

専攻名 電子・物理工学  
 学籍番号 201130108  
 学生氏名 山本晃平  
 学位名 博士(工学)  
 指導教員 小林伸彦

博士論文題目 原子レベルからの熱伝導の理論研究

近年、エレクトロニクス分野においてムーアの法則に従い続けてきた素子の微細化、集積化が困難に直面している。素子の微細化および集積化を妨げている重要な問題の一つが発熱問題である。CPU を高速動作させることで消費電力は増大し、集積化することで単位面積当たりの発熱量はさらに増大する。その帰結として CPU 単体の高性能化による計算性能の向上が困難となり、放熱性能に優れた素子の開発が更なる CPU 高性能化に向けた課題となっている。放熱性能の向上には素子を高い熱伝導率の物質で構成することが重要であるが、微細化によってナノメートルサイズになった素子の熱伝導率はバルクの熱伝導率とは異なる。例えば、最近のシリコンナノワイヤー(SiNW)の熱伝導率を測定した例では、これまで物質固有の値であると考えられていた熱伝導率はその形状に依存して変化することが明らかになった<sup>1)2)</sup>。またこの熱伝導率の変化に伴い、SiNWの熱電変換効率がバルクの場合よりも著しく向上するという報告もある<sup>3)</sup>。現在、ナノメートルサイズの物質に対する熱伝導率の測定は大変な困難を伴い、またその実験結果の解釈も難しいという状況下では理論計算による研究が大変重要な役割を担っている。

これまで熱伝導率を求める理論的手法としては、熱が拡散方程式に従い伝導する領域で有効な古典ボルツマン方程式を用いるもの<sup>4)5)</sup>、分子動力学法に基づく計算法<sup>6)7)</sup>、さらにフォノンの量子性を頭わに含みその波動性を正確に記述する透過率法<sup>8)9)</sup>などが用いられてきた。本研究では原子レベルから熱伝導現象を調べ、熱伝導度の温度、原子種、物質形状、欠陥に対する依存性及び上記因子間の関係を明らかにすることを目的とする。そこで低温におけるバリスティック熱伝導の記述まで行える透過率法を採用し、特に物質の原子レベルでの形状や欠陥の効果を取り入れるために透過率の計算には非平衡グリーン関数法を採用した<sup>10-13)</sup>。

本研究ではナノワイヤーにおける熱伝導度の温度、断面積、欠陥依存性とそれら因子間の関係、さらに原子種の違いによる効果も明らかにした<sup>14-17)</sup>。加えてフォノン間散乱の効果解析する計算法を開発し、これによってフォノン寿命を計算した。また、カーボンナノチューブ(CNT)のフォノンバンドに存在するバンドギャップについて、その起源を明らかにした<sup>18)</sup>。

まず、非平衡グリーン関数法を用いた熱伝導計算法を記述し<sup>11-13)</sup>、良く知られた電気伝導計算との比較も行う。系全体のハミルトニアンを以下で書く。

$$H = \sum_{\substack{i \in \text{sys} \\ \alpha = x, y, z}} \frac{1}{2M_i} p_{i\alpha}^2(t) + \frac{1}{2} \sum_{\substack{i, j \in \text{sys} \\ \alpha, \beta = x, y, z}} u_{i\alpha}(t) K_{i\alpha, j\beta} u_{j\beta}(t)$$

ここで $M_i$ は $i$ 番目原子の質量、 $u_{i\alpha}(t)$ は平衡位置からの変位演算子である。このハミルトニアンを以

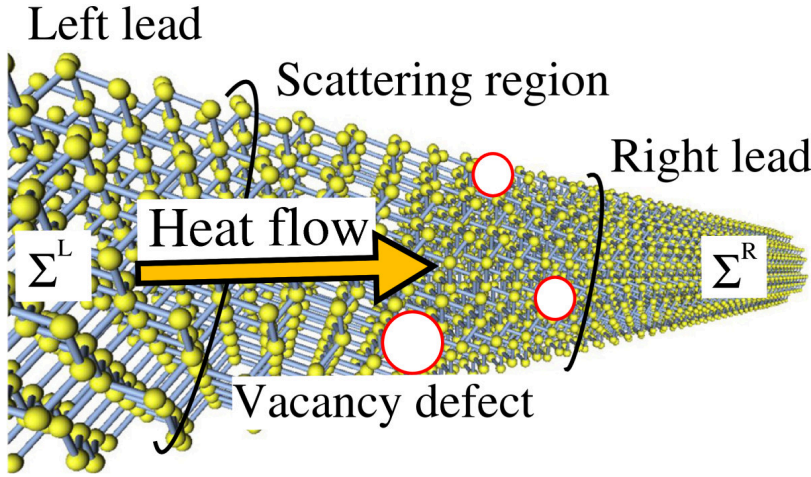


図 1. 計算法概念図

系は散乱のない、半無限の左、右領域と、その間に挟まれた散乱領域とに分割する。

下の四つに分ける  $H = H_L + H_S + H_R + H_{int}$  (図 1)。ここで  $H_{L(R)}$  は左 (右) のリードを、 $H_S$  は散乱領域を、 $H_{int}$  は散乱領域と左右のリードとの相互作用をそれぞれ表すハミルトニアンである。このハミルトニアンに対し左リードから散乱領域へ流れる熱流  $J_{th}$  は次式の形で書ける。

$$J_{th} = -\langle \dot{H}_L \rangle = \int_0^\infty \frac{d\omega}{2\pi} \hbar \omega [n_{BE}(\omega, T_L) - n_{BE}(\omega, T_R)] \zeta(\omega)$$

