

TED Plaza

ナノ多結晶構造におけるフォノン輸送解析



堀 琢磨

東京農工大学 准教授
 大学院工学研究院 先端機械システム部門
 hori@go.tuat.ac.jp

1. はじめに

ナノ多結晶構造は、数 nm から数 μm の粒径の結晶粒からなる構造である。ナノ多結晶構造の半導体の熱伝導率は、本来の材料に比べて低い値を示すことが知られている。これは、半導体における熱伝導現象を支配するフォノン(格子振動)の輸送が、結晶粒界面との衝突によって阻害されるためである。こうしたフォノンの散乱による熱伝導率の低下は、ナノ多結晶構造のみならず、超格子やナノワイヤなど様々な構造においても確認されている。

ナノ多結晶構造を有する材料は、熱工学に関連した数多くの場面で用いられている。その中でも近年に最も多く研究が行われている対象は、熱電変換材料としての利用である。これは、熱電変換素子の変換効率 $ZT=S^2\sigma T/\kappa$ (S , σ , κ , T はそれぞれゼーベック係数、電気伝導率、熱伝導率、温度)によって決まるため、熱伝導率の低下は高効率化に向けた有効な手段であるからである。なお、一般に熱伝導率は格子熱伝導率と電子熱伝導率の2種類の寄与があるが、半導体では前者が支配的である。熱電変換材料をナノ多結晶構造化する際には、粉碎と焼結を用いる手法が知られる。この手法により Si 系(Zhu et al., 2009)や Bi_2Te_3 系(Poudel et al., 2008), PbTe 系(Biswas et al., 2012)などの様々な材料をナノ多結晶化することで、 ZT の向上を実現した研究が報告されている。その他にも、結晶成長によって合成したナノ多結晶構造 Si を熱電変換素子の材料として利用し、高い熱電変換性能を記録した例も報告されている(Dunham et al., 2016, Yanagisawa et al., 2020, Jugdersuren et al., 2022, Yanagisawa et al., 2024)。

熱電変換材料として以外にも、ヒートスプレッダとして期待されるダイヤモンドにおいて、ナノ多結晶構造の利用が研究されている。ダイヤモンドは他の材料に比べて非常に高い熱伝導率を有する(Broido et al., 2012)。そのため、GaN などの高い電流密度が与えられる次世代パワー半導体へのダイヤモンドヒートスプレッダの利用を想定した研究が報告されている(Felbinger et al., 2007, Cho et al., 2017, Tadjer et al., 2019)。ナノ多結晶ダイヤモンドは単結晶に比べて、コストや大量生産の面で有利である一方で、その熱伝導率は低いことが実験的に明らかになっている(Graebner et al., 1992, Anaya et al., 2015, Sood et al., 2016, Anaya et al., 2017, Cheng et al., 2018)。そのため、ナノ多結晶構造を有しつつも高い熱伝導率を持つダイヤモンドの開発が望まれる。

こうしたナノ多結晶構造の応用に際して、その性能を最大化することが求められる。そのため、ナノ多結晶構造における結晶粒の複雑な構造と、熱伝導率との定量的な関係の解明が必要である。熱伝導率の評価には実験的手法が最も有効であるが、ナノ多結晶構造の微視的な形状との関係に着目した際には、数値シミュレーションが有利である。実際に、シミュレーションを用いてナノ多結晶構造の熱伝導率を対象とする研究がこれまで数多く行われている。

そこで本稿では、ナノ多結晶構造におけるフォノン輸送の解析手法について述べる。一般的に用いられる手法の解説のほか、筆者が開発した独自の高速解析手法を紹介する。また、それらのフォノン輸送解析手法を用いた具体的な研究例を複数紹介する。

2. フォノン輸送の解析手法

2.1 モンテカルロ法によるボルツマン輸送方程式の解法

ナノ多結晶構造中のフォノンの輸送の模式図を、図1に示す。この図のように、フォノンはその輸送中に、フォノン同士との衝突と、界面との衝突を経験する。こうした衝突の頻度などによりフォノンによる熱の輸送されやすさ、すなわち熱伝導率が決定される。したがって、フォノン輸送の解析の際には、これらの現象を取り入れる必要がある。

