

Ioffe-Regel 境界定義がアモルファス Al_2O_3 熱伝導率の計算値に及ぼす影響Effect of Ioffe-Regel criterion on thermal conductivity of $a\text{-Al}_2\text{O}_3$ 東大院工¹, 分子研², 青学大³, 産総研⁴, JST さきがけ⁵○志賀 拓磨^{1,5}, 南谷 英美^{2,5}, 安倍 知奈実³, 山下 雄一郎^{4,3},八木 貴志^{4,3}, 竹歳 尚之⁴, 重里 有三³, 柏木 誠^{3,5}Univ. of Tokyo¹, Institute for Molecular Science², Aoyama Gakuin Univ.³, National MetrologyInstitute of Japan⁴, JST PRESTO⁵, ○Takuma Shiga¹, Emi Minamitani², Chinami Abe³, YuichiroYamashita^{4,3}, Takashi Yagi^{4,3}, Naoyuki Taketoshi^{4,3}, Yuzo Shigesato³, Makoto Kashiwagi^{3,5}

*E-mail: shiga@photon.t.u-tokyo.ac.jp, eminamitani@ims.ac.jp,

yuzo@chem.aoyama.ac.jp, kashiwagi@chem.aoyama.ac.jp

格子構造がトポロジカルに乱れているアモルファスにおいても、非局在振動モードが存在し、それらがアモルファスの熱伝導に寄与していることが知られている(1)。非局在モードはさらにフォノンのモードである伝搬子と拡散子に分けられ、それぞれのモードの熱伝導率への寄与が Allen-Feldman(AF)理論(2)に基づいて評価されてきたが、伝搬子と拡散子を切り分ける Ioffe-Regel(IR)境界は材料や評価方法に強く依存するため、アモルファス材料の熱伝導評価には曖昧さが残る。本研究では AF 理論に基づいて、アモルファス $\text{Al}_2\text{O}_3(a\text{-Al}_2\text{O}_3)$ 熱伝導率を計算し、IR 境界に対する熱伝導率の依存性を評価した。

分子動力学法を用いて 2592 原子を含むコランダム構造を融解・急冷することで $a\text{-Al}_2\text{O}_3$ 構造を作製した(3)。 $a\text{-Al}_2\text{O}_3$ のフォノン状態密度と計算した熱拡散率の周波数依存性 $D(\omega)$ を Fig. 1(a) に、また室温における熱伝導率の周波数依存性 $\kappa_{\text{AF}}(\omega)$ を Fig. 1(b) にそれぞれ示す。 $D(\omega)$ は急減に減少する 30 THz が移動度端(局在・非局在境界)である一方、 $D(\omega)$ や $\kappa_{\text{AF}}(\omega)$ からは IR 境界は明確でない。そこで動的構造因子(4)を用いて $a\text{-Al}_2\text{O}_3$ に内在する振動スペクトルを計算したところ、 7 nm^{-1} 程度の波数領域まで比較的明瞭な縦波・横波モードの線形分散が見られ、縦波の音速が 1430 m/s 程度であることが明らかになった。動的構造因子から見積もられる IR 境界に対する熱伝導率評価に及ぼす影響や、 $\kappa_{\text{AF}}(\omega)$ の原子密度依存性など、 $a\text{-Al}_2\text{O}_3$ における熱伝導メカニズムを報告する予定である。

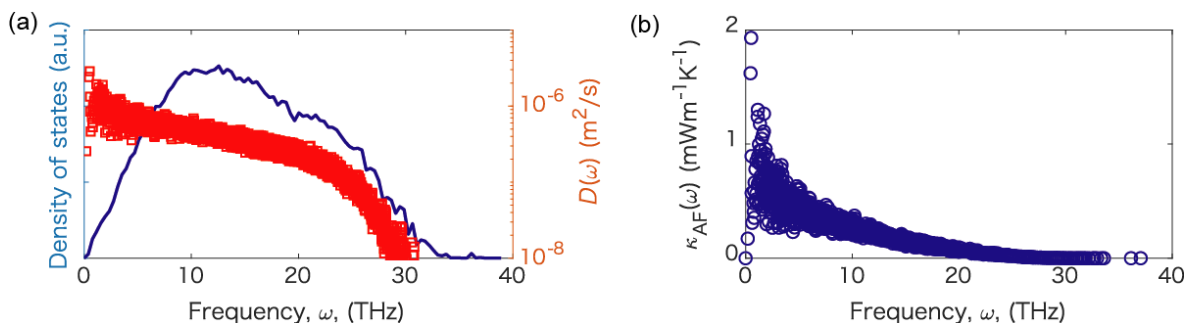


Fig. 1 (a) Phonon density of states (left axis) and frequency-dependent thermal diffusivity of $a\text{-Al}_2\text{O}_3$ (right axis). (b) Frequency-dependent thermal conductivity of diffusions of $a\text{-Al}_2\text{O}_3$ at room temperature.

参考文献 : (1) P. B. Allen, *et al.*, *Philos. Mag. B* **79**, 1715 (1999). (2) P. B. Allen and J. L. Feldman, *Phys. Rev. B* **48**, 12581 (1993). (3) P. Vashishta, *et al.*, *J. Appl. Phys.* **103**, 083504 (2008). (4) J. L. Feldman, *J. Non-Cryst. Solid* **307**, 128 (2002).