レイ・トレーシングモンテカルロ法を用いた

二次元フォニック結晶の熱伝導解析

Heat conduction analysis of two-dimensional phononic crystals
by using the ray-tracing Monte Carlo method砂子 直信 (東京大) 森田 路真 (東京大) 正 堀 琢磨 (農工大)
正 柏木 誠 (青学大, さきがけ) ○正 志賀 拓磨 (東京大, さきがけ)
Tadanobu Sunago¹, Michimasa Morita¹, Takuma Hori², Makoto Kashiwagi^{3,4}, and Takuma Shiga^{1,4}¹The University of Tokyo, 7-3-1 Hongo, Bunkyo, Tokyo, 113-8656, Japan²Tokyo University of Agriculture and Technology, Naka-cho 2-24-16, Koganei, Tokyo, 184-8588, Japan³Aoyama Gakuin University, 5-10-1, Fuchinobe, Chuo, Sagami-hara, Kanagawa, 252-5258, Japan⁴PRESTO, Japan Science and Technology Agency, Kawaguchi, Saitama, 332-0012, Japan*Key Words:* thermal phononics, heat conduction, ray-tracing, lattice dynamics

1. 緒言

周期的な空孔を有する二次元フォニック結晶(Phononic Crystal, 2D-PnC)では、空孔-母材間界面で散乱されたフォノン同士の相互干渉によって大幅な熱伝導率低減が見込めることから、熱電変換などへの応用が期待されている⁽¹⁾。構造周期(a)と空孔直径(D)の差をネック長(n)とすると(Fig. 1 挿図), 2D-PnC の熱伝導率(κ)は n に対して単調的に減少することが実験的に知られているが、この傾向がフォノンの波動性と粒子性、どちらの性質で説明できるかは明らかではない。本研究では、レイ・トレーシング・モンテカルロ(Ray-tracing Monte Carlo, RTMC)法⁽²⁾を用いて 2D-PnC の熱伝導率のネック長依存性を計算することで、フォノンの粒子性のみで説明できるネック長領域の同定を行った。

2. 方法論

2D-PnC は膜厚や孔径など複数の特徴長さを有するため、2D-PnC の熱伝導率を解析的に求めることは容易ではない。本研究では、任意の構造体におけるフォノン粒子の実効的な平均自由行程(Λ_{eff})を計算する方法であるRTMC法を採用した。空孔-母材間と薄膜表面におけるフォノン散乱は拡散的であり、Hashin and Shtrikman⁽³⁾の補正係数を用いて、熱伝導における空隙の影響を考慮した。

3. 結果・考察

RTMC法で計算した Λ_{eff} を用いて計算した2D-PnCの κ のネック長依存性をFig. 1に示す。いずれの a においてもネック長が短くなるほど κ は単調的に減少し、 a が小さくなると κ は短ネック領域にシフトすることがわかった。 $a=100$ nmの場合、 $n=30$ nmまでの領域ではRTMCと実験が一致しているが、 $n>30$ nm領域の実験結果を再現できないこと、さらには同じ膜厚でも a によって実験と計算に大きな差があることが明らかになった。フォノンの粒子性のみで説明できるネック長領域を同定するためには、 a や n を系統的に変えた計算が必要である。

参考文献

- (1) M. Nomura, *et al.*, Jpn. J. Appl. Phys., 57 (2018) 080101.
- (2) T. Hori, *et al.*, Appl. Phys. Lett., 106 (2015) 171901.
- (3) Z. Hashin and S. Shtrikman, J. Appl. Phys. 128 (2006) 75.

Fig. 1 Neck-size dependence of thermal conductivity (κ) of 2D-PnCs at $T=300$ K. Marks are experiments⁽¹⁾ and solid lines are RTMC results. The inset figure shows the schematic of 2D-PnC. a and t denote periodicity and thickness of 2D-PnCs, respectively.