フォノンの輸送の支配方程式は、ボルツマン輸送方程式である。ボルツマン輸送方程式は、空間 \mathbf{r} 、時間 t における粒子分布の保存則である。フォノンの場合は式(1)のように、電子の場合とは異なり外力項を持たず、粒子の流入出を表す移流項と、粒子同士の相互作用を表す衝突項を持つ。

$$\frac{\partial f_{\mathbf{k}s}(\mathbf{r},t)}{\partial t} + \mathbf{v}_{\mathbf{k}s} \cdot \frac{\partial f_{\mathbf{k}s}(\mathbf{r},t)}{\partial \mathbf{r}} = - \frac{f_{\mathbf{k}s}(\mathbf{r},t) - f_{\mathbf{k}s}^0(\mathbf{r},t)}{\tau_{\mathbf{k}s}} \quad (1)$$

ここで、左辺の分布関数 $f_{\mathbf{k}s}$ は波数 \mathbf{k} 、分枝 s のモードのフォノンの粒子数であり、 \mathbf{v} は群速度である。右辺の衝突項は、本来はより複雑であるが、緩和時間近似と呼ばれる簡略化によってこの形となる。ここで、 τ は緩和時間、 f^0 は系がフォノンの平衡分布であり、ボース粒子であるためボース・アインシュタイン分布である。ボース・アインシュタイン分布における温度 T は、空間 \mathbf{r} 、時間 t におけるフォノンのエネルギーに対応する。なお、緩和時間近似を用いると、ダイヤモンドやグラフェンなどの高い熱伝導率を持つ材料に関しては、フォノン散乱をより厳密に扱った場合に比べて熱伝導率は過小評価されるが、計算負荷の都合から頻繁に用いられている。

ボルツマン輸送方程式を解く際は、空間中に粒子を運動させて解くラグランジュ的なシミュレーション法である、モンテカルロ法と呼ばれる手法が主流である。これは、ナノ構造における複雑な境界条件の取り扱いが容易であるためである。なお近年では、以下の式に示すエネルギー基準・分散低減型のボルツマン輸送方程式を解くシミュレーション方法(Péraud et al., 2011, Péraud et al., 2012)が主流である。

$$\frac{\partial e_{\mathbf{k}s}^d(\mathbf{r},t)}{\partial t} + \mathbf{v}_{\mathbf{k}s} \cdot \frac{\partial e_{\mathbf{k}s}^d(\mathbf{r},t)}{\partial \mathbf{r}} = - \frac{e_{\mathbf{k}s}^d(\mathbf{r},t) - [e_{\mathbf{k}s}^0(\mathbf{r},t) - e_{\mathbf{k}s}^0(T_{\text{eq}})]}{\tau_{\mathbf{k}s}} \quad (2)$$

ここで、 $e = \hbar\omega f$ 、 $e^d = e - e^0(T_{\text{eq}})$ であり、 \hbar はプランク定数、 ω は角周波数である。すなわち、フォノン1つあたりのエネルギーをかけることによってフォノンの粒子の数ではなくフォノンのエネルギーを単位とし、さらにその平衡分布からのずれのみを扱う形に式(1)を変形すると、式(2)になる。以上の式変形により、モンテカルロ法でボルツマン輸送方程式を解く際に、大幅な簡略化と計算負荷の削減を実現できる。また、近年では物性を再現するために入力する必要があるフォノン分散関係や緩和時間を、第一原理計算と格子動力学法を用いて用意することが多い。特に、それらを計算するためのソフトウェア(Li et al., 2014, Tadano et al., 2014, Carrete et al., 2017)が公開されているため、導入は比較的容易になっている。

