

22 Joint Session M "Phonon Engineering" Oral presentation : 22.1 Joint Session M "Phonon Engineering"

[7a-N105-1~6] 22.1 Joint Session M "Phonon Engineering"

[7a-N105-1]

Observation of nonvolatile magneto-thermal switching in superconducting Pb/Fe-based composites

○(M2)Yui Sakamoto^{1,2}, Fuyuki Ando², Takamasa Hirai², Hossein Sepehri-Amin^{1,2}, Keigo Ito^{2,3}, Ken-ichi Uchida^{1,2,3} (1.Univ. Tsukuba, 2.NIMS, 3.Univ. Tokyo)

[7a-N105-2]

Nonvolatile magneto-thermal switching controlled by the formation of microstructure in superconducting Sn/Pb multilayered composites

○(M1)Keigo Ito^{1,2}, Fuyuki Ando², Hossein Sepehri-Amin^{2,3}, Yui Sakamoto^{2,3}, Takamasa Hirai², Yuto Watanabe⁴, Yoshikazu Mizuguchi⁴, Ken-ichi Uchida^{1,2,3} (1.The Univ. of Tokyo, 2.NIMS, 3.Univ. of Tsukuba, 4.Tokyo Metropolitan Univ.)

[7a-N105-3]

Effect of 4f electrons on the thermal conductivity for rare-earth oxides

○Mitsuki Yoshimura¹, Kwanhong Park², Jaekwang Lee², Jeonghoon Cho³, Hyejin Jang³, Ichiro Terasaki⁴, Ahrong Jeong⁵, Hiromichi Ohta⁵ (1.IST-Hokkaido Univ., 2.Pusan Nat'l Univ., 3.Seoul Nat'l Univ., 4.Nagoya U., 5.RIES-Hokkaido U.)

[7a-N105-4]

Heat conduction characteristics of strain-controlled epitaxial Ge_{1-x}Sn_x film/Si

○Arata Shibagaki¹, Ryosuke Hotta¹, Tsukasa Terada¹, Takafumi Ishibe¹, Yuichiro Yamashita², Yoshiaki Nakamura¹ (1.The University of Osaka, 2.AIST)

[7a-N105-5]

Low-temperature thermal conductivity of heavily doped Silicon measured using 3ω method

○(M1)Kazuki Watanabe¹, Keito Yoshinaga¹, Ryo Toyoshima¹, Ken Uchida¹ (1.The University of Tokyo)

[7a-N105-6]

Development of a measurement method for in-plane thermal diffusivity in thin films using a striped heating pattern (2): Evaluation of in-plane thermal diffusivity in Mo and Al films

○Hiroto Arima¹, Takashi Yagi¹, Yuichiro Yamashita¹ (1.AIST)

超伝導 Pb-Fe 複合物質における不揮発性磁気熱スイッチングの観測

Observation of nonvolatile magneto-thermal switching

in superconducting Pb/Fe-based composites

筑波大数理¹, NIMS², 東大新領域³

○(M2)坂本 結衣^{1,2}, 安藤 冬希², 平井 孝昌², Hossein Sepehri-Amin^{1,2},

(M1)伊藤 圭吾^{2,3}, 内田 健一¹⁻³

Univ. Tsukuba¹, NIMS², Univ. Tokyo³

°Yui Sakamoto^{1,2}, Fuyuki Ando², Takamasa Hirai², Hossein Sepehri-Amin^{1,2},

Keigo Ito^{2,3}, and Ken-ichi Uchida¹⁻³

E-mail: SAKAMOTO.Yui@nims.go.jp

磁気熱スイッチング (magneto-thermal switching: MTS) は磁場や磁性体の磁化に依存して熱伝導率が変化する現象・機能であり、機械的な動作を必要としない次世代熱マネジメント技術の候補原理となり得る。MTS は様々な導体で観測され、特に超伝導体においては磁場印加による顕著な熱伝導率変化が生じる[1]。一般に、超伝導状態では電子がクーパー対を形成して電子熱伝導が抑制されるため、低熱伝導率を示す。一方、常伝導状態では電子熱伝導が回復するため、高熱伝導率を示す。この特性により、超伝導体では巨大な MTS が観測される。近年、Sn-Pb ハンダにおいて、超伝導臨界磁場以上の磁場印加によって生じた熱伝導率変化が、磁場除去後も維持できる現象「不揮発性 MTS (Nonvolatile MTS: NMTS)」が報告された[2]。この起源は、Sn-Pb ハンダ中の相分離した Sn 領域における磁束トラップだと考えられている。磁場除去後、Pb と Sn の超伝導臨界磁場の差によって Pb 領域は超伝導状態に戻る一方、Sn 領域は常伝導状態を維持し、結果として Sn-Pb ハンダ全体が高熱伝導率を維持する。したがって、NMTS の発現には磁場除去後の超伝導状態と常伝導状態の共存が重要であることが示唆された。しかし、これまでに NMTS が観測された物質は Sn-Pb ハンダのような両元素が超伝導を示す複合物質に限定されている。

本研究では NMTS の発現に関与する常伝導領域 (磁束トラップ領域) に着目し、磁性体を導入した複合物質を作製し、MTS 特性を調査した。強磁性体微粒子を超伝導体中に埋め込んだ複合物質においては、微粒子領域への磁束トラップや、強磁性体の磁化からの漏れ磁場によって局所的な常伝導領域の形成が期待できる。本研究では典型的な超伝導体 Pb と強磁性体 Fe を組み合わせた Pb-Fe 複合物質を作製し、低温領域における熱伝導率の磁場依存性を評価した。測定の結果、数%の Fe 粉末を分散させた複合物質において磁場除去後も高熱伝導率が維持され、NMTS が観測された。講演では、Fe 粉末の混合比・粒径依存性について調査した結果を報告する。

[1] M. Yoshida et al., J. Appl. Phys. **134**, 065102 (2023).

[2] H. Arima et al., Commun. Mater. **5**, 34 (2024).

超伝導 Sn/Pb 多層複合材料における不揮発性磁気熱スイッチングの微細構造形成による制御

Nonvolatile magneto-thermal switching controlled by the formation of microstructure in superconducting Sn/Pb multilayered composites

東大新領域¹, NIMS², 筑波大数理³, 都立大理⁴ ○(M1)伊藤 圭吾^{1,2}, 安藤 冬希², Hossein Sepehri Amin^{2,3}, (M2)坂本 結衣^{2,3}, 平井 孝昌², (D1)渡邊 雄翔⁴, 水口 佳一⁴, 内田 健一^{1,2,3}

The Univ. of Tokyo¹, NIMS², Univ. of Tsukuba³, Tokyo Metropolitan Univ.⁴ °Keigo Ito^{1,2}, Fuyuki Ando², Hossein Sepehri-Amin^{2,3}, Yui Sakamoto^{2,3}, Takamasa Hirai², Yuto Watanabe⁴, Yoshikazu Mizuguchi⁴, and Ken-ichi Uchida^{1,2,3}

E-mail: ito-keigo131@g.ecc.u-tokyo.ac.jp

熱マネジメント技術において、効率的に熱流の制御を行うことは電子デバイス性能の向上やエネルギー高効率利用の観点において非常に重要である。その中でも、機械的な動作を必要とせず外部磁場または内部磁化方向の操作によって固体の熱伝導率を制御できる「磁気熱スイッチング(magneto-thermal switching: MTS)」は、能動的に熱流を制御できる原理として盛んに研究されている。特に超伝導体においては、超伝導状態におけるクーパ対の形成による電子熱伝導の抑制と、常伝導状態における電子熱伝導の回復によって巨大な MTS が観測される[1]。これに関して、臨界磁場を超える外部磁場を印加して常伝導状態に変化させた後、消磁して超伝導状態に移した後も高い熱伝導率が持続する「不揮発性 MTS(Nonvolatile MTS: NMTS)」現象が第一種超伝導体の相分離系である Sn-Pb ハンダにおいて報告された[2]。Sn-Pb ハンダにおける NMTS は、印加した外部磁場を除去した際に臨界磁場がより小さい Sn の領域に磁束がトラップされ、常伝導状態を維持した Sn と超伝導状態に変化した Pb が共存することによって発現すると考えられている。しかしながら、これまで磁束トラップと NMTS の相関について系統的に調査した実験例はない。

そこで本研究では、Sn/Pb 多層複合材料においてその微細構造を制御し、磁束トラップ量と NMTS の相関を系統的に調査した。第一種超伝導体である Sn および Pb の等純度かつ等体積の金属板を出発物質とし、アニール処理、圧延接合、圧延後試料の切断と積層のサイクルを繰り返す「繰り返し重ね接合圧延法」[3]を用いて Sn/Pb の多層複合材料を作製し、繰り返し数によって微細構造を制御した。この試料に対し、低温における熱伝導率の磁場依存性と磁化過程の関係性を評価した。講演では、繰り返し数による磁束トラップ量変化と NMTS 変化の相関について議論する。

参考文献

[1] M. Yoshida et al., J. Appl. Phys. **134**, 065102 (2023).

[2] H. Arima et al., Commun. Mater. **5**, 34 (2024).

[3] Y. Saito et al., Scripta. Mater. **39**, 9 (1998).

希土類酸化物の熱伝導率に及ぼす 4f 電子の影響

Effect of 4f electrons on the thermal conductivity for rare-earth oxides

北大院情報¹, 釜山大物理², ソウル大材料³, 名大物理⁴, 北大電子研⁵,

○吉村充生¹, パククワンホン², イジェガン², チョジョンフン³, ジャンヘジン³,

寺崎一郎⁴, ジョンアロン⁵, 太田裕道⁵

¹IST-Hokkaido U., ²Pusan Nat'l U., ³Seoul Nat'l U., ⁴Nagoya U., ⁵RIES-Hokkaido U.

○M. Yoshimura¹, K. Park², J. Lee², J. Cho³, H. Jang³, I. Terasaki⁴, A. Jeong⁵, and H. Ohta⁵

E-mail: yoshimura.mitsuki.a9@elms.hokudai.ac.jp

背景 熱流を電氣的に On/Off 可逆的に切替る電気化学熱スイッチが注目されている。我々は、固体電解質と活性層酸化物を組み合わせた全固体熱スイッチをいくつか報告し^[1-5]、特に、CeO₂^[6]を活性層とした熱スイッチが良好な熱スイッチ特性を示したことから、希土類酸化物に着目している。本研究では還元状態における熱伝導率に影響を及ぼす因子を明らかにするため、Ln₂O₃ (Ln = Sm, Eu, Gd, Dy, Ho, Er, Tm, Yb, Lu) 薄膜の熱伝導率を調べた結果、4f 電子の寄与を示唆する結果が得られたので報告する。

実験 膜厚約 100 nm の Ln₂O₃ (Ln = Sm, Eu, Gd, Dy, Ho, Er, Tm, Yb, Lu) 薄膜を、PLD 法により (001) YSZ 基板上にヘテロエピタキシャル成長させ、TDTR 法により室温の熱伝導率を計測した。

結果 図に Ln₂O₃ 薄膜の熱伝導率を示す。比較のために電気化学的酸化によって得られた CeO₂、PrO₂、TbO₂ 薄膜の熱伝導率も示した。4f 電子数の増加に伴い、Ln₂O₃ 薄膜の熱伝導率が増加する傾向を示した。4f 軌道は Ln-O のイオン結合に直接化寄与するフロンティア軌道ではなく、エネルギーが低いことから格子振動に直接影響を及ぼすとは考えにくい。しかし、4f 電子の軌道角運動量は等方的ではないことから、格子振動に何らかの影響を及ぼしている可能性が高い。当日はこの点に関して第一原理計算による電子状態、軌道角運動量についても議論したい。

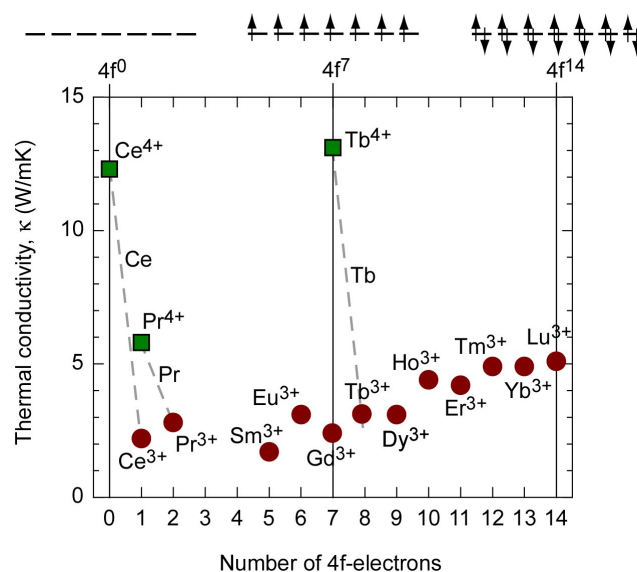


Fig. | Room temperature thermal conductivity of oxide thin films with various 4f electrons.