ここでブラケットは物理量の非平衡状態の統計平均を表している。 $n_{BE}(\omega, T_{L(R)})$  はボーズ・アインシュタイン分布関数

$$n_{BE}(\omega, T) = \frac{1}{e^{\hbar\omega/k_B T} - 1}$$

であり、左 (右) のリードの温度  $T_{L(R)}$  の平衡状態における周波数  $\omega$  のフォノンの存在数を表している。透過係数  $\zeta(\omega)$  は散乱領域をフォノンが透過する確率であり、次式で与えられる。

$$\zeta(\omega) = Tr[\Gamma_L(\omega) G^r(\omega) \Gamma_R(\omega) G^a(\omega)]$$

$G^{r/a}(\omega)$  は散乱領域における遅延 (先進) グリーン関数であり、

$$G^{r/a}(\omega) = [\omega^2 M - K - \Sigma_L^{r/a} - \Sigma_R^{r/a}]^{-1}$$

と求めることができる。 $M$  は対角成分に原子の質量が並ぶ対角行列であり、 $\Sigma_{L(R)}^{r/a}$  は左 (右) のリードが散乱領域と結合した時の遅延 / 先進自己エネルギーである。これは散乱のないリードにおいて独立に計算することが可能な量である。本研究では複雑な原子構造に対する自己エネルギーを計算するために、表面グリーン関数の方法<sup>19)</sup>を用いた。これを用いて  $\Gamma_{L(R)}(\omega)$  は

$$\Gamma_{L(R)}(\omega) = i[\Sigma_{L(R)}^r(\omega) - \Sigma_{L(R)}^a(\omega)]$$

と書ける。

動力学行列 (Dynamical Matrix)  $K$  は系の挙動を決定する。この行列の各要素は力定数 (Force constant) から求めることができ、原子  $i$  にかかる力の  $\alpha$  方向成分  $F_{i\alpha}$  を原子  $j$  の座標の  $\beta$  方向成分  $r_{j\beta}$  によって差分することにより次式で得られる。

$$K_{i\alpha, j\beta} = \frac{\partial^2 E}{\partial r_{i\alpha} \partial r_{j\beta}} = \frac{-[F_{i\alpha}(+\Delta R_{j\beta}) - F_{i\alpha}(-\Delta R_{j\beta})]}{2\Delta R_{j\beta}}$$

ここで  $E$  は系の全エネルギーであり、 $F_{i\alpha}$  は  $E$  の  $r_{i\alpha}$  に対する微分によって計算できる。すなわち

$F_{i\alpha}(+\Delta R_{j\beta})$ は原子 $j$ を平衡位置から $\Delta R$ だけ $+\beta$ 方向へ動かした原子配置において計算された $F_{i\alpha}$ を意味している。 $\Delta R$ は変位であり、全エネルギー計算に経験ポテンシャルを用いる場合には $\Delta R = 2 \times 10^{-4} \text{ \AA}$ とし、第一原理計算を用いる場合には計算している原子構造における最隣接原子間距離の1%とした。本研究においてSiNW、ダイヤモンドナノワイヤー (DNW)、CNTを対象とした計算を行ったが、その際全エネルギー計算にテルソフポテンシャル<sup>20)</sup> (シリコン) およびブレナーポテンシャル<sup>21)</sup> (カーボン) を用いた。どちらのポテンシャルも様々な実験値を再現し、また共有結合系を良く記述するようにボンドオーダータイプに構築された原子間ポテンシャルである。

熱伝導度は無限小の温度差を与えた時に流れる熱流で定義され、上記より

$$G_{th}(T) = \frac{dJ_{th}}{dT} = \int_0^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \hbar \omega \zeta(\omega) \frac{\partial n_{BE}(\omega, T)}{\partial T}$$

と表せる<sup>22)</sup>。一方、比較のために電気伝導度を示すと

$$G_{el}(\mu) = \frac{dJ_{el}}{dV} = \frac{2e^2}{h} \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon T(\varepsilon) \left( -\frac{\partial f_{FD}(\varepsilon, \mu)}{\partial \varepsilon} \right)$$

であり、この違いはキャリアとその分布関数の違いにある。電子系はフェルミ粒子であるため、フェルミ・ディラック分布関数 $f_{FD}(\varepsilon, \mu)$ に従い分布し、フォノン系はボーズ粒子であるため、ボーズ・アインシュタイン分布関数 $n_{BE}(\omega, T)$ に従い分布する。電気伝導ではフェルミエネルギー付近の電子しか伝導に寄与しないのに対し、熱伝導は温度によって決まる最大のフォノンエネルギーまでの全フォノンが伝導に寄与することが特徴である。これはフェルミ統計とボーズ統計違いを反映しているためである。

透過係数 $\zeta(\omega)$ は系に散乱がない場合は、その周波数 $\omega$ におけるフォノンバンドの本数になる。一方、散乱が存在する場合はその大きさに依存して透過率は低下する。大きな熱伝導度を得るためには原子構造に応じて決まるフォノンバンド数を多くし、散乱を減らして透過係数を大きくする必要がある。フォノンバンドの局在を妨げ、フォノンバンドのエネルギー分散幅が大きくなると被積分関数の値が大きくなる。