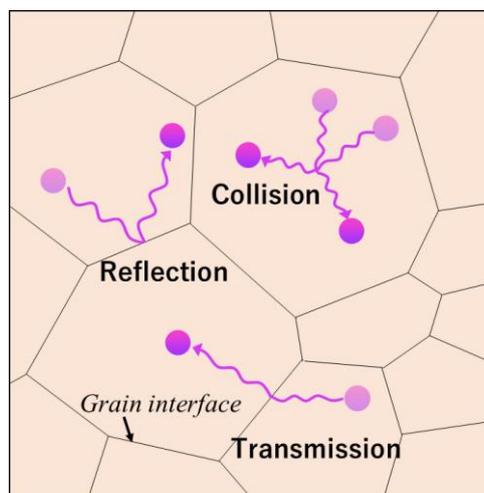


Fig. 1 Schematic diagram of phonon transport in polycrystalline nanostructure.

モンテカルロ法の概要は以下のとおりである。この手法では、式(2)の左辺第二項と右辺にそれぞれ表されるフォノンの移流と衝突の現象を繰り返す。熱伝導率を求める場合は、系に温度勾配を与え、定常状態となるまでシミュレーションを行い、フォノンのエネルギーから計算できる熱流束密度と温度分布から熱伝導率を得られる。シミュレーションの際は、系境界の熱浴からフォノンをシミュレーション領域中に射出する。この際のフォノンの状態である \mathbf{k} (または ω) および s は、熱浴の温度および材料に応じて決定する。材料の分散関係が等方的であると近似し、フォノンは球対称に移流するように扱うことが多いが、近年では波数空間上の情報をそのまま用いることで、異方性の強い材料に対応する場合もある(Yang et al., 2017, Davier et al., 2018, Yang et al., 2021)。シミュレーション中は、フォノン群速度と移流方向に応じて移動する。また、緩和時間によって決まる確率に応じて、フォノン同士の衝突現象を模擬してその状態を更新する。

ナノ構造をフォノン輸送解析の対象とした場合は、図1に示すように結晶界面での散乱も模擬する必要がある。フォノンが界面に衝突した際、事前に設定した確率に従い透過または反射をする。この確率は界面透過確率と呼ばれており、界面における結晶同士の接続性の他、周波数などのフォノンの状態にも依存する。界面透過確率を得る方法は、非平衡グリーン関数法などの数値的な方法が主流である。また実用的な方法として、周波数に依存する簡単な関数を用いることもある(Wang et al., 2011)。こうした結晶界面においてフォノンが透過または反射する場合、弾性散乱によって周波数を維持したまま新たな移流方向へ変わる。この際の移流方向は、事前に設定する鏡面度に従い、鏡面または拡散的に変更する。前者において反射角は入射角に等しく、後者は反射角が入射角によらずランベルトの余弦則に従ってランダムに変化する。先行研究では、後者の設定をする場合が多い。

2・2 モンテカルロ法から発展した高速解析手法

モンテカルロ法の計算コストは分散低減型の登場により大幅に改善したが、依然として問題が残る。例えば、まったく同一の形状のナノ構造を有する異なる材料の熱伝導率を得たい際には、それぞれの材料に特有のフォノンのパラメータを入力として、モンテカルロ法のシミュレーションを再度行い直す必要がある。これは、温度を変更した場合にも同様である。

こうしたシミュレーションをその都度やり直さなければならない問題を解決するためには、シミュレーションを材料特性と独立した形で行い、その結果を任意の材料に適応できるようにする必要がある。ここで、その問題点を克服するために筆者が開発した手法である、Transmission Probability 法(Hori et al., 2015, Hori, 2020)と、Mean Square Displacement 法(Hori, 2022, Hori et al., 2022)を紹介する。いずれの手法もモンテカルロ法を基に開発したため、技術的な部分では共通点も多い。

導入として、熱伝導率とフォノンのパラメータの関係について述べる。バルクの材料において緩和時間近似を施したボルツマン輸送方程式を解析的に解くと、以下の式(3)のように熱伝導率を得られる。

$$\kappa = \frac{1}{3} \sum_{\mathbf{k}, s} C_{\mathbf{k}s} v_{\mathbf{k}s} \Lambda_{\mathbf{k}s}. \quad (3)$$