参考文献 [1] Q. Yang, **M. Yoshimura** et al., *Adv. Funct. Mater.* 33, 2214939 (2023), [2] M. Yoshimura et al., *ACS Appl. Electron. Mater.* 5, 4233 (2023). [3] Z. Bian, **M. Yoshimura** et al., *ACS Appl. Mater. Interfaces* 15, 23512 (2023). [4] H. Li, **M. Yoshimura** et al., *Appl. Phys. Lett.* 124, 191901 (2024). [5] Z. Bian, **M. Yoshimura** et al., *Adv. Sci.* 11, 2401331 (2024), [6] A. Jeong[#], **M. Yoshimura**[#] et al., *Science Adv.* 11, eads6137 (2025).

歪制御したエピタキシャル $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ 薄膜/Si の伝熱特性

Heat conduction characteristics of strain-controlled epitaxial $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ film/Si

阪大院基礎工¹, 産総研² ◯柴垣 新¹, 堀田 亮輔¹, 寺田 吏¹, 石部 貴史¹,
山下 雄一郎², 中村 芳明¹

The University of Osaka¹, AIST²

◯Arata Shibagaki¹, Ryosuke Hotta¹, Tsukasa Terada¹, Takafumi Ishibe¹,

Yuichiro Yamashita², Yoshiaki Nakamura¹

E-mail: u966757c@ecs.osaka-u.ac.jp

[背景・目的] 近年、IoT デバイスとの一体型自立電源として、Si 基板上 IV 族元素薄膜熱電材料が注目されている[1]。熱電性能向上に向けて出力因子 (PF) 向上と熱伝導率 (κ) 低減が必要とされるが、それらの相関関係のため性能向上は難しい。 $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ は、Ge 由来のバンド構造による高 PF、合金フォノン散乱に起因した低 κ が期待できる有望な IV 族元素材料である[2]。通常、 x の増加は、合金フォノン散乱の促進 (κ 低減)に加えて、 Γ バレーが降下して L バレーと縮重するバンドコンバージェンス (BC) 効果 (PF 向上) をもたらす。しかし、 $x>0.06$ では、 Γ バレーの過剰な降下のために BC 効果が軽減されて高 PF が得られない。そこで我々は、 x に加えて歪の制御に注目した。圧縮歪印加により Γ バレーの上昇を促し、大 x と BC 効果の両立を狙う。本研究では、圧縮歪制御した大 x を有するエピタキシャル $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ 薄膜/Si の作製技術を開発し、特に、組成・歪が伝熱特性に及ぼす影響を明らかにすることを目的とする。

[実験方法] Si (001)基板を超高真空槽 ($\sim 10^{-8}$ Pa) に導入した後、Si 基板上に表面平坦性の異なる歪緩和 Ge バッファ層を二段階成長した (粗い表面: D-Ge、平坦な表面: H-Ge)。これらの Ge バッファ層上に Ge と Sn を 120-160°C で同時蒸着することで、 $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ 薄膜を形成した ($x\sim 0.05-0.20$)。本薄膜にイオン注入 (イオン種: P, As)によるドーピングを行い、キャリア濃度を調整した。構造評価には、反射高速電子回折法 (RHEED)と逆格子マッピング (XRD-RSM)、熱電特性評価には、ZEM-3、自作電気特性測定装置、Time domain thermoreflectance (TDTR)法を用いた。

[結果] RHEED 図形より、Ge バッファ層の表面平坦性に関わらず、エピタキシャル $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ 薄膜/Si(001)の形成を確認した。形成した薄膜の XRD-RSM 測定より、表面の粗い D-Ge を用いることで、 $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ 層に圧縮歪が印加されていることがわかった。本 $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ 薄膜では、 x 増大に伴って合金フォノン散乱が促進され、歪 $\text{Ge}_{0.88}\text{Sn}_{0.12}$ は低 κ ($\sim 3.3 \text{ W m}^{-1}\text{K}^{-1}$)を示した。また、イオン注入前後での大幅な κ 変化は観測されなかった。これらの結果は、累積熱伝導率と関係があると考えられる。本講演では、歪制御エピタキシャル $\text{Ge}_{1-x}\text{Sn}_x$ 薄膜の伝熱特性と熱輸送物理について詳述する。

[謝辞] 本研究の一部は、科研費 基盤研究 A (JP23H00258)、基盤研究 B (JP23H01361) の支援により行われた。

[参考文献] [1] Y. Nakamura, et al., *STAM*. **19**, 32 (2018). [2] O. Concepción et al., *ACS Appl. Energy Mater.* **7**, 4394 (2024). [3] S. Gupta, et al., *J. Appl. Phys.* **113**, 073707 (2013).

低温における高不純物濃度シリコン熱伝導率の 3ω 法による測定Low-temperature thermal conductivity of heavily doped Silicon measured using 3ω method

東大工 O(M1)渡邊一輝, 吉永啓人, 豊島遼, 内田建

O(M1) Kazuki Watanabe, Keito Yoshinaga, Ryo Toyoshima, Ken Uchida

Dept. of Materials Engineering, Univ. of Tokyo, E-mail: watanabe@ssn.t.u-tokyo.ac.jp

近年, AI や仮想通貨の急速な普及により, 世界的にデータセンターの電力消費が増大している [1]. このような背景から, 消費電力の削減を目的として, CMOS 集積回路を液体窒素温度で高速かつ低電力で動作させる低温 CMOS 技術の導入が検討されている. しかしながら, バルク CMOS 集積回路で使用される 10^{18} cm^{-3} レベルの高不純物濃度のバルク Si について, 低温における熱伝導率はほとんど調べられていない. 本研究では, 高不純物濃度 p 型 Si 基板 (抵抗率 $0.016 \text{ } \Omega \text{ cm}$) の熱伝導率を 3ω 法 [2] を用いて測定したので報告する.

デバイスは, シリコンを 10 nm , 20 nm , 30 nm (基板不純物濃度 $1 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$), $1 \mu\text{m}$ (基板不純物濃度 $6 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$) と 4 種類の異なる膜厚で熱酸化し, 酸化膜上にヒーターおよびセンサとして機能する 4 端子構造のアルミニウム細線をフォトリソグラフィとアルミニウムエッチング液を用いて作製した (Fig. 1). 測定では, アルミニウム細線の 2 端子間の抵抗と同じ抵抗に設定した可変抵抗を直列につなぎ, アルミニウム細線間の電位差から可変抵抗の電位差を引くことで参照信号による基準波の電圧を差し引き, アルミニウム細線の昇温に由来する 3 次高調波信号をロックインアンプにより計測した. また, アルミニウム細線の温度係数と 3 次高調波信号から, Al-SiO₂-Si 基板間の温度上昇を求めた. 酸化膜厚 $1 \mu\text{m}$ 基板の不純物濃度は抵抗率と不純物濃度の関係 [3] から求めた.

低温における 3ω 法による熱伝導率計測で注意すべき点は, 熱拡散長が温度の低下とともに長くなるため, 基板裏面の影響をより受けやすいことである. 熱拡散長は測定周波数 ω に対して $\omega^{-0.5}$ で依存する. そのため, 熱拡散長を短くし基板裏面の影響を除外するには, 低温では室温よりもより高周波帯での計測が必要となる. Fig. 2 には 300 K および 100 K でのアルミニウム細線の温度上昇 ΔT の変化と周波数 ω の関係を示した. 100 K では裏面の影響により低周波領域での温度上昇が大きくなっていることが分かる. しかし, 実際に高周波帯まで計測すると, パッド電極と基板間の容量結合により参照信号が基板に逃げることで正しい信号を測定できない問題が発生した.

そこで本研究の目的である高い不純物濃度の基板と厚い酸化膜を利用し, さらに高周波数帯に対応するロックインアンプを用いることで上記の課題を解決した. Fig. 3 に 70 K における ΔT と ω の関係を示す. また, Si 基板と SiO₂ 膜の構造を仮定したモデル式でのフィッティングを行い, 70 K における不純物濃度 $6 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ の p 型 Si 基板の熱伝導率は $276 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ と求めた. これは不純物濃度 $1 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ の p 型 Si 基板の熱伝導率 $730 \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ [4] と比べて低い値となった. 極低温で温度係数の高い材料を用いることで, 今後より低温の熱伝導率を求める.

謝辞: 本研究の一部は JST ムーンショット型研究開発事業 (JPMJMS2067), 科研費 (25H00731), ASPIRE (JPMJAP2411) の支援を受けた.

[1] International Energy Agency, *Electricity 2024*, <https://www.iea.org/reports/electricity-2024>. [2] D. Cahill, *Rev. Sci. Instrum.*, **61**, 2, 802 (1990). [3] S.M. Sze *et al.*, *Solid-State Electron*, **11**, 599, (1968). [4] D. Fortier *et al.*, *Journal de Physique*, **37**, 2, 143 (1976).

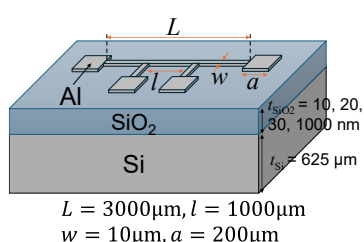


Fig.1: Schematic of the device used in this study.

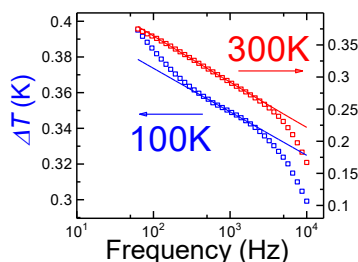


Fig.2: Frequency dependences of temperature increase of Al strip at 300 K and 100 K .

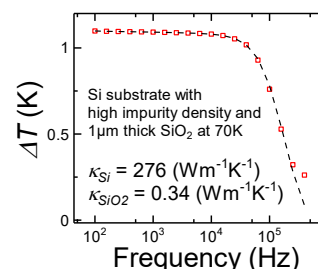


Fig.3: Frequency dependence of temperature increase of Al strip at 70 K .

縞状加熱を用いた薄膜面内方向熱拡散率計測手法の開発(2) : Mo および Al 膜における面内方向の熱拡散率の評価

Development of a measurement method for in-plane thermal diffusivity in thin films using a striped heating pattern (2): Evaluation of in-plane diffusivity in Mo and Al films

産総研¹, ○有馬 寛人¹, 八木 貴志¹, 山下雄一郎¹

AIST¹, °Hiroto Arima¹, Takashi Yagi¹, Yuichiro Yamashita¹

E-mail: yuichiro-yamashita@aist.go.jp

薄膜熱電材料の性能を表す性能指数は、面内方向の電気伝導率・ゼーベック係数と面直方向の熱伝導率から評価される。しかしながら、ナノメートルスケールの薄膜の面内方向の熱輸送特性は表面や界面の散乱効果が顕著になる。そのため、面直方向と面内方向の熱物性値は異なると考えられる。近年では、磁性体積層膜において磁場による熱スイッチの研究が行われているが、熱伝導率の測定は面直方向に限られる[1]。本研究では最近需要が高まりつつある、面内方向の熱物性値の計測技術の開発を目的とする。

面内方向の熱輸送測定のために本手法では時間領域サーモリフレクタンس法(TDTR; 繰返しナノ秒パルス加熱・連続光測温方式[2])を用いる。加熱光をメタルマスクによって縞状にすることで、試料の表面に縞状の加熱パターンを形成する。試料表面の加熱光のライン幅は $2.3\ \mu\text{m}$ 、ラインのピッチは $6.9\ \mu\text{m}$ であり、プローブ光のスポットサイズは $2.1\ \mu\text{m}$ である。TR 信号は加熱光のライン上とスペース上で測定を行い、両者の結果を同時にシミュレーションの曲線でフィッティングすることで、面内方向の熱物性値を評価する。図 1 に Mo(100 nm)/Qrt glass と Al(100 nm)/Qrt glass における TR 信号の時間緩和を示す。Mo 膜と Al 膜のスペース上の TR 信号の緩和は、両者ともにライン上の場合より、より緩やかに緩和される。Al 膜の熱緩和はより緩やかであるが、これは Al 膜が Mo 膜よりも熱伝導率が高いことに由来する。本講演では、Mo 膜と Al 膜における、面内の熱輸送について報告する。

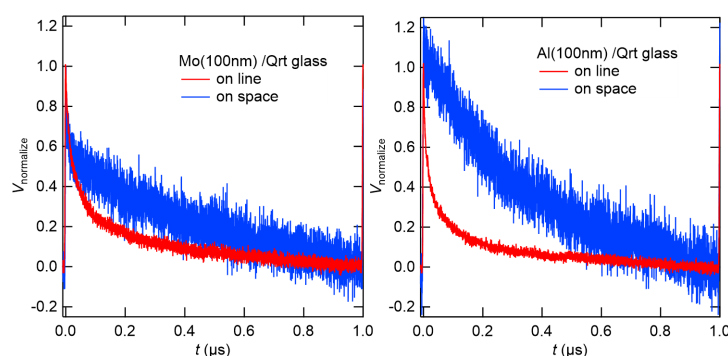


図 1. (左)Mo(100 nm)/Qrt glass と(右)Al(100 nm)/Qrt glass のサーモリフレクタンس信号の時間緩和

【謝辞】本研究の一部は科研費基盤研究 B (JP23K26056)、挑戦的研究(萌芽)(24K21593)、JST ERATO 内田磁性熱動体プロジェクト(JPMJER2201)の支援により行われた。

[1] H. Nakayama *et al.*, Appl. Phys. Lett. **118**, 042409 (2021)

[2] A. Hasegawa *et al.*, Sci. Reports. **14**, 1 (2024)

22 Joint Session M "Phonon Engineering" Oral presentation : 22.1 Joint Session M "Phonon Engineering"

[7p-N105-1~11] 22.1 Joint Session M "Phonon Engineering"

[7p-N105-1]

Control of thermal conductivity using UV-light and magnon conduction in $\text{Ca}_9\text{La}_5\text{Cu}_{24}\text{O}_{41}$ single crystal

O(D)Peyman Lotfalinezhad¹, Masaharu Matsunami¹, Tsunehiro Takeuchi¹ (1.Toyota Tech. Inst.)

