

銅ニッケル合金におけるフォノン伝導の 非平衡分子動力学シミュレーション

Non-equilibrium Molecular Dynamics Simulation of Phonon Conductivity on Cu-Ni alloy

産総研ナノシステム ○ 小西 優祐, 浅井 美博

NRI-AIST ○ Yusuke Konishi, Yoshihiro Asai

E-mail: konishi.yusuke@aist.go.jp

現在, 排熱利用の観点から熱電材料へ注目が集まっている. 例えば, 高効率の熱電材料として知られる BiTe を用いた半導体材料はすでに実用化されている [1]. 合金系においても熱電効果の研究がされており, 銅ニッケル合金において, 1 次元のナノ構造を持つ条件下において, 高いペルチェ係数を示す事が実験的に示されている [2]. 本研究はこのような 1 次元構造を持つ銅ニッケル合金を効率のよい熱電材料として利用するためにどのような構造を取ればよいのかを, シミュレーションによって示す事を目的としている.

ここで良い熱電材料, というのは高い ZT を示す物質を意味する. この ZT は熱電変換の効率を表す無次元量で,

$$ZT = \frac{\sigma S^2 T}{\kappa_{el} + \kappa_{ph}} \quad (1)$$

により表される. ここで, σ は電気伝導度, S はゼーベック係数, T は温度, κ_{el} は電子による熱伝導度, κ_{ph} はフォノンによる熱伝導度である. κ_{el} は σ にほぼ比例するため, ZT を大きくするのに必要なのは高い S と低い κ_{ph} となる. 本研究においては, AEM ポテンシャル [3] に基いて, RNEMD(Reverse Non-Equilibrium Molecular Dynamics) 法 [4] により κ_{ph} を計算する事でフォノン伝導度が構造によってどう変化するかを調べた.

銅ニッケル合金が柱状の 1 次元構造を持つ時のその柱方向への熱伝導度と, ランダムな構造を持っている時のフォノン伝導度を比較し, 構造のサイズがある程度小さい時は $\kappa_{ph} = 7 \text{ W/(m}\cdot\text{K)}$ 程度の値をとり, 大きな構造を持つ時 (10 W/(m·K) 程度) と比較して低いフォノン伝導度を持つ事が分かった. 単体の銅やニッケルにおいては, 熱伝導度 ($= \kappa_{el} + \kappa_{ph}$) は非常に大きな値 (実験値は銅で 428 W/(m·K), ニッケルで 94 W/(m·K)) を取り, κ_{ph} の占める割合は少ないものの, 合金系においては熱伝導度もそれほど大きな値を取らず (例えばコンスタンタン (Cu:Ni = 55:45) の実験値は 19.5 W/(m·K)), κ_{ph} が熱伝導度の中の大きな割合を占める事となる. よって, ここで見ている系においてはこのような構造変化によるフォノン伝導度の変化が ZT に対して影響がある事が示唆される.

[1] <http://www.kelk.co.jp/english/news/090128.html>

[2] A. Sugihara et al., Appl. Phys. Exp. **3**, 065204 (2010).

[3] J. Cai and Y. Y. Ye, Phys. Rev. B **54**, 8398 (1996).

[4] F. Muller-Plathe, J. Phys. Chem. **106**, 6082 (1997).