ここで C は比熱、 v は群速度の絶対値、 $\Lambda = v\tau$ は平均自由行程である。ナノ構造中においてフォノンの界面散乱によって熱伝導率が変化したが、これは本来の緩和時間が短く、すなわち平均自由行程が短くなるためである。したがって、ナノ構造中の実効的なフォノンの平均自由行程である $\Lambda_{\mathbf{k}s, \text{eff}}$ を得ることができれば、熱伝導率が直ちに求められる。これは本来の平均自由行程がどの程度下がるかという問題であるため、材料の性質によらない。さらに、構造のみに由来する平均自由行程 Λ_{bdy} を用いることで、実効的な平均自由行程を近似的に得ることが知られている。 Λ_{bdy} は、フォノン同士の散乱を無視した場合の平均自由行程であるため、明確に材料の性質とは切り離された値である。具体的には、式(4)に示す Matthiessen 則の通りである。

$$\Lambda_{\mathbf{k}s, \text{eff}}^{-1} = \Lambda_{\mathbf{k}s}^{-1} + \Lambda_{\text{bdy}}^{-1}. \quad (4)$$

式(4)は厳密な法則ではないが、無限長薄膜のような例外(Sondheimer, 2001)を除き、概ねよく再現する。したがって、シミュレーション中に露わにフォノンの周波数や群速度などといった材料や温度に依存するフォノンの特性を入力せず、構造のみに由来する平均自由行程を求めたのち、それらと組み合わせて熱伝導率を求められる。

一つ目の **Transmission Probability** 法は、熱浴から射出したフォノンがもう一方の熱浴にたどり着く確率、すなわち透過確率 \mathcal{T} を求めることで、 Λ_{bdy} を得られる。この方法ではモンテカルロ法とは異なり、比熱や群速度といった値はシミュレーション中には不要である。一方で、フォノンの界面との衝突現象はモンテカルロ法と同様に行う。最後に、距離 L の熱浴間を透過したフォノンの数を集計することで、 Λ_{bdy} は以下の式(5)のように求められる。

$$\Lambda_{\text{bdy}} = \frac{3}{4} \mathcal{T} L. \quad (5)$$

もう一方の **Mean Square Displacement** 法は、モンテカルロ法や **Transmission Probability** 法における熱浴のような特殊な境界を設けることなく、さらに複数の方向を同時に解析するために開発した手法である。なお手法そのものは、気体分子の解析でよく用いられる(Zalc et al., 2004, Berson et al., 2011, Hori et al., 2018)が、フォノンにおいて適用した例は筆者の研究が初めてである。特徴として、系に周期境界が与えられた方向の Λ_{bdy} を計算可能である。この手法では、ランダムに初期状態を与えたフォノンをナノ構造中で運動させ、散乱を繰り返す。最終的に得られた変位 ξ と総移動距離 l_{mig} を用いて以下の式(6)のように Λ_{bdy} を得られる。

$$\Lambda_{\text{bdy}} = \lim_{l_{\text{mig}} \rightarrow \infty} \frac{\langle \xi^2 \rangle}{2l_{\text{mig}}}. \quad (6)$$

なお、式(5)および式(6)はいずれも計算対象の系の断面積が均一な場合のみ適用でき、そうでない場合は熱伝導方程式を解くことで実効的な断面積を求めて補正する必要がある。

紹介した2つの手法では、与えられたナノ構造の Λ_{bdy} を直接的に得ることで、あらゆる材料や温度の熱伝導率の評価が可能となる。両手法とも簡便な方法であり、また **Transmission Probability** 法についてはソフトウェアも公開しているため(Shao et al., 2022)、容易に利用が可能である。一方で、モンテカルロ法では可能な非定常な熱伝導現象の解析ができないなどの欠点もあり、解析する対象によって手法を使い分けることが推奨される。