[7p-N105-2]

Thermal conductivity measurement of unprocessed microparticles for TIMs

O(PC)Pauline Pradal¹, Ito Soutaro¹, Kim Byunggi², Masahiro Nomura¹ (1.Inst. of Industrial Science, Depart. of Informatics and Electronics, The University of Tokyo, 2.Inst. of Science Tokyo)

[7p-N105-3]

Anharmonicity-Induced Enhancement of Thermal Transport in SiGe Alloyed Nanowires

O(D)Wei Zhang^{1,2}, Shiyun Xiong³, Yangyu Guo², Hongliang Yi², Sebastian Volz^{1,4}, Masahiro Nomura¹ (1.IIS Univ. of Tokyo, 2.Harbin Inst. Technol., 3.Guangdong Univ. of Technol., 4.LIMMS Univ. of Tokyo)

[7p-N105-4]

The role of coherence in two-dimensional graphene/h-BN superlattice

O(D)Huang Xiaoyu^{1,2}, Sebastian Volz^{1,3}, Masahiro Nomura¹, Yuxiang Ni² (1.IIS Univ. of Tokyo, 2.SWJTU, 3.LIMMS)

[7p-N105-5]

Machine-learned molecular dynamics uncover phonon coherence and lower bounds of thermal transport in disordered superlattices

O(P)Xin Wu¹, Zheyong Fan², Penghua Ying³, Masahiro Nomura¹ (1.Univ. of Tokyo, 2.Bohai Univ., 3.Tel Aviv Univ.)

[7p-N105-6]

Revisiting van der Waals interactions in AlN-Copper via Machine Learning Potential

O(D)Wang Weitao¹, Yunhui Wu¹, Sebastian Volz², Masahiro Nomura¹ (1.The Univ. of Tokyo, 2.LIMMS)

[7p-N105-7]

Phonon Transport in Silicon Thin Film Thermoelectric Material with SiGe Interfaces by Phonon Monte-Carlo Simulation

O Ayaka Odashima^{1,2}, Ryoto Yanagisawa¹, Weitao Wang¹, Roman Anufriev¹, Kentarou Sawano², Masahiro Nomura¹ (1.IIS Univ. of Tokyo, 2.Tokyo City Univ.)

[7p-N105-8]

Evaluation of phonon spectrum for GeO_2/Ge interface by grazing incidence inelastic X-ray scattering

O Ryo Yokogawa^{1,2,3}, Sota Higashi⁴, Taishun Manjo⁵, Atsushi Ogura^{4,3} (1.RISE, Hiroshima Univ., 2.Grad. Sch. of Eng., Hiroshima Univ., 3.MREL, 4.Meiji Univ., 5.JASRI)

[7p-N105-9]

High-Thermal-Conductance GaN/Diamond Interface Achieved by Surface-Activated Bonding

○BIN XU¹, Fengwen Mu², Shiqian Hu³, Rulei Guo¹, Junichiro Shiomi¹ (1.Univ. Tokyo, 2.CAS, 3.Yunnan Univ.)

[7p-N105-10]

Relationship between thermal conductivity and crystal structure of PET fiber

○Hiromu Hamasaki¹, Yuki Tanimoto², Haruta Adachi¹, Hiroya Ikeda¹, Yutaka Ohkoshi²
(1.Shizuoka Univ., 2.Shinshu Univ.)

[7p-N105-11]

Prediction of Thermal Properties Using First-Principles Anharmonic Phonon Property Database

○Masato Ohnishi^{1,2}, Tianqi Deng³, Pol Torres⁴, Zhihao Xu⁵, Terumasa Tadano⁶, Haoming Zhang³, Wei Nong⁷, Masatoshi Hanai⁸, Zhiting Tian⁹, Ming Hu¹⁰, Xiulin Ruan¹¹, Ryo Yoshida^{2,12,13}, Toyotaro Suzumura⁸, Lucas Lindsay¹⁴, Alan McGaughey¹⁵, Tengfei Luo⁵, Kedar Hippalgaonkar^{7,16,17}, Junichiro Shiomi^{1,18} (1.Univ. of Tokyo, Eng, 2.ISM, 3.Zhejiang Univ., 4.Eurecat, 5.Univ. of Notre Dame, 6.NIMS, 7.Nanyang Tech. Univ., 8.Univ. of Tokyo, ICT, 9.Cornell Univ., 10.Univ. South Carolina, 11.Purdue Univ., 12.SOKENDAI, 13.RIKEN-TRIP, 14.Oak Ridge Natio. Lab, 15.Carnegie Mellon, 16.A*STAR, 17.Natio. Univ. Singapore, 18.RIKEN-AIP)

Control of thermal conductivity using UV-light and magnon conduction in $\text{Ca}_9\text{La}_5\text{Cu}_{24}\text{O}_{41}$ single crystal

P. Lotfalinezhad¹, M. Matsunami¹ and T. Takeuchi¹

¹Toyota Technological Institute, Japan

E-mail: sd23602@toyota-ti.ac.jp

1. Introduction

Heat flow switching devices actively manage heat in modern electronics, preventing overheating and improving reliability, especially in advanced technologies where traditional cooling is insufficient. At room temperature, materials like $\text{Ca}_9\text{La}_5\text{Cu}_{24}\text{O}_{41}$ with one-dimensional antiferromagnetic spin ladder structures exhibit high thermal conductivity ($\sim 100 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$) along the ladder direction, but low conductivity ($\sim 2 \text{ Wm}^{-1}\text{K}^{-1}$) perpendicular to it [1]. This anisotropy is due to heat transport by magnetic excitations called magnons, which occur only along the ladder. By destroying these magnons, a significant change in heat flow can be achieved, making $\text{Ca}_9\text{La}_5\text{Cu}_{24}\text{O}_{41}$ a promising material for heat flow switching devices.

2. Experimental Method

$\text{Ca}_9\text{La}_5\text{Cu}_{24}\text{O}_{41}$ single crystal sample was grown using the traveling solvent floating zone (TSFZ) method. The thermal conductivity (κ) of the grown single crystal was measured using both the periodic heating method and the relaxation method.

3. Result

As one of the most effective switching mechanisms, UV light was used to destroy magnons in the device by exciting the electrons involved in their formation. Figure 1 shows the XPS spectrum of the valence band of the $\text{Ca}_9\text{La}_5\text{Cu}_{24}\text{O}_{41}$ single crystal. Since Cu 3d electrons have a higher photoelectric cross section than 4s or 4p electrons at certain

photon energies, the main peak comes from Cu 3d electrons. Using light with a wavelength around 365 nm (3.4 eV), these 3d electrons can be excited into the conduction band. If these excited electrons carry local magnetic moments, the magnons can be destroyed by this excitation.

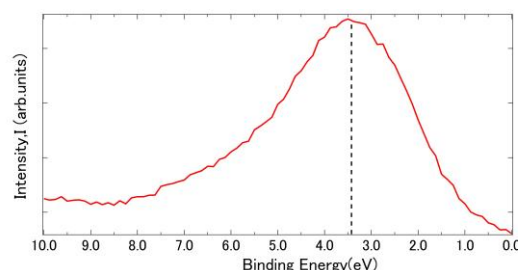


Figure 1: XPS spectrum of the valence band of $\text{Ca}_9\text{La}_5\text{Cu}_{24}\text{O}_{41}$

The thermal conductivity along the spin ladder direction was measured at room temperature. When the thin sample was exposed to 3.4 eV UV light, the thermal conductivity dropped by a factor of 3.6.

4. Conclusion

In this study, a heat flow switching device was evaluated using a thin $\text{Ca}_9\text{La}_5\text{Cu}_{24}\text{O}_{41}$ single crystal as the main material. Changes in heat flow were measured with the periodic heating method while ultraviolet light was shed on the sample. As a result, the heat flow was changed by a factor of 3.6.

References

- [1]. C. Hess, et al. Physical Review B 64.18 (2001).

Thermal conductivity measurement of unprocessed microparticles for TIMs

Pauline PRADAL*, Ito SOUTARO*, Kim BYUNGGI**, Masahiro NOMURA*

*Institute of Industrial Science, The University of Tokyo

**Institute of Science, Tokyo

E-mail: pradal@iis.u-tokyo.ac.jp

As modern electronic devices continue to shrink in size while increasing in power density, efficient thermal management has become a critical challenge [1,2]. To address this issue, thermal interface materials (TIMs) are commonly employed to enhance heat transfer between the devices and heat sinks. Due to their ease of processing, most commercial TIMs are polymer composites composed of thermally conductive particles such as alumina (Al_2O_3) [3]. To optimize TIM performance, it is important to accurately determine the thermal conductivity of these fillers, which often exhibits lower values than that of their bulk crystalline counterparts due to structural heterogeneities [4]. However, direct measurement of the thermal conductivity of individual microparticles remains challenging. In addition, sample preparation procedures frequently involve processing steps that may alter the intrinsic thermal properties of the fillers [4,5,6].

In this work, we present a straightforward sample preparation protocol that enables the characterization of the thermal properties of unprocessed fillers. Using time-domain thermoreflectance (TDTR), as illustrated in Figure 1a, in combination with 3D FEM simulations, we determine the thermal conductivity of individual Al_2O_3 microparticles with diameters ranging from $100\ \mu\text{m}$ down to $4\ \mu\text{m}$, as shown in Figure 1b–c. We expect this approach to provide a reliable approach to characterize newly synthesized fillers and to support the development of next-generation TIMs for advanced thermal management applications.

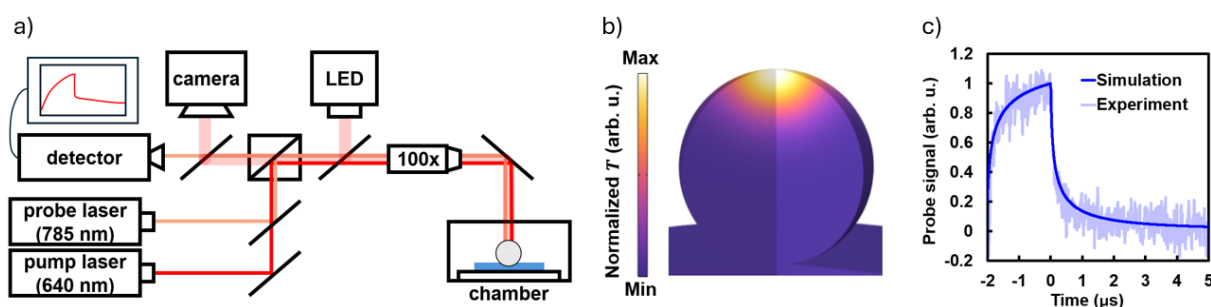


Figure 1: a) Schematic of the experimental setup used to measure the thermal properties of individual microparticles. b) Simulated heat dissipation process in a $50\ \mu\text{m}$ -diameter Al_2O_3 microparticle. c) TDTR measurement signal fitted with FEM simulation of an unprocessed filler.

Acknowledgments:

We acknowledge the valuable help of Laurent Jalabert and Roman Anufriev for the TDTR measurements, and Michele Diego for the FEM simulations.