SiNW、DNWについて計算された熱伝導度を図2(左)及び図3(左)に示す<sup>15)</sup>。ナノワイヤー構造ではバルクと違い、フォノンバンドが折り畳まれ単位エネルギー当たりのバンド数が多くなる。一方で伝導方向以外の自由度が制限されることで一本一本のバンド分散幅は小さくなる。また、アコースティックフォノンモードの数はバルクの3本、すなわち縦波1本横波2本に加えねじれモードが加わり、4本となる。このアコースティックフォノンの数はナノワイヤーの直径によらず常に4本である。これはアコースティックフォノンモードがユニットセル全体が一斉に動くモードであり、ユニットセル内の詳細な原子構造によらないことから来ている。一方で全フォノンバンド数はユニットセルが含む原子の数、いわばワイヤー断面の原子数によって決まっており、SiNW及びDNWでは円柱状の形状を反映して、断面原子数は直径の2乗に比例している。なお、CNTについてはその円筒状の形状を反映して、直径の1乗に比例している (図7(下右)参照)。

低温においてはこのアコースティックフォノンのみが熱伝導度に寄与し、他のモードは温度の上昇とともに低エネルギーのものから順に徐々に寄与していく。このため、極低温においては、熱伝導度はワイヤーの直径によらず一定の値を取る。それから温度が上昇するに伴って徐々にアコースティックフォノン以外のバンドが熱伝導度に寄与し始め、熱伝導度が直径依存性を持つようになる。十分高温になると熱伝導度ははっきりと直径の2乗 (CNTでは1乗) に比例するようになる。この直径の2乗に比例する熱伝導度は古典的なオームの法則と一致するので、オーミック伝導と呼べる。一方で低温になった時に依存性が2乗を下回る領域は量子的な温度領域ということが出来る。

この熱伝導度の直径依存性に対する量子効果が現れるのは SiNW においては約 100[K]以下、DNW においては約 300[K]、つまり室温以下である。

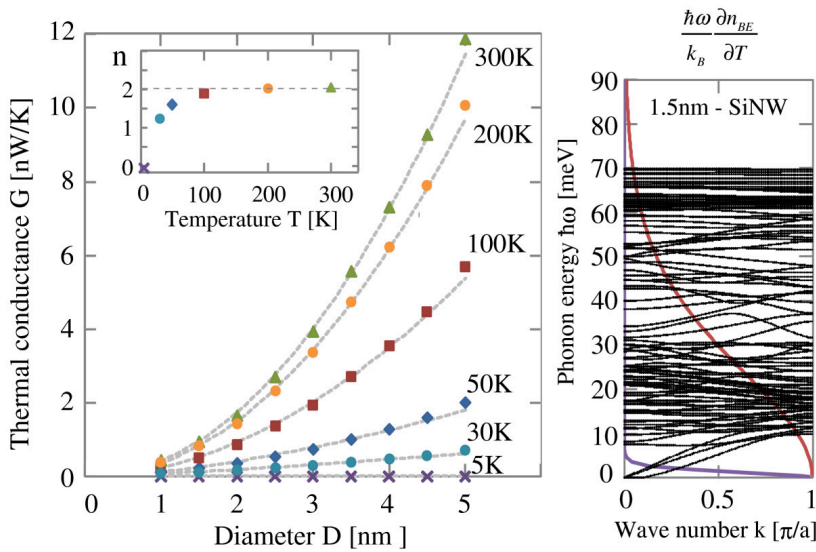


図 2. (左) シリコンナノワイヤーの熱伝導度の直径および温度依存性。(内挿図) 直径依存性の温度依存性。(右) シリコンナノワイヤーのフォノンバンド構造。紫線が 5 [K]において熱伝導度に寄与するフォノンを示し、赤線が 100[K]において寄与するフォノンを示す。

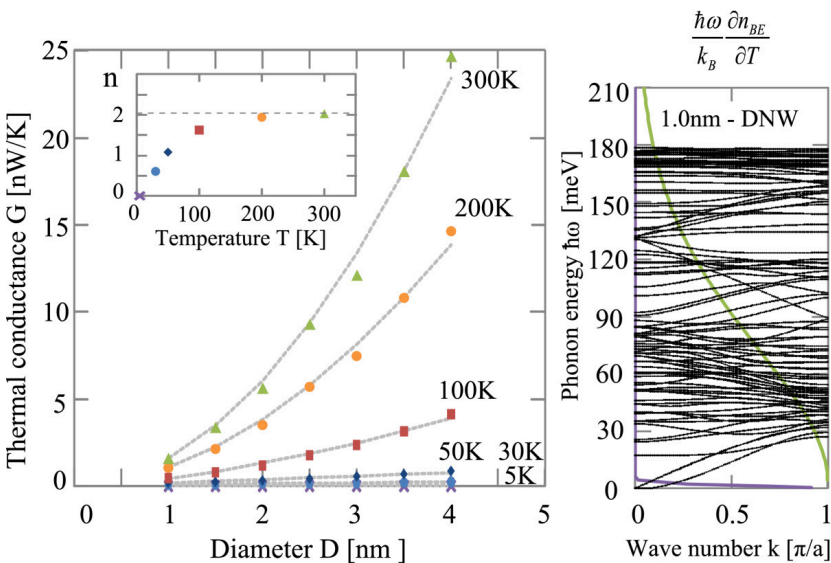


図 3. (左) ダイヤモンドナノワイヤーの熱伝導度の直径および温度依存性。(内挿図) 直径依存性の温度依存性。(右) シリコンナノワイヤーのフォノンバンド構造。紫線が 5 [K]において熱伝導度に寄与するフォノンを示し、赤線が 300[K]において寄与するフォノンを示す。

