

氏名(本籍地)	山本 晃平(北海道)
学位の種類	博士(工学)
学位記番号	博甲第6831号
学位授与年月日	平成26年3月25日
学位授与の要件	学位規則第4条第1項該当
審査研究科	数理物質科学研究科
学位論文題目	原子レベルからの熱伝導の理論研究

主査	筑波大学准教授 博士(理学) 小林伸彦
副査	筑波大学教授 博士(理学) 藤田淳一
副査	筑波大学准教授 博士(理学) 武内 修
副査	筑波大学准教授 博士(理学) 高野義彦

論 文 の 要 旨

近年エレクトロニクス分野において、更なる高性能化に向けた放熱性能に優れた素子の開発が望まれている。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り、その微細な形状や構成物質などに依存して変化する。そのためバルクに対するように、熱伝導率と物質のサイズから放熱性能を見積もることができない。また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容易ではなく、その実験結果の解釈も難しいという問題がある。このような状況下で、理論計算による原子レベルからの熱伝導研究が大変重要な役割を担っている。本研究では原子レベルからのフォノン熱伝導解析を行うための計算プログラムを開発し、ナノワイヤー、ナノチューブ、物質界面等に対して適用した。開発した計算プログラムは非平衡グリーン関数法に基づいており、詳細な原子の振動からフォノン伝導を計算する。それにより原子レベルから、物質の熱伝導度の温度、断面積、欠陥、構成原子依存性とそれら因子間の関係を解明した。またフォノン間散乱効果を取り入れた計算法を開発し、フォノン寿命、フォノン平均自由行程を解析した。

まず、擬一次元物質のシリコンナノワイヤー、カーボンナノチューブ、ダイヤモンドナノワイヤーに対して熱伝導特性を解析した。極低温での量子化熱伝導度の出現と温度上昇による通常のオーミックな熱伝導への遷移を明らかにした。熱伝導度に量子効果が現れる温度は、原子構造よりも原子種に強く依存する。シリコンナノワイヤーでは100[K]以下で、カーボンナノチューブ、ダイヤモンドナノワイヤーでは300[K]以下であった。さらに熱伝導度が量子化されていない室温付近では熱伝導度は物質の断面積、つまり断面に含まれる原子数に対して比例する。熱伝導度はどの直径、原子種であっても温度の上昇と共に増加し、物質固有の温度で飽和する。加えて欠陥の存在しやすいシリコンナノワイヤー中に欠陥が存在した場合には熱伝導度が低下するが、それは欠陥の数だけではなく、欠陥の位

置にも依存する。モデル計算によって、熱伝導度の温度、断面積、欠陥、構成原子依存性と、それら4因子の相互関係を包括的に解釈した。

次にシリコン／アルミニウム界面において透過係数と熱伝導度の解析を行った。界面系の安定構造を第一原理計算によって決め、その構造に対して原子間力を求め、界面における透過係数を計算することにより熱伝導度を解析した。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ニウムやシリコンよりも減少することを明らかにした。透過係数は全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。さらにフォノン間散乱の効果を取り入れた計算法を開発し、シリコンとアルミニウムに対して適用した。これによってフォノン寿命、平均自由行程を明らかにした。

最後にカーボンナノチューブのフォノンバンドに存在するバンドギャップについて、バンドギャップが現れる条件が電子バンドギャップと同一であること、バンドギャップの大きさがナノチューブの直径に依存していることを明らかにし、その起源を解明した。

審 査 の 要 旨

〔批評〕

本論文は5章からなり、第1章は序論、第2章は動力学行列、非平衡グリーン関数法を用いた熱伝導度の理論、第3章は擬一次元物質に対する熱伝導解析、第4章はバルク、界面における熱伝導特性とフォノン間散乱について、第5章は結論である。

近年の微細加工技術の進展により、ナノ構造の熱伝導、熱電特性の設計が重要となっている。本論文は熱伝導特性を原子レベルから解析する理論シミュレーションプログラムを開発し、シリコンナノワイヤー、カーボンナノチューブ、半導体金属界面、非調和効果についての研究に応用したものである。

2章での計算プログラムの理論的方法論の詳細な説明の後、3章にてその応用研究としてシリコンナノワイヤー、カーボンナノチューブにおける熱伝導度の温度、直径、欠陥、カイラリティー依存性、量子化熱伝導度とオーミックな熱伝導度の遷移について詳細な解析が成されている。また、モデル計算による統一的な解釈を行い、熱伝導特性の原子レベルからの解明を行っている。また、カーボンナノチューブのフォノンバンドについて解析し、バンドギャップ生成条件のカイラリティーを解明した。さらに、4章で、結晶および界面系の熱伝導特性を原子レベルから解析し、界面での散乱効果と結晶内での非調和効果を明らかにした。ここで開発された計算法は今後の熱伝導研究にとって非常に有用であるとともに、応用計算から得られた知見は物理の観点からも興味深いとともにナノサイエンス、ナノテクノロジー研究に大きく貢献する成果として評価される。

〔最終試験結果〕

平成26年2月14日、数理工学物質科学研究科学学位論文審査委員会において審査委員の全員出席のもと、著者に論文について説明を求め、関連事項につき質疑応答を行った。その結果、審査委員全員によつ

て、合格と判定された。

〔結論〕

上記の論文審査ならびに最終試験の結果に基づき、著者は博士(工学)の学位を受けるに十分な資格を有するものと認める。