References:

- [1] Y. Cui, et al., *J. Mater. Chem. C*, 8, 10568 (2020).
- [2] B. Wei, et al., *SM&T*, 5(3), 846–864 (2024).
- [3] Z. Dou, et al., *ACS Appl. Mater. Interfaces*, 15, 57602–57612 (2023).
- [4] M.F. Thompson, et al., *Appl. Phys. Lett.* 119, 023904 (2021).
- [5] S. Choi, et al., *Composites: Part B* 51, 140–147 Contents (2013).
- [6] D.-I. Shin, et al., *Macromol. Res.*, 32:885–895 (2024).

Anharmonicity-Induced Enhancement of Thermal Transport in SiGe Alloyed Nanowires

IIS Univ. of Tokyo¹, Harbin Inst. Technol.², Guangdong Univ. of Technol.³, LIMMS Univ. of Tokyo⁴

[✉]W. Zhang^{1,2}, S. Xiong³, Y. Guo², H. Yi², S. Volz^{1,4}, M. Nomura¹

E-mail: zhangwei@iis.u-tokyo.ac.jp

Semiconductor alloys exhibit significant potential as thermoelectric materials, enabled by their ordered crystalline structure. In addition, the presence of mass disorder significantly reduces lattice thermal transport while exerting minimal effect on electron behavior. In the case of SiGe nanowires (SiGe NWs), the discernible mass difference between components results in intense phonon scattering. As is generally recognized, the introduction of disorder substantially influences phonon transport through elastic scattering, thereby substantially reducing thermal conductivity. However, the role of system anharmonicity in affecting thermal transport within SiGe NWs remains to be elucidated. In this research, we perform ballistic non-equilibrium Green's function (NEGF) and non-equilibrium molecular dynamics (NEMD) simulations, to demonstrate that introducing anharmonicity in SiGe NWs could unexpectedly enhance thermal conductance of the system by up to 47%. We further observed that as the concentration of Ge was increased to over 10%, the influence of systemic anharmonicity on heat transport within SiGe NWs measuring several nanometers in length became discernible, and this effect was gradually amplified with increasing length. Spectral analysis of phonon heat transport reveals that the enhancement of heat transport by anharmonicity is mainly due to the augmentation of low frequency phonon transmission and an increase in mean free path below 2 THz. In addition, the presence of anharmonicity results in an increase in Anderson localization length, which subsequently reduces the number of localized phonon modes, and also exercises corresponding enhancement on heat transport. Our research has enhanced the understanding of phonon heat transport in low-dimensional disordered systems, providing substantial theoretical guidance for the control of thermal conductivity of semiconductor materials.

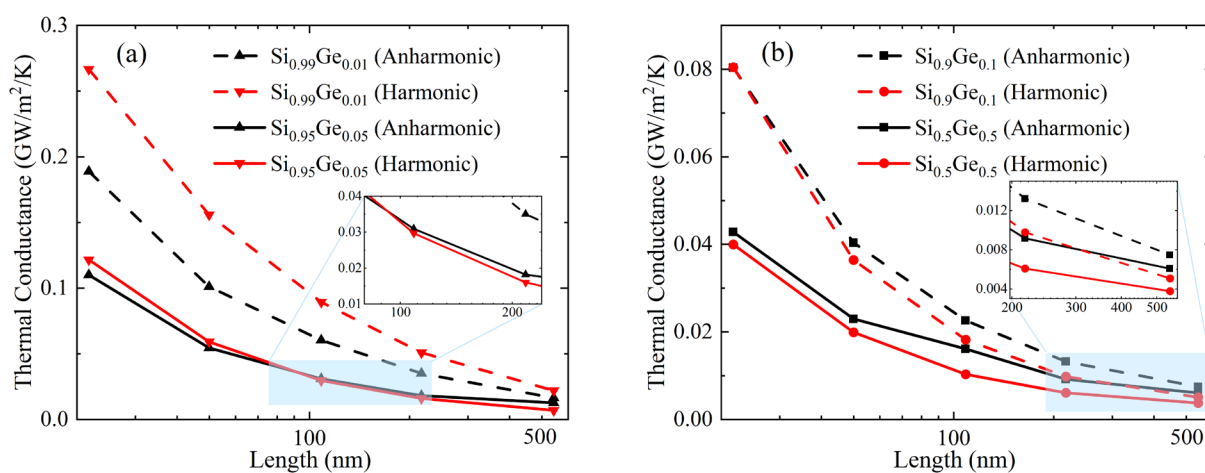


Figure 1 Anharmonic and harmonic thermal conductance of (a)Si_{0.99}Ge_{0.01} NWs, Si_{0.95}Ge_{0.05}, (b)Si_{0.9}Ge_{0.1} NWs, and Si_{0.5}Ge_{0.5} NWs as a function of length at 300K.

References : [1] W. Zhang *et al.*, Phys. Rev. B. **108**, 125436 (2023). [2] Y. Guo *et al.*, APL Materials. **9**, 091104 (2021).

二次元グラフェン/h-BN 超格子におけるコヒーレンスの役割

The role of coherence in two-dimensional graphene/h-BN superlattice

IIS Univ. of Tokyo¹, SWJTU², LIMMS³, °X. Huang^{1,2}, S. Volz^{1,3}, M. Nomura¹, and Y. Ni²

E-mail: xiaoyu@iis.u-tokyo.ac.jp

Background and objective: A common feature of superlattices is that their thermal conductivity initially decreases and then increases toward the bulk value as the period lengthens, typically attributed to a transition from coherent to incoherent phonon transport [1,2]. However, the underlying mechanisms remain unclear, especially as increased band folding in the phonon dispersion with longer periods suggests enhanced coherence. This work investigates the role of coherence in two-dimensional graphene/h-BN superlattices, aiming to elucidate the fundamental mechanisms governing thermal transport in these systems.

Method, results and discussion: All simulation models have identical dimensions (128 nm × 10 nm) to eliminate size effects (Figure 1a), and all superlattices use a stable zigzag interface [3]. Varying the period length L_p alters the Brillouin zone and the excited phonon modes. Using classical molecular dynamics combined with ShengBTE, WPPT, and the Simoncelli formula, we decompose thermal conductivity into particle-like and wave-like components (Figure 1b). Wavelike contributions, dominant in the 5–15 THz range, are identified as the gap between red and blue curves. The coherence time to lifetime ratio (τ_c/τ_p) is mapped across phonon modes (Figure 1c); brighter regions indicate stronger coherence. Results show LA modes dominate heat transport, with intrinsic coherence as the primary mechanism in $L_p = 0.85$ nm.

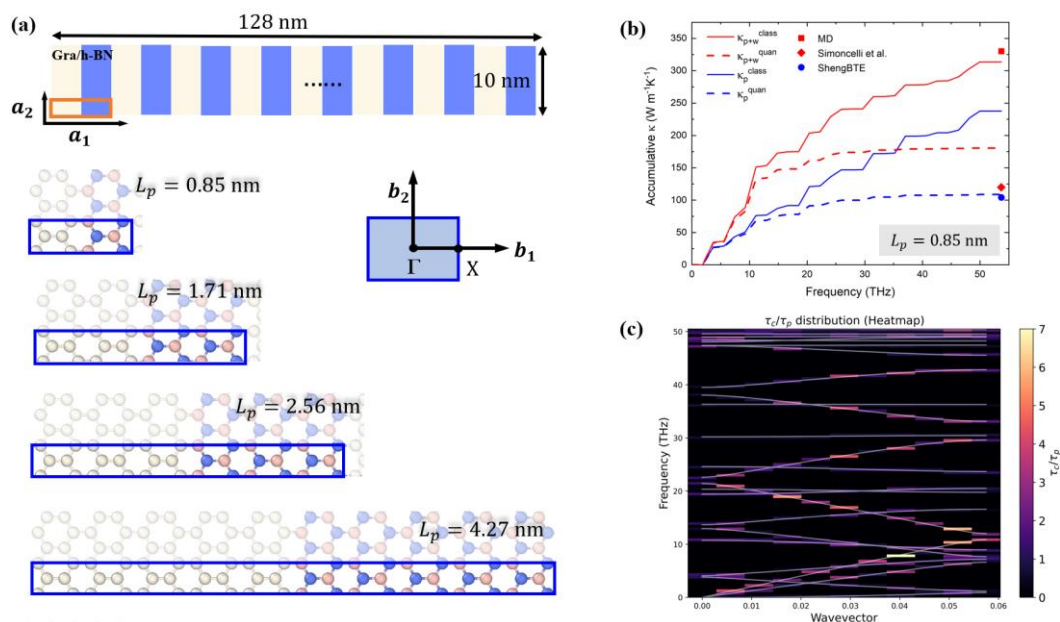


Figure 1 (a) Schematic of the graphene/h-BN superlattice structure with varying period lengths $L_p = 0.85$ nm ~4.27 nm. (b) Thermal conductivity of $L_p = 0.85$ nm obtained from different methods. Red: total contribution (wave-like + particle-like); blue: particle-like only. Solid and dashed lines represent classical and quantum-corrected accumulations from WPPT, respectively. (c) τ_c/τ_p ratio across phonon modes for $L_p = 0.85$ nm. Brighter colours indicate stronger coherence.

Reference: [1] Venkatasubramanian R. Physical Review B, 2000, 61(4): 3091. [2] Luckyanova M N, Garg J, Esfarjani K, et al. Science, 2012, 338(6109): 936-939. [3] Wu X, Ying P, Li C, et al. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2023, 201: 123643.

Machine-learned molecular dynamics uncover phonon coherence and lower bounds of thermal transport in disordered superlattices

Univ. of Tokyo¹, Bohai Univ., China², Tel Aviv Univ., Israel³

°X. Wu¹, Z. Fan², P. Ying³, M. Nomura¹

E-mail: xinwu@iis.u-tokyo.ac.jp

Phonon thermal transport exhibits significant potential in nanoscale thermal physics, especially in semiconductors and insulators where the lattice thermal conductivity is almost entirely derived from lattice vibrations. In periodically alternating nanostructures known as superlattices, composed of two or more different materials, phonons experience multiple reflections and interference at periodic interfaces, leading to the formation of unique phonon spectra and coherent transport^[1,2]. Disordered superlattices, with their complex interface scattering and localization effects, usually serve as valuable systems for contrasting with perfect superlattices^[3]. They have also been extensively studied in the context of phenomena such as Anderson localization, highlighting their potential as unique platforms for broadband quenching of phonon transport^[4]. However, the role of phonon coherence within disordered superlattices has remained overlooked.

Taking MoSe₂/WSe₂ lateral heterostructures as a model system, we demonstrate that the intricate interplay between wavelike and particlelike phonons, previously observed in perfect superlattice only, also occurs in disordered superlattice. By employing molecular dynamics simulation based on a highly accurate and efficient machine-learned potential constructed herein, we observe a nonmonotonic dependence of the lattice thermal conductivity on the interface density in both perfect and disordered superlattice, with a global minimum occurring at relatively higher interface density for disordered superlattice, as shown in Figure b. The counterintuitive phonon coherence contribution can be characterized by the lagged self-similarity of the structural sequences in the disordered superlattice. Our findings extend the realm of coherent phonon transport from perfect superlattice to more general structures, which offers more flexibility in tuning thermal transport in superlattices.

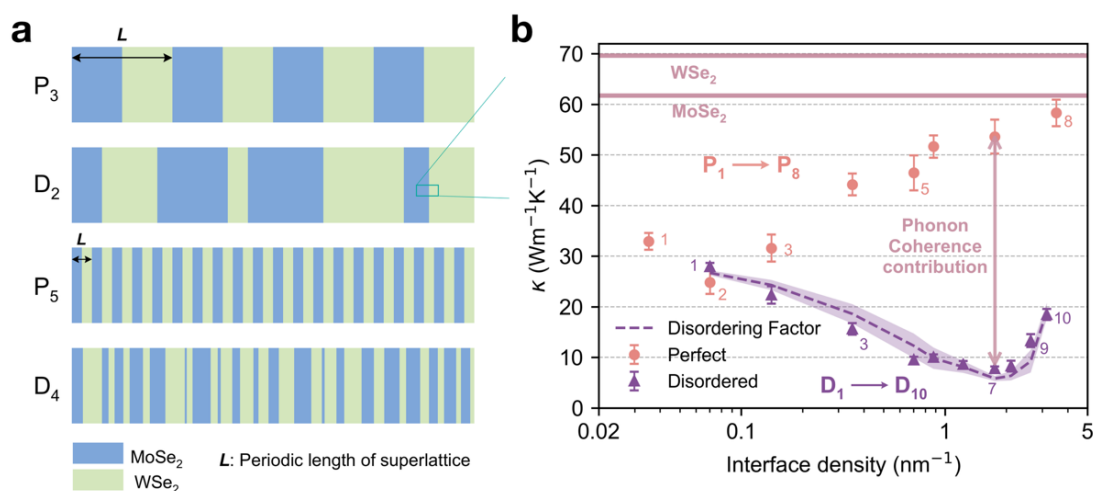


Figure (a) Two pairs of MoSe₂/WSe₂ lateral heterostructures, each consisting of a perfect (P) and a disordered (D) superlattice with equal interface density. L denotes the periodic length of the superlattice. (b) Thermal conductivity of MoSe₂/WSe₂ lateral heterostructures, including perfect (P₁~P₈, filled circles) and disordered (D₁~D₁₀, filled triangles) superlattices as a function of interface density at 300 K.

