

セミナーのお知らせ

『積層カーボンナノチューブの熱伝導計算』

畑 智行 (東京大学大学院 工学系研究科)

2014年6月20日(金) 16:30-18:00

東京理科大学 葛飾キャンパス 講義棟7階 教養ゼミ室

カーボンナノチューブ (Carbon Nanotubes, CNTs) は、その炭素原子が円筒型に整列した擬一次元構造のため、特徴的な電気伝導特性、及び熱伝導特性を持つことが知られている。特にその熱伝導特性については、ダイヤモンドと同等の高い熱伝導率を持つことが予測されており、またカイラリティや半径、積層構造といった多くの構造自由度を利用した制御が期待されている。熱伝導特性の測定手法や CNT の合成法等、近年の実験技術の発展に伴い、CNT の熱伝導特性に関する理論的研究は、その重要性を増してきていると考えられる。

物質中の熱輸送は、伝導電子と格子振動(フォノン)の二つの寄与に由来するが、CNT においてはフォノンの寄与が主要であることが実験、及び理論計算の両方面から示唆されている[1,2].フォノンによる熱輸送現象に理論的にアプローチする手法はいくつか提案されているが、なかでも非平衡 Green 関数(Non-Equilibrium Green's Function, NEGF)法は、格子動力的なアプローチのひとつとして有望視されている。NEGF 法は、分子動力的な手法と比較してフォノンの非調和性を取り入れることが困難であるが、低温条件下での熱伝導特性を議論する上では強力な手法である。

本セミナーでは NEGF 法について概観した上で、我々の研究成果のなかから[3,4], CNT の積層による熱伝導特性への影響について取り上げる。NEGF 法を用いて二層カーボンナノチューブ(Double Carbon Nanotubes, DWCNTs)の熱伝導度を計算し、その DWCNT を構成する二本の CNT から作られる並列回路の熱伝導度と比較を行った。その結果、DWCNT の熱伝導度は並列回路のものを常に下回ることが確認された。これは、積層構造に伴う層間での Van der Waals 力の影響であると考えられる。また、低温領域に注目すると、二層の CNT の振動モードがカップリングした結果、DWCNT の熱伝導度は外側の CNT 単体のものと一致する結果となった。この特徴について、内外の振動モードのカップリングを考慮した連成振動モデルを作成し、議論を行う。

- 1) J. Hone, M. Whitney, C. Piskoti and A. Zettl 1999 *Phys. Rev. B* **59** R2514(R)
- 2) T. Yamamoto, S. Watanabe and K. Watanabe 2004 *Phys. Rev. Lett.* **92** 075502
- 3) T. Hata, H. Kawai, R. Jono and K. Yamashita 2014 *Nanotechnology* **25** 245703
- 4) T. Hata, H. Kawai, T. Ohto and K. Yamashita 2013 *J. Chem. Phys.* **139** 044711

問い合わせ：山本貴博 (工学部第一部・教養教室)