶材料の状態を考慮するだけで単純に理解が可能と考えた。本研究では、アモルファス GeS/単結晶 PbTe 積層膜を作製し、その界面における熱輸送を理論・実験両面で理解することを目的とする。

【実験方法】GeS/PbTe 積層構造はホットウォールエピタキシー法を用いて形成された。まず BaF₂(111)基板を 500°C で 10 分間、脱ガスした後、初期層として PbS/Ca 積層膜を 10 nm 形成した。その後、基板温度 300°C にて PbS/GeTe 積層膜（周期長：30, 70, 80 nm）を形成した。この PbS/GeTe 積層膜を 350°C で 10 分間、真空中でアニール処理することで、元素置換を引き起こして GeS/PbTe 積層膜を作製した。構造評価には、透過型電子顕微鏡法（TEM）、X 線回折法（XRD）を、熱抵抗（熱伝導率）計測には 2 ω 法を用いた[2]。熱輸送理解のため、格子動力学法を用いて、PbTe, GeS のフォノン状態密度、群速度を計算した。

【結果】TEM, XRD 観察より、GeS、PbTe はそれぞれアモルファス、単結晶であることが分かった。周期長の異なる GeS/PbTe 積層膜の熱伝導率を計測したところ、GeS の高い熱抵抗のため、周期に依存せず同等の値を示した。周期長と熱抵抗の関係より、GeS/PbTe 界面熱抵抗は $< 10^{-9} \text{ m}^2\text{KW}^{-1}$ と算出され、既存材料の最小値に近い値であった[3]。本講演では、この極小界面熱抵抗の成因について、理論を元に詳細に議論する。

【謝辞】本研究の一部は科研費 基盤研究 A（JP19H00853）、新学術領域研究（JP19H05786, JP20H05191）の支援により行われた。

【参考文献】[1] A. Ota, et al., *ACS Appl. Mater. Interfaces* **11**, 37295 (2019)., [2] T. Ishibe, et al., *Appl. Phys. Lett.* **118**, 151601 (2021). [3] T. Ishibe, et al., *Commun. Phys.* **4**, 153 (2021).