この直径依存性の温度変化という現象は一次元構造において一般的であり、一般論を構築することが出来る<sup>16)</sup>。実際にこの現象は、わずか二つのパラメーターによって特徴づけることが出来る。まず低温における直径に全く依存しないユニバーサルな熱伝導度は、どのような一次元系であっても十分低温ではアコースティックフォノンのみが熱伝導に寄与することで現れる。図 4 の(a)(b)(c)にそれぞれ直径 1.5nm の SiNW、直径 1nm の DNW、カイラリティ(5,5)の CNT のフォノンバンドを示したが、どの系においても、最低エネルギー付近において 4 本になっている。一方で全フォ

ノンバンド数はワイヤーの断面の原子数に比例してきまる。そこで透過関数をモデル化し、実際のフォノンバンドにおいてバンドが4本であるエネルギー領域の上端（これを $\omega_0$ とする）までは4となり、そこからフォノンバンドが存在する最高エネルギー（これを $\omega_{max}$ とする）までは断面原子数に比例する値を取る透過関数というものを考える（この比例定数を $\beta$ とする）。1.5nm-SiNW に対応するものが図4(e)であり、(5,5)CNT に対応するものが図4(f)である。また、この透過関数を採用することは、図5(b)のようなフォノンバンドの近似を行うことと等価である。

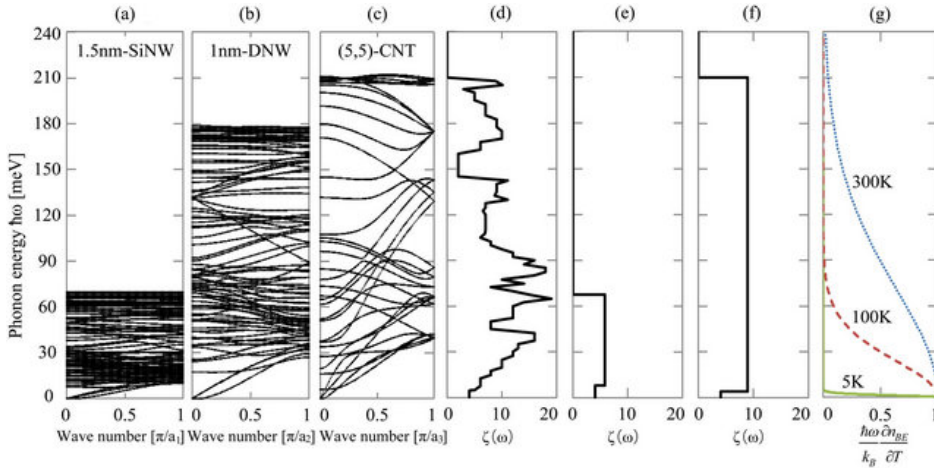


図4. 直径1.5nmのSiNW(a)、直径1nmのDNW(b)、カイラリティ(5,5)のCNT(c)のフォノンバンド。また直径1.5nmのSiNW(e)、(5,5)CNT(f)のモデル透過関数。(g)5[K](緑)、100[K](赤)、300[K](青)の時に熱伝導に寄与するフォノンエネルギー分布。

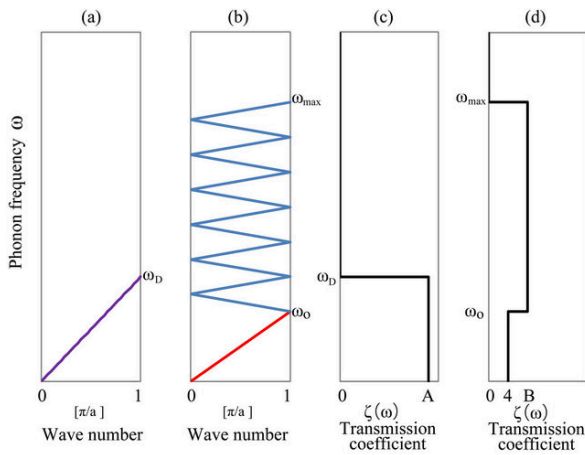


図5. (a)デバイ近似におけるモデルフォノンバンド。(b)提案モデルにおけるモデルフォノンバンド。(c)(a)に対応した透過関数。(d)(b)に対応した透過関数

このようなモデルを用いて計算した熱伝導度の直径依存性の温度依存性は、 $\Omega = \omega_0/\omega_{max}$  と  $\beta$  の2つのパラメーターによって特徴づけられる。ここでは円柱状のSiNW、DNWと円筒状のCNTを形状にはよらず同等に扱い、フォノンバンドによる違いのみを見るために、熱伝導度の直径依存性ではなく、ユニットセル原子数依存性を見ることにする。原子数依存性の温度依存性について、上記2つのパラメーターの依存性を示したのが図6である。このうち $\Omega$ を変化させたのが図6(左)である。フォノンバンドの最高エネルギー $\omega_{max}$ と比較してフォノンバンド数が4本である領域 $\omega_0$ が大きければ $n=0$ である領域、つまり熱伝導度が直径に全く依存しない温度領域が大きくなる。