Acknowledgements This work was supported by the JSPS Grants-in-Aid for Scientific Research (Grant Nos. 24KF0027 and 21H04635). X. W. thanks the support from JSPS Postdoctoral Fellowship for Research in Japan (No. P24058). We thank the discussion with Mr. Z. Wu, Dr. T. Liang, and Prof. J. Xu.

References [1] S. Tamura et al., Phys. Rev. B **38**, 1427 (1988) [2] C. Colvard et al., Phys. Rev. B **31**, 2080 (1985). [3] Y. Wang et al., Phys. Rev. B **90**, 165406 (2014) [4] T. Juntunen et al., Phys. Rev. Lett. **122**, 105901 (2019)

Revisiting van der Waals interactions in AlN-Copper via Machine Learning Potential

Univ. of Tokyo, IIS¹ and LIMMS²

○W. Wang¹, Y. Wu¹, S. Volz^{1,2}, and M. Nomura¹

E-mail: wwt-0528@iis.u-tokyo.ac.jp

The AlN-Copper interface, formed by AlN with high thermal conductivity and electrical insulation and Copper (Cu), is a critical and indispensable structure in fields such as power modules, LED packaging, microwave circuits, and insulated metal substrates. However, the relatively weak van der Waals interactions and potential structural mismatches at the interface may lead to increased thermal resistance [1]. Therefore, understanding and optimizing interfacial interactions at the atomic scale is of great significance for improving the performance and reliability of next-generation electronic systems. The traditional approach to investigate the thermal transport characteristics at AlN-Copper interface is using molecular dynamic (MD) simulation with empirical potential [2]. However, with the development of machine learning potential, many research have shown that there are errors in the interface behaviors described by empirical potential [3]. To examine the van der Waals interaction between Si and Cu, the machine learning potential (MLP) for AlN-Cu is first established, and the thermal boundary resistance (TBR) are evaluated by both empirical potential and MLP. Further, the Cu stacking morphologies on AlN are constructed with crystal and deposit Cu. From the atomic level, the density of states analysis and phonon transmission coefficient are utilized to explain the impact of various interface configurations on thermal transport. In addition, phonon wave packet simulations further revealed the influence of atomic ordering at the interface on phonon transport.

This work provides valuable insights into understanding the interfacial thermal transport between metal and nitride semiconductors and useful guidance for thermal management via interface engineering.

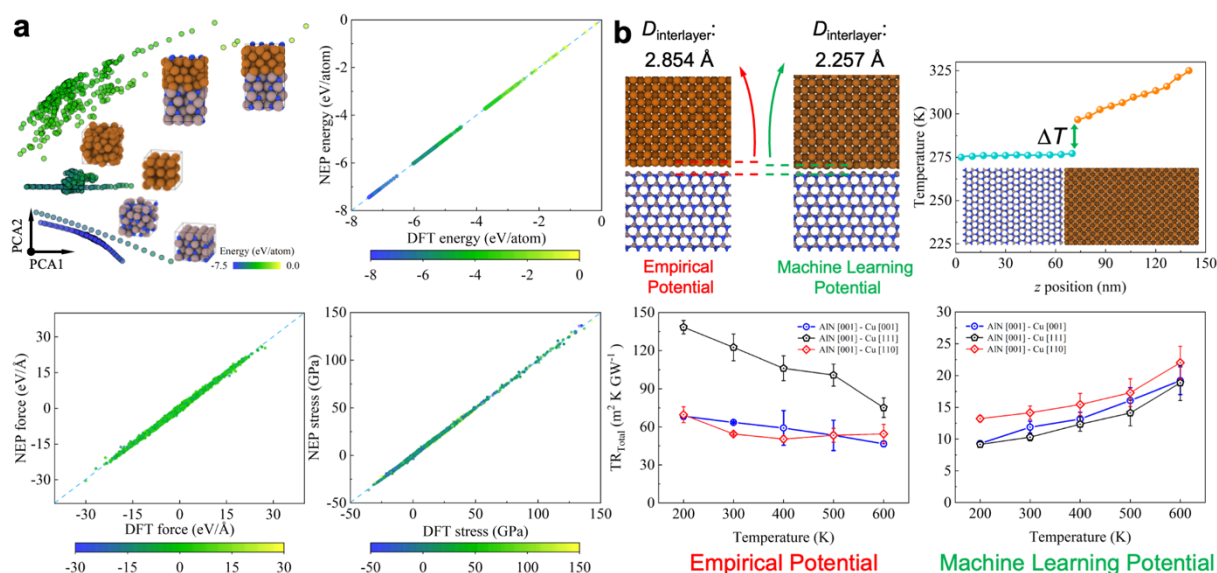


Fig. 1 (a) The PCA for MLP dataset and Comparison between NEP prediction and DFT calculation in energy, force and stress. (b) The interfacial distance ($D_{\text{interlayer}}$) and thermal resistance in AlN-Cu simulated by empirical and machine learning potential.

Acknowledgements This work was supported by the JST ALCA-Next (Grant No. JPMJAN23E3), and WINGS-QSTEP and SPRING-GX at The University of Tokyo. We thank the useful discussion with Dr. X. Wu and Dr. X. Huang.

References

- [1] Du, Jiaojiao, et al. *Ceramics International* 49.11 (2023): 16740-16752.
- [2] Dong, H. M., et al. *Physical Chemistry Chemical Physics* 26.5 (2024): 4047-4051.
- [3] Xu, Bin, et al. *Science Advances* 7.17 (2021): eabf8197.

フォノンモンテカルロ計算を用いた SiGe 界面を有する Si 熱電薄膜におけるフォノン輸送の考察

Phonon Transport in Silicon Thin Film Thermoelectric Material with SiGe Interfaces by Phonon Monte-Carlo Simulation

東大生研¹, 東京都市大²

○小田島綾華^{1,2}, 柳澤亮人¹, Weitao Wang¹, Roman Anufriev¹, 澤野憲太郎², 野村政宏¹

IIS Univ. of Tokyo¹, Tokyo City Univ.²

°A. Odashima^{1,2}, R. Yanagisawa¹, W. Wang¹, R. Anufriev¹, K. Sawano², M. Nomura¹

E-mail: g2491202@tcu.ac.jp

背景・目的：熱エネルギーの有効利用に向けて、シリコン (Si) ウエハ上に作製される熱電発電デバイスの研究が期待されており、高性能化にはナノ構造を用いた Si 薄膜の熱伝導率低減が有効である。これまで厚さ 1 μm 程度の Si 薄膜においてフォノンニック結晶 (PnC) ナノ構造による熱電性能向上が報告されている[1,2]。今回、Si 薄膜に SiGe 超薄膜を挿入した超格子状の Si 薄膜熱電材料を開発し、薄膜の面内方向熱伝導率の測定とフォノン輸送のモンテカルロシミュレーションを用いて超格子構造がフォノン輸送に及ぼす影響を検討した結果について報告する。

手法・結果：SOI 基板の厚さ ~ 30 nm の単結晶 Si 層の上に、Si 層と厚さ ~ 2 nm の $\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}$ 薄膜層を交互に P をドーパントとしてエピタキシャル成長し、Si/SiGe 超格子薄膜を作製した。Si 層の厚さ ($\sim$ SiGe 層のピッチ) を 12 ~ 60 nm の範囲で変え、それぞれ層数を変えることで合計の膜厚が 200 ~ 600 nm の試料を作製した (図 1(a))。試料の設計にあたり分子動力学とフォノン輸送のモンテカルロシミュレーションを用いて SiGe 層のピッチと Si 層の層数に依存した熱伝導率を計算した[3]。図 1(b,c)に示すように、SiGe 層のピッチが短くなった場合、Si 薄膜の熱伝導率を低減する結果が得られ、これまでの実験結果と良い一致を得た。またピッチを固定し、層数を増やした場合においても低い熱伝導率を示す結果が得られ、層数を増やして膜厚を大きくすることで熱電材料の高性能化が期待できる結果を得た。当日は実験結果との比較についても詳細に議論を行う。

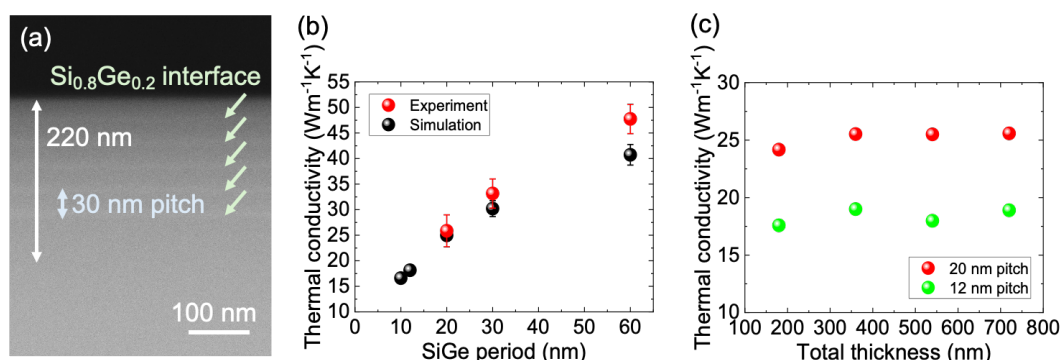


Figure 1 (a) Scanning electron microscope (SEM) image of fabricated Si and $\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}$ layers superlattice structure. SiGe pitch is 30 nm and number of Si layers is 6. (b, c) Simulated thermal conductivity of Si/SiGe superlattice thin-film as functions of SiGe pitch and number of Si layers by using phonon Monte-Carlo method.

謝辞：本研究は、JST CREST (JPMJCR19Q3)、JST 未来社会創造事業 (JPMJMI19A1)、および科学研究費補助金 (21H04635) の支援により遂行された。**参考文献**：[1] R. Yanagisawa *et al.*, *Mater. Today Phys.* **45**, 101452 (2024). [2] M. Nomura *et al.*, *Mater. Today Phys.* **22**, 100613 (2022). [3] R. Anufriev *et al.*, *Mater. Today Phys.* **15**, 100272 (2021).

