

低い熱伝導率の仕組み：ガラスとナノ構造化物質

水野 英如 (東京大学大学院総合文化研究科 hideyuki.mizuno@phys.c.u-tokyo.ac.jp)

電子デバイスにおける熱のマネジメント、熱を電気に変換する熱電変換など、熱制御に関わる近代技術では、低い熱伝導率をもった物質が広く用いられる。一般に、ガラスは低い熱伝導率をもった物質として知られている。ガラスとは、結晶のように規則的な周期構造をとることなく、分子が乱れた状態で固まった固体を指す。ガラスはその乱れた構造ゆえに、結晶とは異なる熱伝導特性を示す。結晶では「フォノン」と呼ばれる分子振動が熱伝導を担うことはよく知られているが、ガラスにおいてもフォノンがエネルギーを伝達する役割を果たす。しかしながら結晶とは異なり、ガラスのフォノンは乱れによって散乱される。

結晶とガラスを比べたとき、フォノンが乱れによって散乱されるガラスの方が、熱伝導率が低くなることは納得できるだろう。しかしながら注目すべきは、結晶とガラスの熱伝導率の差である。ガラスは結晶に比べて2、3桁も小さい、極めて低い熱伝導率をもつ。同じ分子から成る物質の中で、ガラスの熱伝導率は最も低いとさえ言及されてきた。我々は、ガラスの乱れはフォノンの寿命を熱振動の時間スケール、すなわち最小の時間スケールにまで減少させるものであることを示した。この状況では、フォノンは波として伝搬するというより、拡散的に振る舞うと考えるのが適切である。したがって、ガラスは乱れによってその熱伝導率が最小化されていると言える。

では、ガラスの熱伝導率を基準に考えたとき、ガラスと同等あるいはそれよりも低い熱伝導率をもった物質は存在するだろうか。ガラスのフォノンの寿命が最小の時間スケールであることから、その熱伝導率を

下回るにはフォノンの伝搬を完全に遮断する必要があるであろう。現代では、分子スケールで物質を設計するナノテクノロジーが急速に発展している。これによって、目的に適った物性をもつ物質を開発することができる。ナノ構造化の例として、異なる物質を層状に並べた層状構造化が挙げられる。Si (シリコン) 層とGe (ゲルマニウム) 層を交互に並べた構造は、層状構造化物質の代表例である。ナノスケールで構造を調節することによってフォノンの伝搬を操作し、熱伝導率の最適化を図る。

先駆的な実験研究は、層状構造化によってガラスよりもさらに低い熱伝導率を実現できることを示した。我々はシミュレーションを用いて、層状構造化によってフォノンを層境界面において反射させることができ、これによって全く同じ分子から構成されるガラスの熱伝導率と同等、あるいはそれよりも低い熱伝導率が実現可能であることを示した。したがって、全く乱れた状態に分子を配置する以外に、より洗練された構造上に分子を配置することによって、極めて低い熱伝導率を実現することができる。

このように、ガラスと層状構造化物質(ナノ構造化物質)はともに低い熱伝導を有する。しかしながら、両者における熱伝導の機構は全く異なる。ガラスでは乱れがフォノンを散乱させることによって、低熱伝導率が実現される。一方で、層状構造化物質では層間の境界面がフォノンを反射させることによって、低熱伝導率が実現される。したがって、ガラスと層状構造化物質ではフォノンの挙動が異なり、全く違う仕組みで低熱伝導率が実現されている。

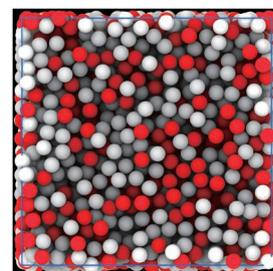
—Keywords—

熱伝導率：

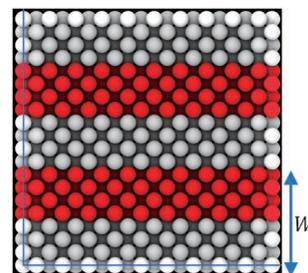
物質に温度差をつけると、温度が高いところから低いところへと熱が伝わる。発生する熱流の大きさは、温度差に比例して大きくなる(フーリエの法則)。このときの比例係数を熱伝導率と定義する。熱伝導率が大きいほど、その物質に熱が伝わり易く、逆に熱伝導率が低いほど、熱が伝わり難い。

フォノン：

周期的な格子構造をもった結晶における分子の振動モード、音響フォノンと光学フォノンの2つに大別できるが、熱伝導を担うのは主に音響フォノン、すなわち音波である。また、分子の振動方向に応じて、縦・横の極性がある。フォノンは格子構造に由来する分子振動であるが、ガラスのように乱れた物質においてもフォノンは励起する。この場合、フォノンは振動モードではないため、いくつかの振動モードの重ね合わせとして励起する。



ガラス



層状構造化物質

ガラス(上図)および層状構造化物質(下図)のモデル図。図の例では、両者は白と赤の2種類の分子から構成される。ガラスでは、分子は乱れた状態で配置する。一方で層状構造化物質では、白い分子の層、赤い分子の層の2つの層が交互に並び、各層の厚さを $W/2$ としたとき、2つの層が周期 W で並びことになる。