

ヴィーデマン・フランツ則に基づいた電子伝導の効果および 格子振動の効果を検討した複雑系熱伝導シミュレータの開発

○坪井秀行¹、山本真琴¹、瀬戸川浩¹、古山通久¹、遠藤 明¹、久保百司^{1,2}、

Carlos A. Del Carpio¹、宮本 明^{1,3}

¹ 東北大学大学院工学研究科応用化学専攻(〒980-8579 仙台市青葉区荒巻字青葉 6-6-11-1302)

² 科学技術振興機構さきがけ(〒332-0012 埼玉県川口市本町 4-1-8)

³ 東北大学未来科学技術共同研究センター(〒980-8579 仙台市青葉区荒巻字青葉 6-6-10)

【緒言】ミクロな原子配置・電子構造からのマクロな熱伝導特性の予測は、不純物や欠陥、界面、表面を含んだ複雑な系の材料設計において重要な設計指針となる。しかし、多成分を含む複雑な系の熱伝導特性の推算は、従来の久保の公式に基づいた手法では全く対応できない。そこで本研究では、伝導電子による金属の熱伝導を Tight-Binding 量子分子動力学法により推算する手法および格子振動による絶縁体などの熱伝導を古典分子動力学法により推算する手法を開発した。

【方法】伝導電子による熱伝導度は、当研究室で開発した高速化量子分子動力学プログラム”Colors”に基づく電気伝導シミュレータ[1]を用い、ヴィーデマン・フランツ則 ($\lambda = LT\sigma$; λ 熱伝導度、 L ローレンツ数、 T 絶対温度、 σ 電気伝導度) により求めた。格子振動による熱伝導は、同じく当研究室で開発した古典分子動力学法プログラム”THERMOSIM” [2]を用い、計算モデルの高温側の上部および低温側の下部を固定層とするように改良して求めた。

【結果】金属などの熱伝導特性を推算する目的で、チタンおよびスズを例にまず電気伝導度を求め、次にヴィーデマン・フランツ則に従ってその熱伝導度を求めた。計算結果を実験値とともに表 1 に示す。表 1 から伝導電子の効果が支配的となる金属の熱伝導度を精度良く再現できているこ

とがわかる。次に格子振動の効果が支配的となる絶縁体の熱伝導特性を推算する目的でアモルファスシリカを例に計算を行った。計算モデルを図 1 に示す。シミュレーションでは計算モデルの高温層、低温層を一定の温度に保ち、高温層-伝熱層-低温層間を移動した平均運動エネルギーを移動熱量として、下記の計算式を用いて熱伝導率 λ を求めた。

$$\lambda = (Q \times L) / (\Delta T \times S \times \Delta t) \quad (1)$$

ここで Q は 1 step あたりに移動した熱量、 L は伝熱層の厚さ、 S は断面積、 ΔT は高温部と低温部の温度差、 Δt は 1 step あたりの時間である。計算結果を表 2 に示す。表 2 から本手法により格子振動による熱伝導度も精度よく推算できていることがわかる。

以上により伝導電子と格子振動の二つの効果による熱伝導度の定量的な推算を実現できた。

[1] H. Tsuboi et al., Jpn. J. Appl. Phys., to be published.

[2] 久保百司他、日本コンピュータ化学会 2005 春季年会 1P18.

表 1 金属系の熱伝導度計算結果

	熱伝導度 (W/mK)	
	計算値	実験値
Ti	2.12×10	2.19×10
Sn	1.18×10^2	0.67×10^2

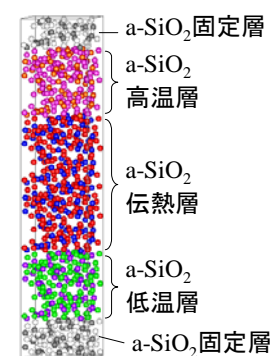


図 1 アモルファスシリカの計算モデル

表 2 絶縁体の熱伝導度計算結果

	熱伝導度 (W/mK)	
	計算値	実験値
アモルファスシリカ	1.95	1.38