斜入射 X 線非弾性散乱法による GeO₂/Ge 界面のフォノンスペクトル評価 Evaluation of phonon spectrum for GeO₂/Ge interface by grazing incidence inelastic X-ray scattering

1. 広大 RISE、2. 広大院先進理工、3. 明大 MREL、4. 明大理工、5. JASRI

○横川 凌^{1,2,3}、東 奏太⁴、萬條 太駿⁵、小椋 厚志^{4,3}

1. RISE, Hiroshima Univ. 2. Grad. Sch. of Eng., Hiroshima Univ. 3. MREL 4. Meiji Univ. 5. JASRI

○Ryo Yokogawa^{1,2,3}, Sota Higashi⁴, Taishun Manjo⁵, and Atsushi Ogura^{4,3}

E-mail: yokogawa@hiroshima-u.ac.jp

【背景と目的】Si, GeをはじめとしたIV族半導体は電気伝導率を維持しつつ、微細化などの手段によって、熱伝導率を顕著に低くできることから、次世代熱電発電デバイスへの応用に期待されている[1]。熱伝導率低下の要因として、SiO₂/SiおよびGeO₂/Ge界面に局在する無秩序な振動状態が大きく関与していることが分子動力学(MD: Molecular Dynamics)計算により示されている[2,3]。ゆえに、SiO₂/SiおよびGeO₂/Ge界面に着目したフォノン物性の把握は熱伝導率制御の観点から高効率熱電発電デバイス実現に重要である。しかし、酸化膜界面に限定したフォノンスペクトルの実測は難しく、未だMD計算の理論予測に留まっている。

上記背景を鑑み、我々は薄膜のフォノン分散測定に用いられる斜入射X線を用いたX線非弾性散乱法(IXS)に着目した[4,5]。本研究ではGeO₂/Ge界面に対し、斜入射X線の条件を検討しつつ、IXSでフォノンスペクトル測定を実施したので報告する。

【実験】試料はチョクラルスキー法で作製された(100)Ge基板を準備し、斜入射IXS測定へ向け、2 cm×2 cmへ切り出した。自然酸化膜(GeO₂)の膜厚はX線光電子分光法で得られたGe 3d光電子スペクトルの積分強度比を用いて算出した。斜入射IXS測定は、大型放射光施設SPring-8のBL35XUに設置されたIXS装置で行った[6]。X線のエネルギー21.747 keV、Siの背面反射指数(11 11 11)、分光器のエネルギー分解能1.5 meV、ビームサイズ約50 μm、室温の条件で実施した。Ge由来のバルクフォノンからの寄与が極力少なくなるよう入射角は0.1°に設定し、[100](Γ-X)方向についてフォノンスペクトル測定を行った。

【結果・考察】斜入射IXSで得られたΓ点(4, 0, 2)におけるGeO₂/GeのIXSスペクトルをFig. 1に示す(ピーク位置0 meVの弾性散乱で規格化、および参照ピークとして比較)。結果、約37 meV近傍にGe由来の光学フォノンスペクトルが観測され、先行研究のラマンスペクトル(ピーク位置:301 cm⁻¹)[7]とよく一致していることを確

認した。また、バルクGeと比較検討した結果、スペクトル線幅が増大していることが分かり、これは先行研究のラマン分光分析結果からGeの表面フォノン[8]が寄与していると考えられる。

さらに、20-30 meV近傍にGeの音響・光学フォノン分散ではない微弱なフォノンスペクトルが複数観測された。これらはGeO₂/Ge界面近傍に局在する複数の振動状態を反映し、光学モードより低エネルギー側に位置することから、酸化膜誘起の歪を反映していると考えられる[2]。これらのフォノンスペクトルはΓ点以外の運動量でも観測された。以上、斜入射IXSを用いることでGeO₂/Ge界面近傍のフォノンスペクトルを観測することができ、熱伝導率低下の起源を解明する一助になると考える。

【謝辞】本研究はJASRI(課題番号: 2024B1427)の承認、およびJSPS 科研費(24K17313)の補助を受けた。

[1] A. I. Boukai *et al.*, *Nature* **451**, 168 (2008). [2] T. Zushi *et al.*, *Phys. Rev. B* **91**, 115308 (2015). [3] 小出 他, 第76回秋季学術講演会, 16p-2D-10 (2015). [4] H. Uchiyama *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **120**, 235901 (2018). [5] M. Chino *et al.*, *J. Electron. Mater.* **52**, 5128 (2023). [6] A. Q. R. Baron *et al.*, *J. Chem. Phys. Solids* **61**, 461 (2000). [7] A. Gassenq *et al.*, *J. Appl. Phys.* **121**, 055702 (2017). [8] K. Takeuchi *et al.*, *Appl. Phys. Express* **9**, 071301 (2016).

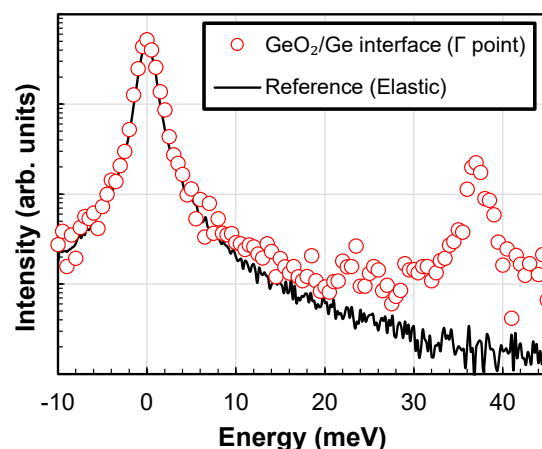


Fig. 1 IXS spectrum of GeO₂/Ge interface at Γ point (4, 0, 2).

表面活性化接合による高熱コンダクタンス窒化ガリウム/ダイヤモンド 界面の実現

High-Thermal-Conductance GaN/Diamond Interface Achieved by Surface-Activated Bonding

東大工¹, 中国科学院², 雲南大理³ ○許 斌¹ 母 鳳文², 胡 世謙³, 郭 汝磊¹, 塩見 淳一郎¹

Univ. Tokyo¹, CAS², Yunnan Univ.³ ○Bin Xu¹, Fengwen Mu², Shiqian Hu³, Rulei Guo¹, Junichiro
Shiomi¹,

E-mail: xubin@photon.t.u-tokyo.ac.jp

窒化ガリウム (GaN)、炭化ケイ素 (SiC)、酸化ガリウム (Ga_2O_3) などのワイドバンドギャップ半導体の急速な発展は、電気自動車、モバイル端末、次世代通信といった多様な分野における技術革新を促進している。しかしながら、これらのデバイスにおいて出力の増大および小型化が進むにつれ、自己発熱による熱密度が増加し、デバイスの劣化や性能低下が深刻な課題となっている。この課題に対する有望な解決策の一つとして、半導体を高熱伝導率のダイヤモンド基板に接合する方法が注目されている。しかし、半導体とダイヤモンドの界面においては、新たに界面熱抵抗 (thermal boundary resistance : TBR) が生じ、熱拡散が阻害されることで、ダイヤモンド基板による冷却効果が制限されるという問題がある。

本研究では、この TBR を低減するため、 SiO_x と Ar を用いたハイブリッドイオン源による表面活性化接合 (hybrid surface activated bonding) 技術を、初めて GaN とダイヤモンドの接合に適用した。ハイブリッドイオン源により、表面活性化と同時に SiO_x バインダ層の堆積が可能となり、さらに SiO_x の堆積速度が低速であることから、膜厚 (2.5~5.3 nm) を高精度に制御することができた。その結果、極薄な界面バインダ層の形成に成功した。形成されたバインダ層は、2 つの相互拡散領域の間に SiO_x 層が挟まれた三層構造を有し、すべての層が非晶質である点が特徴である。特に、界面層の厚さが 2.5 nm の場合、過去の接合界面と比較しても最も低い TBR 値である $8.3 \text{ m}^2 \cdot \text{K/GW}$ を達成した。さらに、界面層の厚さに対する TBR の感度は非常に高く、膜厚が 2.8 nm 増加しただけで、TBR は 8.3 から $34 \text{ m}^2 \cdot \text{K/GW}$ へと急激に増加した。分子動力学解析により、この TBR の増加は、ダイヤモンド/ SiO_x 界面に形成される相互拡散層が、ダイヤモンド結晶のフォノン (格子振動) の固有振動数を大きく上回る振動モードを導入し、フォノンのミスマッチを増加させることで熱輸送が著しく抑制されることが示唆された^[1]。

本研究は、ワイドバンドギャップ半導体の熱マネジメントに向けた新たな界面接合技術を開発するとともに、アモルファス界面層における熱輸送機構の解明にも貢献している。これは、半導体デバイスのさらなる性能向上に寄与するのみならず、熱輸送物理に対する理解を深める成果でもある。

[1] B. Xu, F. Mu, Y. Liu, R. Guo, S. Hu, J. Shiomi, *Acta Mater.* **2025**, 282, 120458.

PET 繊維の熱伝導率と結晶構造の関係

Relationship between thermal conductivity and crystal structure of PET fiber

静岡大¹, 信州大² °濱崎 拓¹, 谷本 悠紀², 安達 陽太¹, 池田 浩也¹, 大越 豊²

Shizuoka Univ.¹, Shinshu Univ.², °Hiromu Hamasaki¹, Yuki Tanimoto²,

Haruta Adachi¹, Hiroya Ikeda¹, Yutaka Ohkoshi²

E-mail: hamasaki.hiromu@shizuoka.ac.jp

【背景】

結晶性高分子材料の熱伝導率は、一般に材料内部の結晶構造に強く依存することが知られており、引張変形による結晶化度や結晶配向性の向上により、高分子繊維の熱伝導率が向上する旨の実験結果が報告されている。しかしながら、一般的な高分子繊維の直径はマイクロメートルオーダーであり、構造由来の高い表面一体積比と、物質由来の比較的低い熱伝導率のために、高分子繊維の熱散逸過程には、熱輻射が大きく寄与する。結果として、熱輻射の影響を考慮せず熱伝導率の評価を行った場合、評価された熱伝導率は、繊維の長さや太さに依存することになる[1]。引張変形を受けた繊維は、オリジナルの繊維と比較して長く細くなるため、熱散逸過程における輻射の効果がより顕著になり、結果として、見かけ上熱伝導率が向上している可能性がある。よって本研究では、引張変形を加えたポリエチレンテレフタレート（PET）繊維に対して輻射の影響を考慮した熱伝導率の決定を行い、PET 繊維の熱伝導率と結晶化度・結晶配向性の関係について調べた。

[1] Hamasaki et al., Appl. Phys. Lett. 125, 182201 (2024).

【実験結果】

Fig. 1 に、引張変形を施した PET 繊維の熱伝導率と DSC 計測から見積もった結晶化度の関係を示した。プロット近くの数字は各試料の延伸倍率を表しており、A の添え字がなされたものは、それぞれの試料を 160℃でアニールした試料の結果である。特に低倍率の試料ほど、アニールによる結晶化度の改善がみられるが、それによる熱伝導率への影響はほとんど見られなかった。延伸倍率の増加に対しては、熱伝導率は明らかな増加傾向を見せており、高分子繊維の熱伝導率が、結晶化度単体ではなく、配向性に強く依存することがわかった。

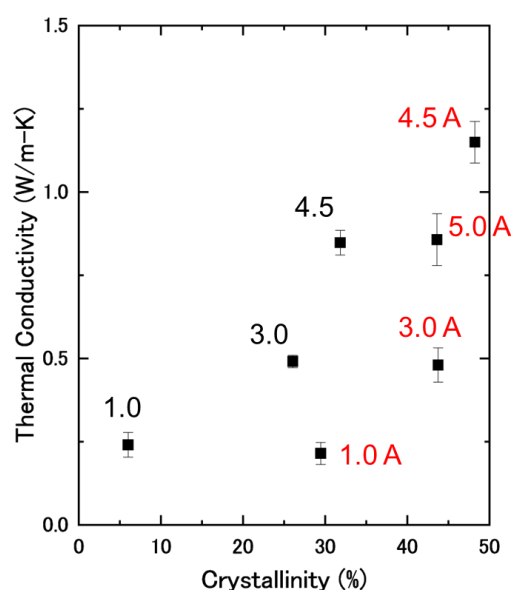


Fig. 1 PET 繊維の熱伝導率と結晶化度の関係

第一原理非調和フォノン特性データベースを用いた熱物性予測

Prediction of Thermal Properties Using

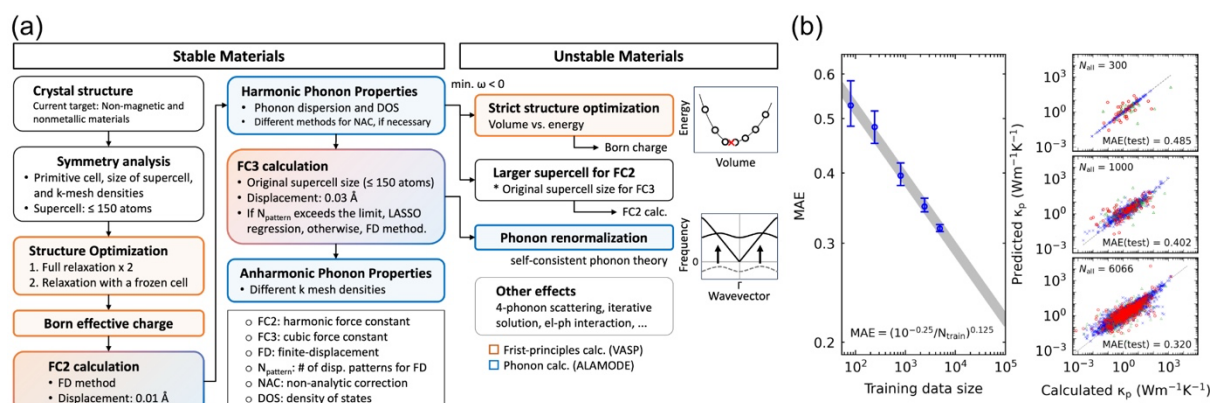
First-Principles Anharmonic Phonon Property Database

M. Ohnishi (大西正人)^{1,2}, T. Deng³, P. Torres⁴, Z. Xu⁵, T. Tadano (只野央将)⁶, H. Zhang³, W. Nong⁷, M. Hanai (華井雅俊)⁸, Z. Tian⁹, M. Hu¹⁰, X. Ruan¹¹, R. Yoshida (吉田亮)^{2,12,13}, T. Suzumura (鈴木豊太郎)⁸, L. Lindsay¹⁴, A. J. H. McGaughey¹⁵, T. Luo⁵, K. Hippalgaonkar^{7,16,17}, and J. Shiomi (塩見淳一郎)^{1,2,18}

