

情報担体とその集積のための材料・デバイス・システム  
2020 年度採択研究者

2020 年度 年次報告書
------------------

廣谷 潤

名古屋大学 大学院工学研究科  
助教

電子・正孔を情報担体とするフレキシブルサーマルデバイスの創製

## § 1. 研究成果の概要

初年度は、第一原理計算による MXene の電子・フォノン状態密度計算環境構築を実施した。表面官能基を O,F,OH で変化させて計算を行い、さらに電界による状態密度変化を検証した。電界効果による状態密度変調をシミュレーションするために、計算ソフトの変更に時間を要したが、電界無しの状態における表面官能基による状態密度の違いを検証することができた。電界効果を検証した場合、いくつか計算が収束していない条件があるため、2021 年度に引き続き検証を実施するとともに、電子とフォノンによる熱伝導への寄与を評価できる計算環境の構築を完了させる。また、本研究で主に使用する MXene の溶液分散に関しては、様々な課題が残されてはいるが、従来報告されている一般的な有機溶媒への分散を確認することができた。

実際に MXene などの熱伝導計測に必要な周波数領域サーモフレクタンス法の実験系については、2年目に実験系を構築するための光学系の設計を実施した。サーモフレクタンス法による熱計測に加えて、表面官能基の変化も捉えられるようにラマン分光法も同時に対応できるようにしつつ、クライオスタットによる温度を変化させた実験を行うための測定系の設計まで完了した。事前の予定より多くの要素を盛り込んだため、購入価格の大幅な上昇が予想されたが、サンプル表面に入射させるレーザーのパワーをシミュレーションで事前にある程度見積ることで、レーザーのパワー強度を下げる事ができた。結果的に、比較的安価なレーザー光源によりサーモフレクタンスで検知可能な十分な温度上昇が得られることがわかり、安価かつ多目的な実験系の構築に向けた事前検討を完了させることができた。

またフレキシブルな熱流センシングデバイスの創製に向けて、熱流センシングの実験系を構築した。さらに、使用するカーボンナノチューブ(CNT)の熱物性評価を実施した。