3. ナノ多結晶構造における解析の具体例

開発したフォノン輸送解析手法を用いてナノ多結晶構造を対象とした研究の一例(Hori et al., 2022)を紹介する。この研究では、ナノ多結晶構造をボロノイ図を用いて数値的に構築したうえで、フォノン輸送解析を行うことで、フォノンの平均自由行程を求めた。さらに、平均二乗変位に基づく理論を用いることで、フォノン輸送のシミュレーションによって求めた値を構造の特徴量のみから再現することに成功した。

ボロノイ図によって作成した多結晶構造を図2に示す。ボロノイ図とは、領域内に分散した母点間の垂直二等分面によって分割することで生成される領域である。単純立方構造からなるナノ多結晶構造に比べて現実の形状の複雑さを再現するため、フォノン輸送の解析の際によく用いられる(Hori et al., 2015, Chakraborty et al., 2018, Hori, 2022, Hong et al., 2024)。ただし、母点の座標をランダムに決定した場合に生成される結晶粒の大きさはおおむね均一であるため、現実の粒径分布は再現しない(Suzudo et al., 2009)。図2の多結晶構造は、8000個の結晶粒からなり、また生成した際に周期境界条件を課した。

ボロノイ図によって構築したナノ多結晶構造を対象に、**Mean Square Displacement** 法を用いたフォノン輸送シミュレーションを行った。このシミュレーション中、フォノンが界面に衝突した後の進行方向は、透過の場合は直進、反射の場合は拡散と設定した。求めた Λ_{bdy} の、界面透過確率依存性を図3に示す。なお、計算によって得られた Λ_{bdy} は結晶の平均粒径によって規格化した。図の通り、 Λ_{bdy} の値が **Mean Square Displacement** 法によって定量的に求められた。さらに、気体分子の平均二乗変位に基づく理論(Henrion, 1977)を流用することで、結晶粒の形状を表す特徴量の1つである翼弦長分布から Λ_{bdy} の値を予測可能な理論を構築した。図3には、シミュレーションの値に加えて、二つの理論の結果を線によって示している。このように、それぞれの理論は、界面透過確率の大小両極限において、シミュレーションによって求めた Λ_{bdy} の値をよく再現することがわかる。この結果から、シミュレーションを用いずとも、原理的には実験によって取得可能な結晶の形状に関わる量から、フォノンの平均自由行程を定量的に求められることが明らかとなった。

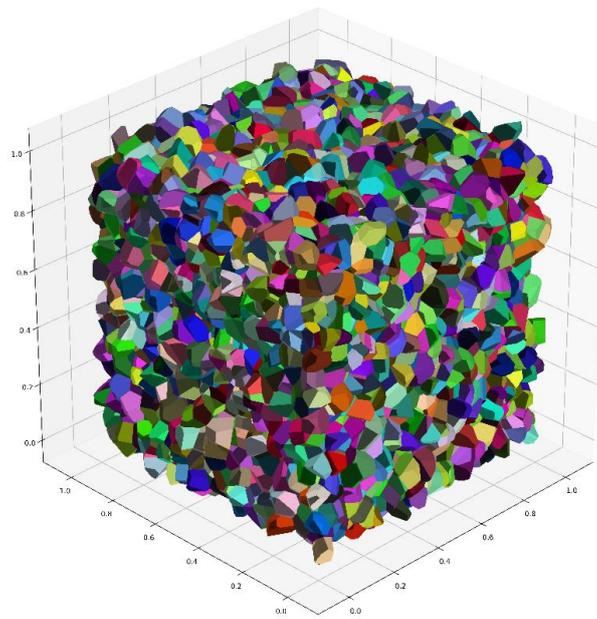


Fig. 2 Polycrystalline nanostructure generated by Voronoi diagram from randomly distributed seed points. In the cubic simulation domain, 8000 grains are packed. Periodic boundary conditions are imposed in all directions. (Hori et al., 2022)