¹ Univ. of Tokyo (東大工), ² ISM (統数研), ³ Zhejiang Univ., ⁴ Eurecat, ⁵ Univ. of Notre Dame, ⁶ NIMS (物材研), ⁷ Nanyang Tech. Univ., ⁸ Univ. of Tokyo (東大情基), ⁹ Cornell Univ., ¹⁰ Univ. of South Carolina, ¹¹ Purdue Univ., ¹² SOKENDAI, ¹³ RIKEN-TRIP, ¹⁴ Oak Ridge National Lab, ¹⁵ Carnegie Mellon Univ., ¹⁶ A*STAR, ¹⁷ National Univ. of Singapore, ¹⁸ RIKEN-AIP

E-mail: masato.ohnishi.ac@gmail.com

フォノン特性解析は熱輸送特性やフォノンとその他の準粒子との相互作用を理解し、様々な機能性材料・デバイスを設計する上で不可欠である。一方、既存の材料データベースは電子物性や構造データが中心で、第一原理計算に基づく非調和フォノン特性のデータが不足している。本研究では、非調和フォノン特性自動計算ワークフロー (auto-kappa) を構築し、6,000 件超の非金属・非磁性材料の非調和フォノン特性を解析した。得られたデータを用いて格子熱伝導率を予測するグラフニューラルネットワークを学習させ、高い精度と学習データの増加に伴い予測精度が向上するスケーリング則を確認した。また、モデルを用いた大規模スクリーニングにより、新しい高熱・低熱伝導材料の候補を同定した。さらにスペクトル熱伝導率やフォノン分散も予測可能であり、今後は高次の非調和効果や電子-フォノン相互作用の導入を進め、材料探索への応用を拡張する予定である。



図：非調和フォノンデータベースを用いた深層学習スケーラビリティの観察。(a) 第一原理非調和フォノン特性自動計算ワークフロー。(b) 格子熱伝導率のスケーリング則 (左図) と異なる学習データサイズにおける予測値と計算値の比較 (右図)。

[1] M. Ohnishi et al., Database and deep-learning scalability of anharmonic phonon properties by automated brute-force first-principles calculations, arXiv:2504.21245 (2025).

22 Joint Session M "Phonon Engineering" | Oral presentation : 22.1 Joint Session M "Phonon Engineering"

[8a-N102-1~5] 22.1 Joint Session M "Phonon Engineering"

[8a-N102-1]

Demonstration of phononic resonator approaching sub-THz frequency

○Daiki Hatanaka¹, Hajime Okamoto¹, Hiroshi Yamaguchi¹ (1.NTT BRL)

[8a-N102-2]

Dependence of Topological Boundary Geometries on Wave Propagation/Localization in Phononic Crystals

○Keita Funayama¹, Kenichi Yatsugi¹, Hideo Iizuka¹ (1.Toyota Cent. Labs.)

[8a-N102-3]

Area-Enlargement of Topological Corner Modes for Storage of Elastic Energy

○(D)Yusuke Hata¹, Yuri Fukaya¹, Kenji Tsuruta¹ (1.Graduate School of Natural Science and Technology, Okayama Univ.)

[8a-N102-4]

Effect of adsorbed molecules on heat transport between gold nanogap electrodes

○Mizuki Tada¹, Kazuma Kishimoto¹, Yuki Hanamura¹, Ryo Yamada¹, Hirokazu Tada¹ (1.Osaka Univ.)

[8a-N102-5]

Thermal radiation spectrum analysis of metal-semiconductor micro two-dimensional structures

○Takumi Oshima¹, Daiki Yoshikawa¹, Yoshihiro Ishitani¹ (1.Chiba Univ.)

サブテラヘルツフォノニック共振器の実証

Demonstration of phononic resonator approaching sub-THz frequency

○畑中 大樹、岡本 創、山口 浩司

○Daiki Hatanaka, Hajime Okamoto, and Hiroshi Yamaguchi

NTT 物性科学基礎研究所、日本電信電話株式会社

NTT Basic Research Laboratories, NTT Corporation

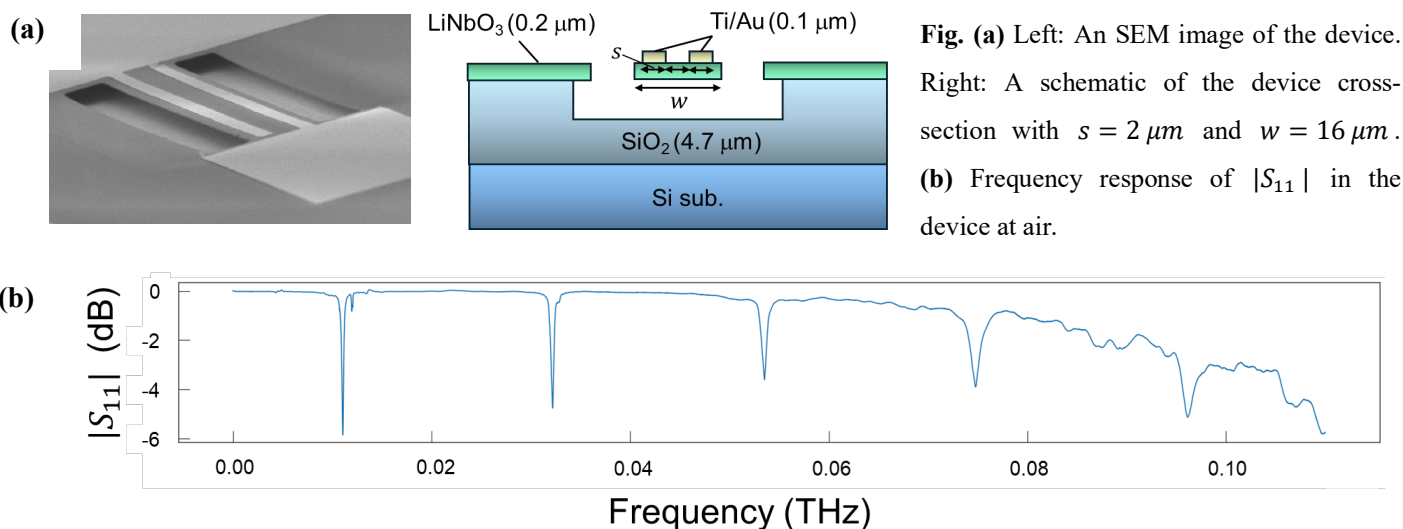
e-mail: daiki.hatanaka@ntt.com

弾性振動（音響フォノン）は、同じ周波数のマイクロ波（フォトン）と比較して、波長が5桁短く、さらに輻射による損失や干渉がないことから、情報担体として利用すると高周波信号処理デバイスの小型・高性能化に繋がるとの期待がある。周波数が高くなればなるほどフォノンの優位性が顕著に表れるため、高速大容量化が進む無線通信端末において、フォノンの重要性が今後益々高まっていくことは自明である。しかしながら、従来の機械（フォノニック）共振器の多くは、その動作帯域がせいぜい30 GHz未満であり [1]、ミリ波帯（30 GHz超）で動作するデバイスは唯一の報告を除きこれまでほとんど実証されていない [2]。本講演では、最近我々が取り組んでいる、サブテラヘルツ帯（> 100 GHz）近傍に共鳴周波数をもつフォノニック共振器の作製と基本的な周波数応答の測定結果について報告する。

本デバイスは、Si基板上に形成したニオブ酸リチウム層（ LiNbO_3 , 600 nm）と SiO_2 絶縁層（4.7 μm ）の二層構造から作製される。厚さ600 nmの LiNbO_3 層をドライエッチングにより200 nm前後の厚さまで薄膜化し、その上に、圧電トランスデューサとなるTi/Au電極をリフトオフ法によって設置した。そして、下層の SiO_2 をウェットエッチングによって選択的に除去することで、Fig. (a)のような LiNbO_3 膜の両持ち梁構を実現した。電極に交流電圧を印可し、共振器からの反射強度（ $|S_{11}|$ ）を計測したところ、Fig. (b)の周波数応答が得られた。10 GHzから最大100 GHz近傍の広い周波数レンジで複数の $|S_{11}|$ の低下を伴うディップ構造が現れた。有限要素法による固有振動モード解析から、これらがバルク音響共であることを支持する結果が得られた。100 GHz近傍で動作するフォノニック共振器の実証は、制御技術が未開拓であった超高周波フォノン回路の創出につながる重要なマイルストーンの一つである。

本研究はJSPS 科研費JP21H05020、JP23H05463、JP24H02235の助成を受けた。

[1] M. Kurosui et al., Appl. Phys. Lett., 122, 122201 (2023). [2] J. Xie et al., Nature Electron. 6, 301-306 (2023).



フォニック結晶内の波動伝播/局在性のトポロジカル境界構造依存性 Dependence of Topological Boundary Geometries on Wave Propagation/Localization in Phononic Crystals

豊田中央研究所¹ °舟山 啓太, 矢次 健一, 飯塚 英男

Toyota Central R&D Labs., Inc. °Keita Funayama, Kenichi Yatsugi, Hideo Iizuka

E-mail: funayama@mosk.tytlabs.co.jp

【はじめに】 トポロジーの概念に基づき設計された結晶の境界（トポロジカル境界）は、反射や後方散乱を抑制する導波路として機能することから、一方向伝播や疑似スピン流制御を可能にする技術として広範な分野において注目されている。伝播効率及び局在特性はトポロジカル導波路を設計する上で注目すべき重要な設計要素となる。本発表では、量子バレーホール効果 (QVHE) に基づいて設計された単位格子を用いて、3種類の異なるトポロジカル境界構造から成る弾性波導波路の伝播特性及び局在性について実験・数値的に検討した結果を報告する[1]。

【方法】 単位格子は質点となる大小2つの三角形型副格子と、隣り合う副格子間を接続する梁から成る。単位格子を周期的に配置し、トポロジカル境界を境に反転した単位格子を配置することでトポロジカル導波路を得た。境界の構造は単位格子の配置角度により、ジグザグ型 (Z 型)、ブリッジ型 (B 型)、アームチェア型 (A 型) の3つを作製可能である (図1)。上記構造は半導体プロセスにより作製された。導波路は左端部から静電力により励振され、構造体の振動状態はレーザードップラー振動計によって計測された。

【結果】 Z 型、B 型、A 型全ての導波路で、弾性波が局在化し、構造体右端まで伝播していることを確認した。A 型よりも強いトポロジカル保護が得られることが知られている Z 型と B 型は高い伝播効率を示した。また、Z 型導波路上における波の局在性は周波数によって変化しないが、B 型導波路上における波の局在性は周波数によって大きく変化することが分かった。

【まとめ】 QVHE に基づく異なる3種類の境界構造から成る弾性波導波路において、弾性波の伝播及び局在性を観測した。発表では、上記について、具体的な測定結果を交えながら議論する予定である。

【参考文献】

[1] K. Funayama et al., *Commun. Phys.* 7, 409 (2024).

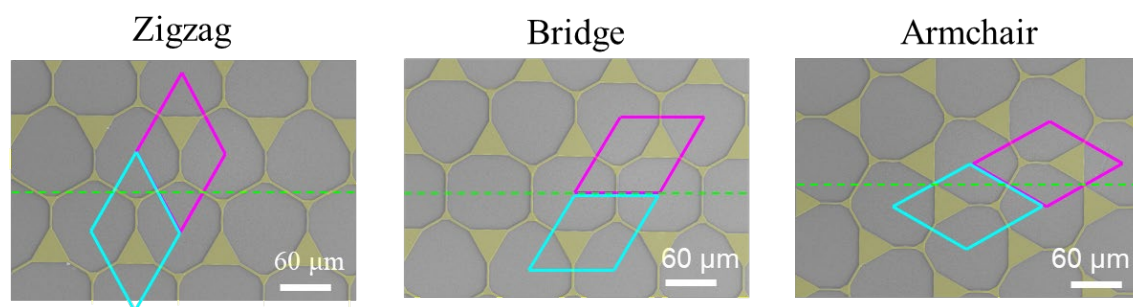


Fig. 1 SEM images of the elastic waveguides consisting of the zigzag, bridge, and armchair.