逆に小さくなれば、ほとんど全ての温度領域で  $n = 1$  となる。次に  $\beta$  を変化させたのが図6 (右) である。 $\beta$  が変化しても  $n = 0$  となる領域は全く変化しない。変化するのは、 $n = 1$  へ近づく早さだけである。同じ温度で見れば、 $\beta$  が大きいほど  $n$  の値が大きい。

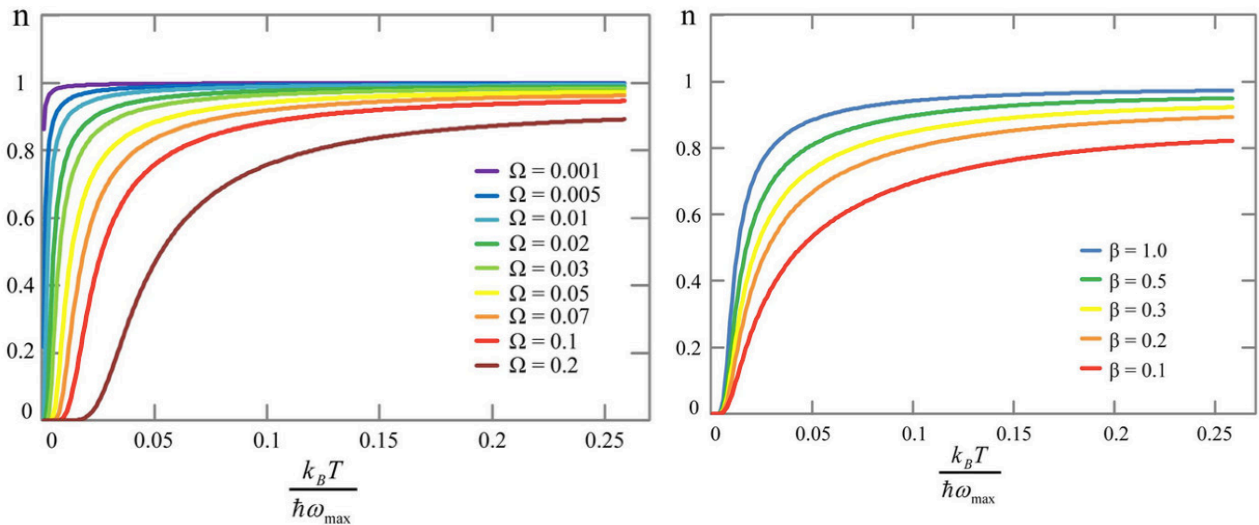


図 6. 熱伝導度  $G_{th}$  の断面原子数  $N$  依存性の係数  $n$  ( $G_{th} \propto N^n$ ) の温度 ( $k_B T / \hbar \omega_{max}$ ) 依存性。(左)  $\beta = 1$  とした時の  $\Omega = \omega_0 / \omega_{max}$  の変化に対する依存性。(右)  $\Omega = 0.05$  とした時の透過関数の全原子数比例の比例定数  $\beta$  の変化に対する依存性。

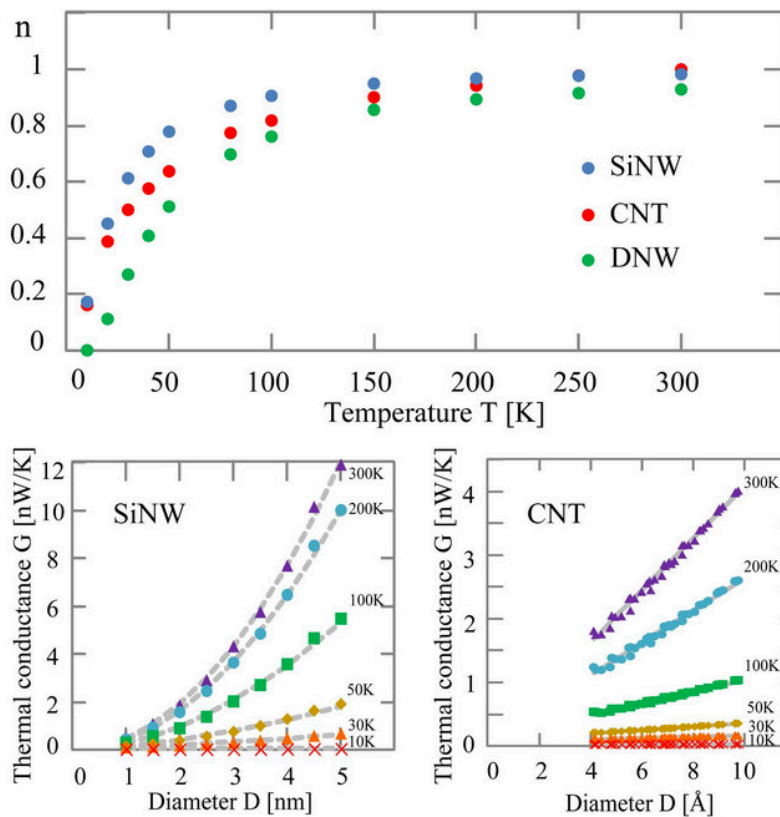


図 7. (上) 熱伝導度  $G_{th}$  のユニットセル内原子数  $N$  依存性の係数  $n$  ( $G_{th} \propto N^n$ ) の温度依存性。(下左) SiNW の熱伝導度の直径依存性。(下右) CNT の熱伝導度の直径依存性。

