

分子科学研究所¹, JST さきがけ² ○南谷英美^{1,2}

電子デバイスにおける発熱は、性能劣化やエネルギー損失の原因として、その対策が常に求められている。この問題を解決するために欠かせない項目が、熱の発生と輸送過程のミクロスコピックな解析である。半導体結晶における熱の発生は、電子-フォノン相互作用によって電子のエネルギーがフォノンに緩和する過程で生じる。熱の輸送は、励起されたフォノンがフォノン-フォノン相互作用を通じて、熱伝導を担う音響モードに緩和し、それが温度勾配によってヒートシンクへと拡散することで生じる。現実物質に対して、これら熱の発生と輸送を担う準粒子間の相互作用を高精度に求めることができる技術が第一原理計算である。本講演では、I) 第一原理計算を用いたジュール熱の発生過程の解析と、II) 第一原理計算とデータサイエンス技術を用いた熱伝導解析の研究を紹介する。

I) 第一原理計算を用いたジュール熱の発生過程の解析

電子-フォノン相互作用は、最大局在化ワニエ関数法との組み合わせにより、現在、フォノン誘起超伝導の転移温度や、半導体での移動度を実験と比較できるレベルで計算できる段階に至っている。この計算技術をジュール熱の発生過程の解析に応用することを行った。電界で加速された電子が生じる非平衡分布を高温の電子系の分布であると近似することで、ボルツマン輸送理論の範疇で、電子からフォノンへのエネルギー移動を計算した。電子フォノン相互作用を含め、方程式内のパラメータをすべて第一原理計算することで、具体的な発熱素過程の解析を可能にした。この方法論をSi結晶に応用した結果、ドリフト速度の電界依存性を良く再現し、また、電子キャリアとホールキャリアでは発熱素過程が異なることが判明した¹⁾。

II) 第一原理計算とデータサイエンス技術を用いた熱伝導解析

結晶における熱伝導率は、ボルツマン輸送方程式に基づく、フォノン-フォノン相互作用によって生じるフォノン緩和時間を求めることで得られる。この計算には、3次の力の定数の情報が必要となる。これは、3つの原子を平衡位置から動かした際に生じる力の情報から得られるため、計算する構造のバリエーションが莫大になる。第一原理計算による熱伝導率計算では、この多数の構造に対する計算コストがボトルネックとなる。そこで、第一原理計算によって得られる構造と力の関係を模倣する、機械学習ポテンシャルを作成し、それを使って3次の力の定数を計算することで、熱伝導率計算を高速に行う手法を開発した。その手法をSiとGaIn結晶に応用した結果、第一原理計算と遜色ない精度で熱伝導率の計算が行えることを示した²⁾。

熱伝導の問題は、アモルファスに代表される周期性を欠いた乱れた構造においても重要である。乱れの度合いが強い場合の熱伝導は、寿命を持ったフォノンの伝搬という準粒子描像で扱うことは適切ではない。このような系でも用いることができる久保公式に基づいた手法として、Allen-Feldman理論がある。Allen-Feldman理論の利点は、格子振動の固有状態が分かれば熱伝導率を計算することができる点である。そこで、アモルファスカーボンの構造と、その格子振動を第一原理計算から求め、熱伝導率を計算した。炭素原子の密度が低い系での熱伝導率は、実験と比較的一致したが、密度が高くなるにつれ、実験値との乖離が見られた。これはAllen-Feldman理論では扱いきれない伝搬モードの影響と考えられる。伝搬モードの寄与を扱いきれない問題はあるが、第一原理計算に基づいてアモルファスでの熱伝導率を議論できる可能性を示す結果である。また、得られた構造と熱伝導率の関係を、トポロジカルデータ解析の技術の一つ、パーシステントホモロジーを用いて回帰できることも発見した³⁾。

謝辞

II)の研究内容は、小倉正義、渡邊聡、志賀拓磨、柏木誠、大林一平（敬称略）との共同研究である。

参考文献

- 1) E. Minamitani, Phys. Rev. B, 104, 085202 (2021)
- 2) E. Minamitani, M. Ogura, S. Watanabe, Appl. Phys. Express, 12, 095001 (2019)
- 3) E. Minamitani, T. Shiga, M. Kashiwagi, I. Obayashi, submitted