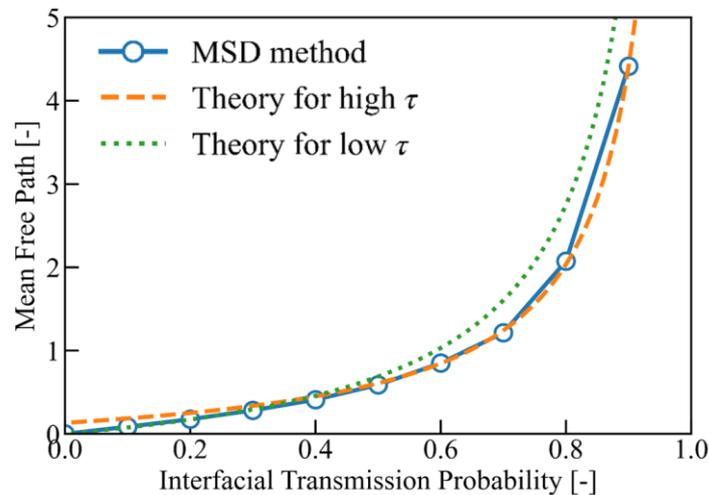


Fig. 3 Relation between interfacial transmission probability and boundary scattering mean free path in Voronoi diagram nanostructure shown in Fig. 2. Theories to predict the mean free path for high and low interfacial transmission probability (τ) limit are also shown. The mean free path is normalized by average grain size. (Hori et al., 2022)

また、上記で紹介した研究(Hori et al., 2022)の一部から発展させて行った研究(Hori, 2022)についても併せて紹介する。この研究では、ナノ構造化材料におけるフォノンと平均自由行程を、半解析的に予測する方法を開発した。すなわち、フォノンの表面及び界面との衝突ごとの挙動をデータとして保持することで、別の条件下での挙動を再現可能であること理論的に導いた。具体的には、ナノ多結晶構造において、1つの界面透過確率の条件(例えば0.5の条件)のフォノンの平均自由行程のシミュレーション結果から、別の界面透過確率の条件下での結果を再現可能であることを実証した。

4. おわりに

ナノ多結晶構造のフォノン輸送解析の手法、およびそれを用いた研究成果を紹介した。既存の手法であるモンテカルロ法と、それに対して高速な解析を実現した筆者の開発した2つの手法の概要を解説した。さらに、開発した手法を用いた研究の一例として、ボロノイ図を用いて構築したナノ多結晶構造におけるフォノンの平均自由行程の計算結果を示した。それに加え、シミュレーションに頼らずにフォノンの平均自由行程の値を予測する理論の有効性について、その一端を示した。

現在は、フォノンの輸送解析を実際の材料設計に役立たせることに主眼を置いて研究を進めている。シミュレーションを用いて構造と熱伝導特性の関係を解明することは重要であるが、それに留まらず、実験によって取得可能な構造の特徴量から熱伝導率を予測することや、熱伝導特性だけではなく他の物性を含めた構造の多目的最適化といった、高次の課題の解決が鍵となると考える。具体的にはナノ多結晶構造を対象とした研究については、フォノン輸送における最適構造探索手法(Hori, 2021, Taniguchi et al., 2024)のナノ多結晶構造への適用、ナノ多結晶中の結晶粒の形状を利用したより簡便な熱伝導特性予測方法の確立(Tomabechi et al., 2024)、異方性を有するナノ多結晶薄膜の解析手法の開発(Tomabechi et al.), フェーズフィールド法を用いたナノ多結晶構造構築との連成(Yasuda et al.)などに現在は取り組んでいる。また、開発したフォノン輸送解析手法を用いて、企業との共同研究も推進しており、それらの成果も別の機会で紹介できればと思う。