また、実際に SiNW、DNW、CNT で熱伝導度の断面原子数依存性を計算したものが図 7 (上) である。3 者の違いは上述したモデルによって理解することが出来る。係数  $n$  が 0 となる温度が

最も高いのは DNW であるが、これは図 4(b)で見られるように、 $\Omega = \omega_0/\omega_{max}$  が 3 者の中で一番大きいからである。また、SiNW において係数  $n$  が温度上昇と共に急激に 1 に近づいているように見えるのは、温度のスケールリングによって理解することが出来る。モデル計算における温度軸は  $k_B T/\hbar\omega_{max}$  であり、かつ SiNW においてはその最大フォノンエネルギーが DNW、CNT に比べて低いために、同一の温度軸  $T$  を取った場合、SiNW における係数  $n$  が他に比べより急激に変化しているように見えるのである。

ここで CNT のフォノンバンド構造についてよく調べてみると、35 から 40[THz]付近でフォノンモードが存在しないものがある。フォトニック結晶のアナロジーから最近フォノン結晶も注目されており、その基礎としてどのような構造の CNT がどのようなフォノンバンドギャップを持つかを調べることは重要である。本研究ではグラフェンのフォノンバンドを基にそれを丸めた際にどのようなバンドギャップを持つべきか、と実際の CNT ではどのようなバンドギャップがあるか、を計算によって明らかにした<sup>17)</sup> (図 8 参照)。

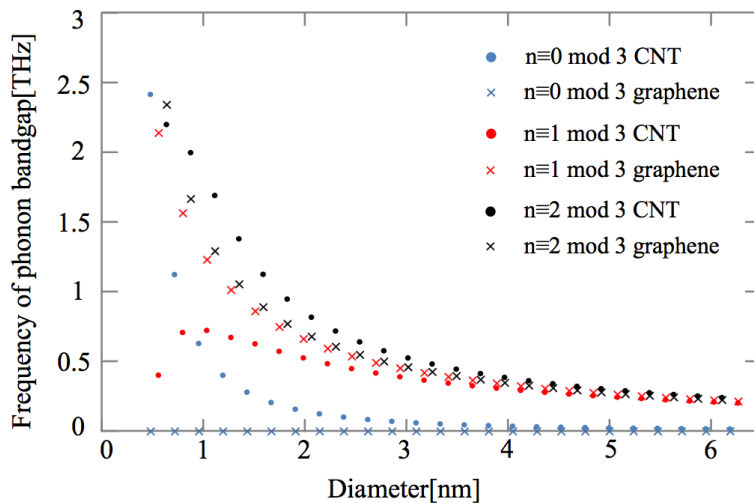


図 8. カイラリティ  $(n,0)$  であるジグザグ CNT のフォノンバンドギャップの直径依存性 ( $n = 6 \sim 77$ )。丸印で示されているのが実際の CNT において計算されたフォノンバンドギャップであり、バツ印で示されているのがグラフェンのバンドから導かれるバンドギャップである。3色はそれぞれ  $n$  を 3 で割った際に余り 0 のもの (青)、余り 1 のもの (赤)、余り 2 のもの (黒) である。

CNT のカイラリティ  $(n,m)$  において、 $n - m$  が 3 の倍数であるとき、バンドギャップは存在しないことがグラフェンのフォノンバンドから導かれる (図 8 バツ印)。しかし実際には直径が小さくなってくると曲率の効果が大きくなり、グラフェンのフォノンバンドから予測できる値からは乖離し、 $n - m$  が 3 の倍数であってもバンドギャップを持つようになる (図 8 丸印)。

次に欠陥の効果について述べる。図 7 (下左) 及び (下右) で示した熱伝導度は、CNT においては実験と良く一致している<sup>23)</sup>。一方 SiNW では欠陥の効果を検討しなければ、計算された熱伝導度は実験より大きな値を持つ。これより SiNW においては、欠陥による効果が熱伝導度に大きな影響を与えていると考えられている。例えばこれに関して欠陥配置の統計平均計算などがある<sup>24)</sup>。

本研究では欠陥が熱伝導度を与える影響を明確にするため、欠陥はワイヤー中に一つだけ導入する。その計算結果が図 9 である<sup>18)</sup>。ワイヤー断面の中心原子を取り去った「中心欠陥」と表面原子

を取り去った「表面欠陥」をそれぞれ導入したワイヤーについて熱伝導度を計算した。その結果、興味深いことに欠陥の数は同じであるにもかかわらず異なる熱伝導度が得られた。計算を行った全ての直径において「中心欠陥」の方が「表面欠陥」よりも熱伝導度をより減少させるのである。このことはナノワイヤーにおいてはもはや欠陥の効果はその密度だけでは議論できず、欠陥の位置によってその効果が大きく変わることを示している。

