

熱輸送のスペクトル学的理解と機能的制御  
2017年度採択研究者

2018年度 実績報告書
-----------------

志賀 拓磨

東京大学大学院工学系研究科  
講師

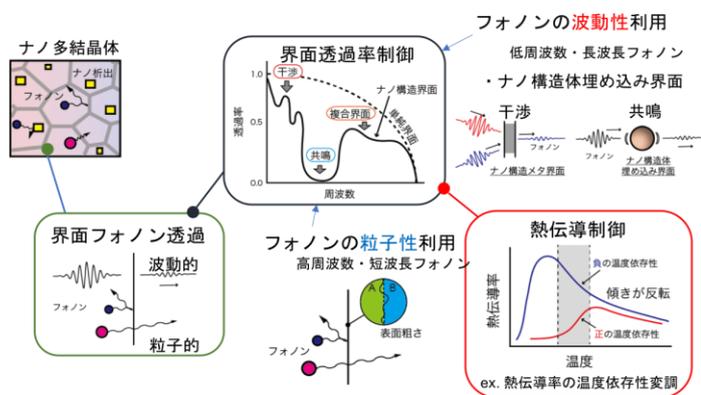
フォノンの粒子性・波動性を利用したスペクトル・エンジニアリング

## § 1. 研究成果の概要

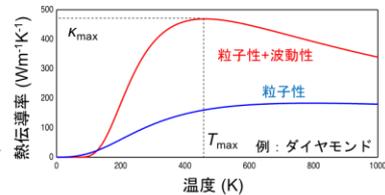
熱伝導、断熱、蓄熱、エネルギー変換などの熱マネジメントにおいて、温度上昇に伴い熱伝導率が増加する熱スイッチや、熱流を一方向にのみ流す熱整流性などの熱機能性を有する材料やデバイスの開発が望まれている。このような熱機能を原子・分子などの極限系だけでなく、バルクで実現するためには微視的な熱輸送理論に立脚した材料・デバイス設計が不可欠である。

本年度ではナノ構造化による熱伝導率の温度依存性変調、具体的には高温領域で熱伝導率が温度上昇に応じて増加する、熱伝導率の正の温度依存性の発現可能性を理論的に検証した(図(a))。シリコンやシリコンカーバイド、ダイヤモンドなど高熱伝導材料を母材としたナノ構造化バルク材料(ナノ多結晶体)に対して第一原理熱伝導解析を実施した結果、ナノ多結晶体中の界面によって、音響フォノンの熱伝導への寄与を抑え、相対的に高周波数フォノンの熱伝導への寄与を高めることができれば、熱容量の温度依存性を利用して、熱伝導率の正の温度依存性を発現することが可能であることを明らかにした。特定の温度領域で正の温度依存性を発現するためには、熱伝導に寄与する低周波数フォノンの周波数・平均自由行程領域における輸送スペクトルを制御する必要があり、そのためにはフォノンの粒子性に加え、干渉や共鳴などフォノンの波動性を積極的に利用したナノ構造制御が鍵になることを示した(図(b,c))。

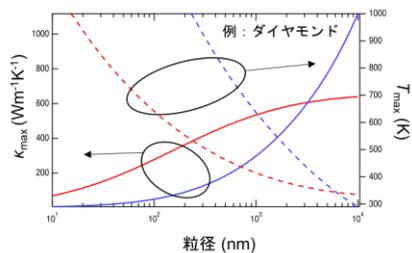
(a) 熱伝導率の正の温度依存性発現のストラテジ



(b) ナノ構造化バルク材料の熱伝導率



(c)  $K_{\text{max}}$ および $T_{\text{max}}$ の粒径依存性



## § 2. 研究実施体制

①研究者:志賀 拓磨 (東京大学大学院工学系研究科 講師)

②研究項目

- ・粒子性・波動性を考慮したフォノン輸送理論の構築
- ・熱輸送シミュレーション解析および手法開発