謝辞

紹介した研究の一部の推進の際に、JSPS 科研費 20K14664, 23K03689, および JST 創発的研究事業 JPMJFR2220 の助成を受けた。

文献

- Anaya, J., et al., Simultaneous determination of the lattice thermal conductivity and grain/grain thermal resistance in polycrystalline diamond, *Acta Materialia*, Vol. 139, (2017), 215-225.
- Anaya, J., et al., Thermal conductivity of ultrathin nano-crystalline diamond films determined by Raman thermography assisted by silicon nanowires, *Applied Physics Letters*, Vol. 106, (2015), 223101.
- Berson, A., et al., Determination of the effective gas diffusivity of a porous composite medium from the three-dimensional reconstruction of its microstructure, *Physical Review E*, Vol. 83, (2011), 026310.
- Biswas, K., et al., High-performance bulk thermoelectrics with all-scale hierarchical architectures, *Nature*, Vol. 489, (2012), 414-418.
- Broido, D. A., et al., Thermal conductivity of diamond under extreme pressure: A first-principles study, *Physical Review B*, Vol. 86, (2012), 115203.
- Carrete, J., et al., almaBTE : A solver of the space-time dependent Boltzmann transport equation for phonons in structured materials, *Computer Physics Communications*, Vol. 220, (2017), 351-362.
- Chakraborty, D., et al., Monte Carlo phonon transport simulations in hierarchically disordered silicon nanostructures, *Physical Review B*, Vol. 98, (2018), 115435.
- Cheng, Z., et al., Probing Growth-Induced Anisotropic Thermal Transport in High-Quality CVD Diamond Membranes by Multifrequency and Multiple-Spot-Size Time-Domain Thermoreflectance, *Acs Applied Materials & Interfaces*, Vol. 10, (2018), 4808-4815.
- Cho, J., et al., Phonon conduction in GaN-diamond composite substrates, *Journal of Applied Physics*, Vol. 121, (2017), 055105.
- Davies, B., et al., Heat transfer in rough nanofilms and nanowires using full band ab initio Monte Carlo simulation, *J Phys Condens Matter*, Vol. 30, (2018), 495902.
- Dunham, M. T., et al., Enhanced phonon scattering by nanovoids in high thermoelectric power factor polysilicon thin films, *Applied Physics Letters*, Vol. 109, (2016), 253104.
- Felbinger, J. G., et al., Comparison of GaN HEMTs on Diamond and SiC Substrates, *IEEE Electron Device Letters*, Vol. 28, (2007), 948-950.
- Graebner, J. E., et al., Large anisotropic thermal conductivity in synthetic diamond films, *Nature*, Vol. 359, (1992), 401-403.
- Henrion, P. N., Knudsen Diffusion in Powders .1. Critical-Examination of a Gas-Diffusion Relationship Used in Knudsen-Flow Permeametry, *Powder Technology*, Vol. 16, (1977), 159-166.
- Hong, H.-J. and Huang, M.-J., A model for the lattice thermal conductivity of nanocrystalline materials with arbitrary grain size distribution, *Applied Thermal Engineering*, Vol. 255, (2024), 124062.