弾性エネルギーの貯蔵に向けたトポロジカルコーナーモードの大面积化

Area-Enlargement of Topological Corner Modes for Storage of Elastic Energy

岡山大学院自然¹ ○(D) 秦 佑介¹, 深谷 優梨¹, 鶴田 健二¹

Graduate School of Natural Science and Technology, Okayama Univ.¹,

○Yusuke Hata¹, Yuri Fukaya¹, Kenji Tsuruta¹

E-mail: tsuruta@okayama-u.ac.jp

トポロジカルフォノン結晶は欠陥や作製プロセスにおけるばらつきに対してロバストな境界状態が現れるため、エネルギー散逸の小さな弾性波デバイス設計に有用であると注目されている。特に、より低次元に境界状態が現れる高次トポロジカル状態 (Higher-order Topological States: HOTS) は、設計した領域に弾性エネルギーを貯蔵する機能を付与することができると期待される[1]。しかしながら、HOTS は狭小な領域に閉じ込められているので、電気・光エネルギーとの変換が困難である。本研究では、HOTS を有するカゴメフォノン結晶[2]の境界に中間領域を挿入[3][4]することで、コーナーモードが大面积化できることを明らかにしたので報告する。

本研究で設計したフォノン結晶の単位格子の構造を Fig. 1(a) に示す。六角形のサイトをつなぐボンドの幅 (w_1, w_2) が HOTS に寄与し、 $w_1 < w_2$ のときにトポロジカル不変量であるワニエ中心が単位格子の端に位置し、HOTS が現れる[2]。従来構造では $w_1 < w_2$ の非自明領域を $w_1 > w_2$ の自明領域で囲むことで非自明領域の角に HOTS を生じさせる (Fig. 1(b) 左)。本研究で提案する構造では、自明領域と非自明領域の間に Fig. 1(b) の右側で示すような $w_1 = w_2$ の中間領域を挿入している。両構造について有限要素法で固有周波数解析を行った結果を Fig. 1(c) に示す。従来構造では非自明領域の角に変位が局在しており、角から離れると急速に減衰している。一方、提案構造ではコーナーモードが中間領域の角付近に均一に広がっている。破線で囲んだそれぞれの角領域に蓄積されたエネルギー比率を計算したところ、従来構造では 21.6% に留まったのに対して提案構造では 79.3% まで上昇した。これらの結果より、中間領域を挿入することで大面积に効率よく弾性エネルギーを集中させられることが明らかとなった。本研究から蓄エネルギーやエネルギーハーベスティングの分野に適用できることが示唆される。

謝辞：本研究の一部は科学研究費補助金（課題番号 JP21H05020）の支援のもとで実施された。

参考文献：[1] B. Xie *et al.*, Nat. Rev. Phys. **3**, 520-532 (2021). [2] M. Ezawa, Phys. Rev. Lett. **120**, 026801 (2018).

[3] M. Wang *et al.*, Nat. Commun. **11**, 3000 (2020). [4] C. Zhang *et al.*, Opt. Mater. Express **14**(7), 1756-1766 (2024).

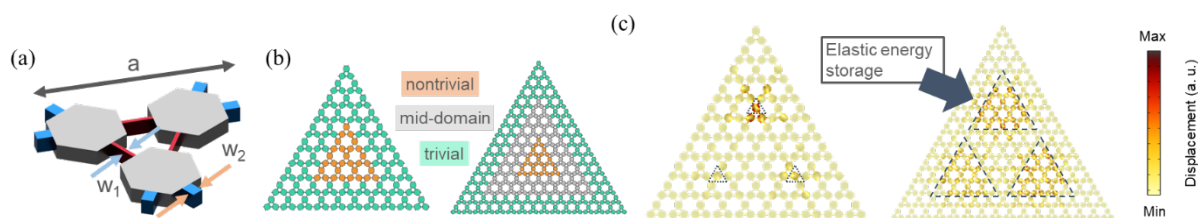


Fig. 1 (a) A unit cell of phononic crystal. Red and blue bonds indicate intra- and inter-connection for each site with the widths w_1 and w_2 , respectively. (b) The schematic conventional (left) and proposed (right) structure. In the structure we propose, mid-domain region is inserted. (c) The displacement field of eigenmodes calculated by finite element analysis. Dotted lines denote the corner area of conventional (left) and proposed (right) structure, respectively.

ナノギャップの熱輸送における電極に吸着した分子の影響

Effect of adsorbed molecules on heat transport between gold nanogap electrodes

阪大院基礎工¹, [○]多田 瑞生, 岸本 知磨, 花村 友喜, 山田 亮, 多田 博一

Σ -Osaka Univ., [○]Mizuki Tada, Kazuma Kishimoto, Yuki Hanamura, Ryo Yamada, and Hirokazu Tada

E-mail: tada_m@molelectronics.jp

ナノスケールの空間（ナノギャップ）では熱は輻射によって輸送される。熱の輸送を担う電磁波の波長は $1\ \mu\text{m}$ 程度であり、ギャップ間距離がそれよりも短くなると、近接場効果が顕著となり、エバネッセント波によって熱輸送が増大することが知られている[1]。数 nm 以下まで近接させたナノギャップでは、近接場効果では説明できない巨大な熱伝導度が観測され、大きな関心を集めている[2]。電子のトンネル効果や、電極間に静電的に結合したフォノンによる熱輸送の理論モデルなどが提案されているが[3]、熱輸送機構の解明には至っていない。

我々はこれまで、ナノギャップにおける熱輸送現象を測定するため、金ナノギャップ電極の電極間距離を制御できる素子を開発し、フォノンが $1\ \text{nm}$ 程度のギャップを伝搬することを明らかにした[4]。この熱伝導は電極表面の構造や吸着物に影響を受けることが予想される。

本研究では、金表面と強く結合するチオール基を末端に持つ分子を導入し、吸着物質がナノギャップの熱輸送に与える影響を調べた。Fig. 1 に 4,4'-ビフェニルジチオール (BPDT) (a) と 1,6-ヘキサンジチオール (HDT) (b) を導入した電極間の熱伝導度を示す。距離 d は、電気伝導度が量子化コンダクタンス $G_0 = 77.5\ \mu\text{S}$ を示すところを接点 ($d = 0$) として、トンネル電流の d 依存性から見積もった。分子を導入していない金電極間では $d \lesssim 1\ \text{nm}$ で熱伝導度が大きくなる（図の白破線）が、分子を導入した電極間では、それよりも大きな距離 ($d \lesssim 4 \sim 6\ \text{nm}$) で熱伝導の増大が観測された。また、BPDT は、HDT に比べて、大きな熱伝導度を示す傾向が見られた。環状構造からなる BPDT は、HDT に比べて多くの振動モードを持つ。これらの振動モードが電極間で共鳴することでフォノンの輸送が増大したと考えられる。これらのことから、数 nm 以下まで近接したナノギャップではフォノンによる熱輸送が支配的であり、その大きさは電極表面近傍の振動モードに依存することが示された。

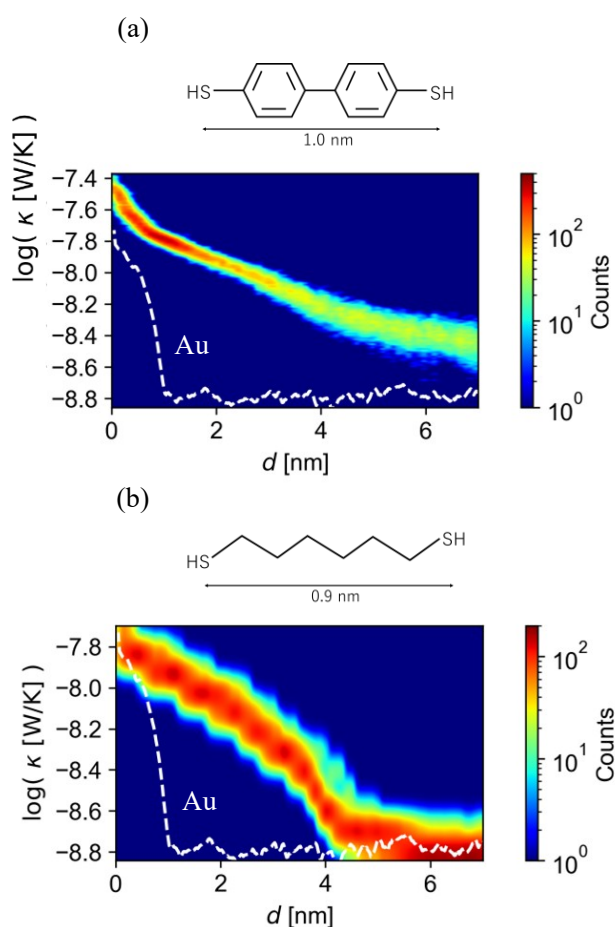


Fig.1. Distance dependence of thermal conductance across nanogap electrodes with (a) BPDT and (b) HDT.

【参考文献】

- [1] E. Rousseau *et al.*, *Nat. Photon.* **3**, 514-517 (2019).
- [2] K. Kim. *et al.*, *Nature* **528**, 387-391 (2015).
- [3] T. Tokunaga *et al.*, *Phys. Rev. B* **104**, 125404 (2021).
- [4] Y. Hanamura. *et al.*, *Nanoscale*. **17**, 1585-1591 (2025).

金属-半導体マイクロ 2 次元構造における熱輻射スペクトル解析

Thermal radiation spectrum analysis of metal-semiconductor micro two-dimensional structures

千葉大工 大島拓巳, 吉川大樹, 石谷善博

Chiba Univ, Takumi Oshima, Daiki Yoshikawa, Yoshihiro Ishitani

Email: Ishitani@faculty.chiba-u.jp

これまで我々は、半導体結晶表面に形成した金属のライン&スペース（グレーティング）構造の加熱によりテラヘルツ〜中赤外発光が得られることを報告した[1]。この発光は、金属に挟まれた半導体領域におけるコヒーレントな LO フォノンに由来する界面分極電荷による電気双極子に由来すると考えられる。また、これまでの 2 次元構造に関する報告では、円環構造や正方格子構造では偏光依存が解消されることを示した。本研究では、正方格子構造、円環構造における、LO 共鳴の発光強度、周波数および周波数幅の構造依存性について解析を行った。

アンドープ GaAs 基板上にレジストを塗布し、フォトリソグラフィ法により 1 次元および 2 次元グレーティング構造を形成した。放射窓部の幅は $2\mu\text{m}$ で、金属幅は $8\mu\text{m}$ であった。サンプルの発光測定では、試料を 630 K に加熱し、放射は偏光子を入れた FTIR 分光高度計および TGS 検知器により計測された。図 1 に測定された正方格子の発光スペクトルを示す。ライン&スペース構造の発光スペクトルを用いて正方格子構造の発光スペクトルを見積もり、実際の発光スペクトルと比較すると、正方格子構造の交差点での損失はほとんど考慮しなくてよいと考える。また、LO フォノンが LO フォノン共鳴発光に消費され、黒体輻射成分が減少している可能性がある。図 2 に円環構造の発光スペクトルを示す。円環構造の場合、ライン&スペース構造の発光ピークと比較して、 $2\sim 5[\text{cm}^{-1}]$ 高エネルギー側にシフトしていることが確認された。円環構造はライン&スペース構造と比較してピークがクリアであり、バックグラウンドの影響は小さい。そのため、このピークシフトはバックグラウンドの影響ではなく、メカニズムによるものであると考えられるが、原因は不明である。

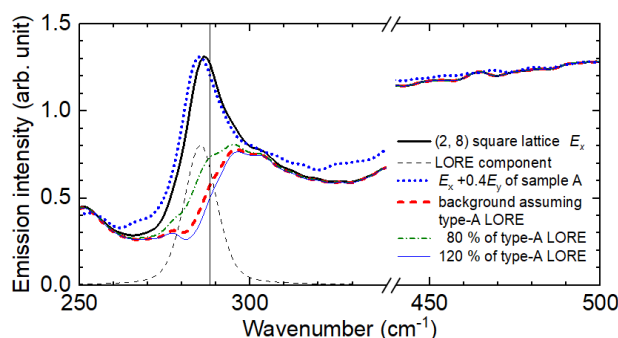


Fig.1: 正方格子構造の発光スペクトル

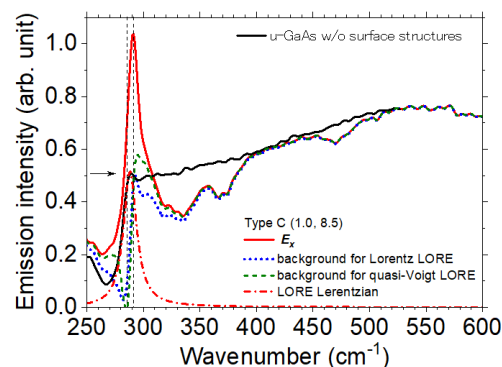


Fig.2: 円環構造の発光スペクトル比較

[1] Y. Ishitani *et al.* Appl. Phys. Lett. **113**, 192105 (2018)