

審査の結果の要旨

氏 名 崔 淳 豪

本論文は「分子動力学法による薄膜の熱伝導に関する研究」と題し、ナノ・マイクロスケール固体薄膜の膜圧方向の熱伝導特性を分子動力学法シミュレーションを用いて検討し、薄膜厚さ減少に伴う熱伝導率低下の現象と異種物質間の境界での界面熱抵抗現象のメカニズムについて議論し、界面熱抵抗に関する定量的予測の可能な現象論的モデルを提案したものであり、論文は全4章よりなっている。

第1章は、「序論」であり、本研究と関連して、新素材として期待されているスーパーラティス(super-lattice)と呼ばれる多層構造薄膜の生成と応用などについて述べるとともに、薄膜の熱伝導率および固体接合面の界面熱抵抗の予測の必要性とこれらに関する巨視系と微視系に関する既存の研究、従来の界面熱抵抗のモデルなどの研究をレビューし、本論文の研究目的について述べている。

第2章は、「計算方法」であり、本研究で用いた分子動力学法シミュレーションの概要と実際に計算で用いた計算系の構成、系内部に温度勾配を生成させる方法や熱伝導率や界面熱抵抗を評価するための手法について述べている。なお、計算システムの簡単化と一般化のために、原子間ポテンシャルとしては Lennard-Jones (12,6)を採用している。

第3章は、「計算結果」であり、本手法を用いることによって、計算系の境界条件や温度制御間隔、温度勾配などの計算条件によらずに一定の熱伝導率の評価が可能であることを示して、分子動力学法シミュレーションの妥当性を示した後に、下記の2つの計算結果に基づく考察を行っている。

(1) 系の内部応力が熱伝導率に及ぼす影響について検討し、系の内部圧力によって、平均分子間間隔が変化し、ポテンシャルの非調和効果によって有効なバネ定数が変化することで熱伝導率が変化すると解釈している。また、系の温度による薄膜の熱伝導率の変化を分子動力学法シミュレーションによって求めた。高温部では熱伝導率が絶対温度に反比例する

結果が得られ、フォノンのウムクラップ散乱モデルで説明がつくことがわかった。一方で、低温部分では古典分子動力学法での計算では量子力学的な比熱の減少は計算されないために温度の低下とともに一定の熱伝導率に収束する様相が計算された。また、高温部では、アルゴンの熱伝導率の実験結果ともおおよそその一致を示しており、分子動力学法が熱伝導の計算に有用であることを確認している。さらに、薄膜の厚さを変えた場合の熱伝導率のシミュレーション結果から厚さ方向のサイズ効果による熱伝導率の変化を確認し、逆に、熱伝導率の計算結果からフォノンの平均自由行程を求めて整理している。また、薄膜の厚さによる熱伝導率の変化を定量的に予測できるモデルを提案している。

(2) 異種固体物質の界面における界面熱抵抗について、仮想的に質量のみが異なる物質間の界面および Lennard-Jones ポテンシャルのエネルギーのみが異なる物質間の界面について分子動力学法シミュレーションを行い、一定の熱流束がある場合にこれらの界面で温度のジャンプが現れることから界面熱抵抗を計算している。さらに、マクロな波動伝搬モデル(音響伝搬モデル)の界面での境界条件を分子スケールでの挙動に対応させて変化させることで、界面熱抵抗を定量的に求めることのできる現象論モデルを提案している。このモデルによって、任意の質量比およびポテンシャルエネルギーの比の物質間の界面熱抵抗を計算できる。また、質量比とエネルギー比が一定の条件を満たした場合には全く界面熱抵抗がなくなる場合もあることを示した。

第4章は「結論」であり、上記の研究結果をまとめたものである。

以上を要するに、本論文は分子動力学法を用いて薄膜の熱伝導率および異種固体物質接合界面における界面熱抵抗についてシミュレーションを行い、その結果に基づき、明瞭な現象論モデルを提案したものであり、マイクロ・ナノスケールの熱伝導機構に関する重要な知見を与えており、分子熱工学の発展に寄与するものと考えられる。

よって本論文は博士(工学)の学位請求論文として合格と認められる。