

摂動分子動力学法による複雑結晶構造酸化物の格子熱伝導の数値解析

Numerical Analyses of Lattice Thermal Conduction in Oxides with Complicated Crystal Structure by Perturbed Molecular Dynamics

○吉矢 真人^{1,2}、藤井 進¹、宮内 洋平¹、多田 昌浩¹、柳楽 知也¹、安田秀幸^{1,3} (1. 大阪大工、2. ファインセラミックスセンター ナノ構造研究所、3. 京都大工)

○Masaato YOSHIYA^{1,2}, Susumu FUJII, Yohei MIYAUCHI¹, Masahiro TADA¹, Tomoya NAGIRA¹, Hideyuki YASUDA^{1,2} (1. Osaka Univ., 2. Japan Fine Ceramics Center, 3. Kyoto Univ.)

E-mail: yoshiya@ams.eng.osaka-u.ac.jp

従来は断熱材と伝熱材の組み合わせを中心に工学的課題に取り組まれてきた熱伝導の諸問題が、ナノ構造に関する熱伝導機構解明の必要性や計算材料科学手法の発達により、昨今大きな進展を見せている。格子伝導を取り扱う計算手法は大別して、静的な原子配列における原子間相互作用から有限温度での原子の集団振動を予測する格子動力学法や高温での原子の集団振動自体を計算する分子動力学法があり、またそれぞれ目的特性や必要な理解の側面に合わせて手法選択がなされており、それぞれに長所・短所がある。また、従来は原子間相互作用力場を用いた古典的計算が主であったが、計算機の発達や手法の洗練により第一原理計算により熱膨張や熱伝導を直接計算することが可能になってきており、これまでは一般論での議論に留まっていたフォノン由来の諸物性の理解が飛躍的に高まることが大いに期待される。

我々は層状結晶構造を有する熱電変換材料を中心に研究を進めている。熱電変換特性はゼーベック係数や電子伝導度などの電子特性とフォノン由来の熱伝導により決定される。一般に、電子特性に比べてフォノン特性の理解は、初期は同等であったものの、エレクトロニクスの進展に対して後塵を拝しており、熱電変換の機構解明においても熱伝導支配因子の理解は、高ゼーベック係数・高電子伝導度の機構に比べて理解が限られているのが現状と言える。上述の計算的手法により理解の大幅な進展がなされつつあるが、更なる飛躍の為にはその手法選択の原点に戻り考え直すことが肝要である。

フォノンは通常は逆格子空間にて波数－振動数の分散曲線を基に理解され、また原子の変位に対する展開により定式化されるが、層状結晶構造や他の複雑な結晶構造を取り扱う際には大いに注意が必要である。その理由の1つは、実格子が大きいため逆格子が非常に小さくなり、分散曲線の理解が極めて困難になることである。また、結晶構造が複雑化することにより原子の振動も複雑化し、単純な原子の平衡位置・平均位置からの変位の関数として展開することが難しくなることも留意すべき重要な点である。

本講演では、これらの問題点を整理したうえで分子動力学法による層状熱電変換材料の研究例について紹介し、どのような理解が得られるのか、さらに理解を深めるためにはどうすればよいのかを議論する。