- Hori, T., Role of geometry and surface roughness in reducing phonon mean free path and lattice thermal conductivity of modulated nanowires, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, Vol. 156, (2020), 119818.
- Hori, T., Structural optimization of silicon thin film for thermoelectric materials, *Sci Rep*, Vol. 11, (2021), 22648.
- Hori, T., Semi-analytical prediction of phonon mean free path utilizing stochastic behavior at nanostructure interfaces, *Applied Physics Express*, Vol. 15, (2022), 125002.
- Hori, T. and Dames, C., Analytical models for phonon mean free path in polycrystalline nanostructures based on mean square displacement, *Journal of Applied Physics*, Vol. 132, (2022), 135104.
- Hori, T., et al., Mutual influence of molecular diffusion in gas and surface phases, *Physical Review E*, Vol. 97, (2018), 013101.
- Hori, T., et al., Effective phonon mean free path in polycrystalline nanostructures, *Applied Physics Letters*, Vol. 106, (2015), 171901.
- Jugdersuren, B., et al., Thermoelectric properties of nanocrystalline silicon film grown by PECVD, *MRS Advances*, Vol. 7, (2022), 853-857.
- Li, W., et al., ShengBTE: A solver of the Boltzmann transport equation for phonons, *Computer Physics Communications*, Vol. 185, (2014), 1747-1758.
- Péraud, J.-P. M. and Hadjiconstantinou, N. G., Efficient simulation of multidimensional phonon transport using energy-based variance-reduced Monte Carlo formulations, *Physical Review B*, Vol. 84, (2011), 205331.
- Péraud, J. P. M. and Hadjiconstantinou, N. G., An alternative approach to efficient simulation of micro/nanoscale phonon transport, *Applied Physics Letters*, Vol. 101, (2012), 153114.
- Poudel, B., et al., High-thermoelectric performance of nanostructured bismuth antimony telluride bulk alloys, *Science*, Vol. 320, (2008), 634-638.
- Shao, C., et al., P-TRANS: A Monte Carlo ray-tracing software to simulate phonon transport in arbitrary nanostructures, *Computer Physics Communications*, Vol. 276, (2022), 108361.
- Sondheimer, E. H., The mean free path of electrons in metals, *Advances in Physics*, Vol. 50, (2001), 499-537.
- Sood, A., et al., Anisotropic and inhomogeneous thermal conduction in suspended thin-film polycrystalline diamond, *Journal of Applied Physics*, Vol. 119, (2016), 175103.
- Suzudo, T. and Kaburaki, H., An evolutionary approach to the numerical construction of polycrystalline structures using the Voronoi tessellation, *Physics Letters A*, Vol. 373, (2009), 4484-4488.
- Tadano, T., et al., Anharmonic force constants extracted from first-principles molecular dynamics: applications to heat transfer simulations, *J Phys Condens Matter*, Vol. 26, (2014), 225402.
- Tadger, M. J., et al., GaN-On-Diamond HEMT Technology With TAVG = 176°C at PDC,max = 56 W/mm Measured by Transient Thermoreflectance Imaging, *IEEE Electron Device Letters*, Vol. 40, (2019), 881-884.
- Taniguchi, R., et al., Efficient heuristic approach for minimization of phonon mean free path in large-area nanostructured thin films, *AIP Advances*, Vol. 14, (2024), 045332.
- Tomabechei, R., et al., Grain shape dependent thermal conductivity of polycrystalline nanostructure, *Nanoscale and Microscale Thermophysical Engineering*, (2024), 1-11.
- Tomabechei, R., et al., submitted.
- Wang, Z., et al., Thermal conductivity of nanocrystalline silicon: importance of grain size and frequency-dependent mean free paths, *Nano Letters*, Vol. 11, (2011), 2206-2213.
- Yanagisawa, R., et al., High-power-density hybrid planar-type silicon thermoelectric generator with phononic nanostructures, *Materials Today Physics*, Vol. 45, (2024), 101452.
- Yanagisawa, R., et al., Nanostructured planar-type uni-leg Si thermoelectric generators, *Applied Physics Express*, Vol. 13, (2020), 095001.
- Yang, L., et al., Quantitatively predicting modal thermal conductivity of nanocrystalline Si by full-band Monte Carlo simulations, *Physical Review B*, Vol. 104, (2021), 195303.
- Yang, L. and Minnich, A. J., Thermal transport in nanocrystalline Si and SiGe by ab initio based Monte Carlo simulation, *Sci Rep*, Vol. 7, (2017), 44254.
- Yasuda, N., et al., to be submitted.
- Zalc, J. M., et al., The effects of diffusion mechanism and void structure on transport rates and tortuosity factors in complex porous structures, *Chemical Engineering Science*, Vol. 59, (2004), 2947-2960.
- Zhu, G. H., et al., Increased Phonon Scattering by Nanograins and Point Defects in Nanostructured Silicon with a Low Concentration of Germanium, *Physical Review Letters*, Vol. 102, (2009), 196803.
-