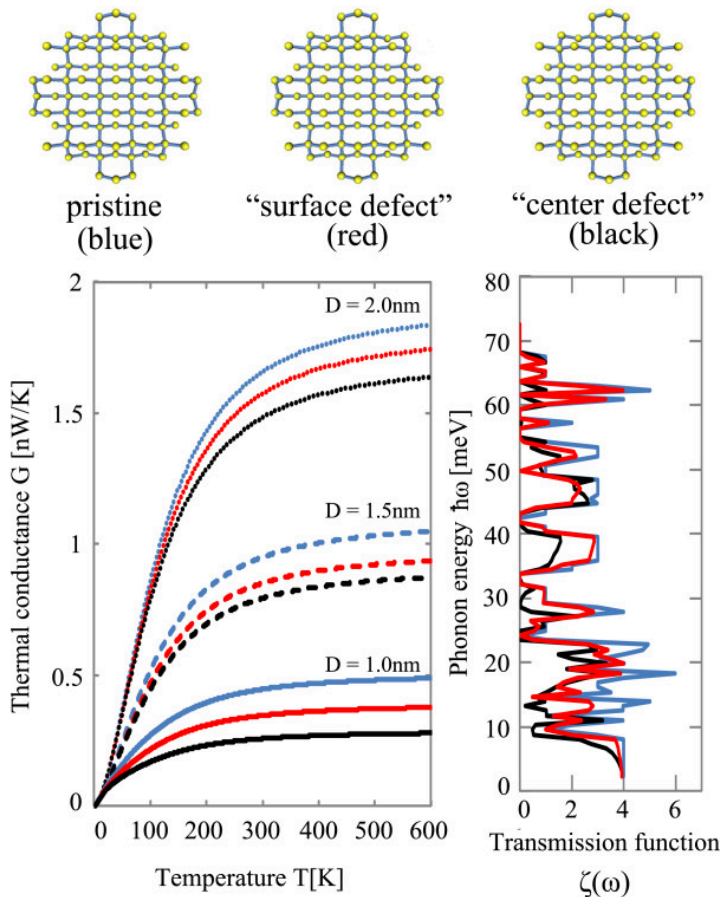


図 9. (上) 直径 2nm の SiNW における散乱部の原子モデル。(上左) 欠陥のない断面 (上中) 「表面」の断面 (上右) 「中心欠陥」の断面。(下左) 直径 2.0nm、1.5nm、1.0nm の SiNW における、欠陥のない場合 (青)、「表面欠陥」の場合 (赤)、「中心欠陥」の場合 (黒) の熱伝導度の温度依存性。(下右) 直径 1.0nm の SiNW における、欠陥のない場合 (青)、「表面欠陥」の場合 (赤)、「中心欠陥」の場合 (黒) の透過関数。

さらに異種原子間の界面による散乱の効果も計算した。物質として、シリコンとアルミニウムを半導体、金属の例として選び、それぞれ単体での透過係数と熱伝導度、及びシリコン/アルミニウム界面の透過係数と熱伝導度を計算した。その結果、界面を含んだ系の伝導度は界面の散乱効果により単体のアルミやシリコンよりも減少することを明らかにした。透過係数はすべてのエネルギー範囲でシリコン、アルミニウム単体のものよりも減少し、その結果熱伝導度があらゆる温度領域において単体の結果よりも減少することを明らかにした。



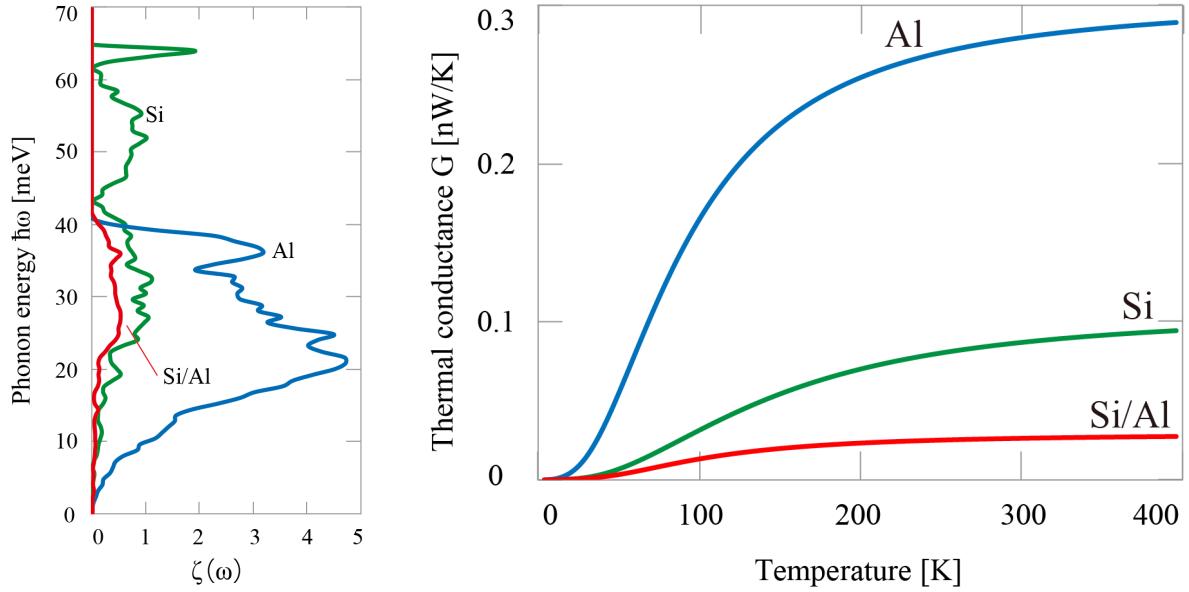


図 10. (左) アルミニウム単体 (青) とシリコン単体 (緑) 及びシリコン/アルミニウム界面 (赤) での透過係数。(右) アルミニウム単体 (青) とシリコン単体 (緑) 及びシリコン/アルミニウム界面 (赤) での熱伝導度の温度変化。

最後に熱伝導度計算における非調和散乱の効果についても考えたい。これまでの計算は原子間ポテンシャルを 2 次で近似することで得た結果である。この近似は調和近似と呼ばれ、調和近似の範囲内でフォノンバンドを計算した。この近似では各フォノンの寿命は無限大となる。実際の原子間ポテンシャルは原子変位に対する 2 次の項だけでは説明出来ない。そこで調和項以外、つまり 3 次以降の原子変位依存性、つまり非調和項の効果を検討することで、フォノン寿命が計算でき、高温における熱伝導度の低下が議論できるようになる。本研究では原子間ポテンシャルの 3 次項  $\Psi_{i,j,k}$  を次式の計算によって抽出した<sup>25)</sup>。

$$F_i = \sum_j \Phi_{i,j} \cdot x_j - \frac{1}{2} \sum_{j,k} \Psi_{i,j,k} \cdot x_j x_k$$

ここで  $F_i$  は原子  $i$  にかかる力であり、 $x_{j(k)}$  は原子  $j(k)$  の変位である。この得られた 3 次項を用いてフォノン寿命は

$$\frac{1}{\tau_{\vec{q}s}} = \pi \sum_{\vec{q}'s'} \sum_{s''} |V_3(\vec{q}s, \vec{q}'s', \vec{q}''s'')|^2 \times \left[ 2 \left( n_{\vec{q}'s'} - n_{\vec{q}''s''} \right) \cdot \delta \left( \omega(\vec{q}s) + \omega(\vec{q}'s') - \omega(\vec{q}''s'') \right) + \left( 1 + n_{\vec{q}'s'} + n_{\vec{q}''s''} \right) \cdot \delta \left( \omega(\vec{q}s) - \omega(\vec{q}'s') - \omega(\vec{q}''s'') \right) \right]$$

のように計算できる。また 3 次項の効果として引き起こされるフォノン間散乱の自己エネルギー  $\Sigma_{ph-ph}$  の計算を行い、その際の温度上昇によるフォノン寿命の減少も明らかにした。これらにより、温度上昇による熱伝導度の減少を定量的に評価可能となった。

文献

- 1) D. Li, Y. Wu, P. Kim, L. Shi, P. Yang and A. Majumdar: Appl. Phys. Lett. **83** (2003) 2934.
- 2) R. Chen, A. Houchbaum, P. Marphy, J. Moore, P. Yang and A. Majumdar: Phys. Rev. Lett. **101** (2008) 105501.
- 3) A. I. Boukai, Y. Bunimovich, J. T.-Kheli, J.-K. Yu, W. A. Goddard III and J. R. Heath: Nature **451** (2008) 168.
- 4) S. G. Walkauskas, D. A. Broid and K. Kempa: J. Appl. Phys. **85** (1999) 2579.
- 5) J. Zou and A. Balandin: J. Appl. Phys. **89** (2001) 2932.
- 6) S. G. Volz and G. Chen: J. Appl. Phys. **75** (1999) 14.
- 7) J. Siomi, and S. Maruyama: Phys. Rev. B. **73** (2006) 205420.
- 8) L. G. C. Rego and G. Kirczenow: Phys. Rev. Lett. **81** (1998) 232.
- 9) K. Saito, J. Nakamura and A. Natori: Phys. Rev. B. **76** (2007) 115409.
- 10) L. V. Keldysh: Sov. Phys. JETP **20** (1965) 1018.
- 11) Y. Meir and N. S. Wingreen: Phys. Rev. Lett. **68** (1992) 2512.
- 12) T. Yamamoto and K. Watanabe: Phys. Rev. Lett. **96** (2006) 255503.
- 13) J. Wang and J. S. Wang: Appl. Phys. Lett. **90** (2007) 241908.
- 14) 山本晃平、石井宏幸、広瀬賢二、小林伸彦: 表面科学 **32** (2011) 410.
- 15) K. Yamamoto, H. Ishii, N. Kobayashi and K. Hirose: Nanoscale Research Letters **8** (2013) 256.
- 16) K. Yamamoto, H. Ishii, N. Kobayashi, K. Hirose: Open Journal of Composite Materials **3** (2013) 48.
- 17) K. Yamamoto, H. Ishii, N. Kobayashi, and K. Hirose: Journal of Nanomaterials 2013 (2013) 525070.
- 18) K. Yamamoto, H. Ishii, N. Kobayashi, and K. Hirose: Appl. Phys. Express. **4** (2011) 085001.
- 19) M. P. Lopez-Sancho, J. M. Lopez-Sancho and J. Rubio: J. Phys. F. **14** (1984) 1205.
- 20) J. Tersoff : Phys. Rev. B. **38** (1988) 9902.
- 21) D. W. Brenner: Phys. Rev. B. **42** (1990) 9458.
- 22) A. Ozpineci and S. Ciraci: Phys. Rev. B. **63** (2001) 125415.
- 23) C. Yu, L. Shi, Z. Yao, D. Li and A. Majumdar: Nano. Lett. **5** (2005) 9.
- 24) T. Markussen, A. P. Jauho and M. Brandbyge: Phys. Rev. B. **79** (2009) 035415.
- 25) K. Esfarjani and H. T. Stokes: Phys. Rev. B. **77** (2008) 144112.