

2023 年度  
創発的研究支援事業 年次報告書

研究担当者	堀琢磨
研究機関名	東京農工大学
所属部署名	大学院工学研究院
役職名	准教授
研究課題名	超高熱伝導率を有する放熱材の創成
研究実施期間	2023 年 4 月 1 日～2024 年 3 月 31 日

#### 研究成果の概要

高い放熱性能を有する材料の構造設計のためには、その熱伝導率の理論的な裏付けが欠かせない。この際に、例えば熱伝導率を予測するための理論や数値解析の負荷が少なくすることや、用いる構造のモデリングが現実のものに対応していることが重要である。そこで当年度は、効率的な熱伝導解析手法の開発、予測理論の導出、結晶成長シミュレーションと熱伝導解析の連成に関する研究を主に行った。

まず、薄膜多結晶体からなる半導体材料の熱伝導率を効率的に解析可能にする新手法を開発した。薄膜多結晶体に特徴的な、面内方向に無限で厚み方向に有限のサイズの系において、各方向の熱輸送特性を一挙に解析する方法を、それぞれの方向に有利な 2 つのシミュレーション法を組み合わせることによって新たに開発した。開発したシミュレーション法を用いることによって、幾何学的に生成した薄膜多結晶体の伝熱特性と構造の関係を定量的に明らかにした。

同時に、熱伝導率の決定因子の同定を、薄膜多結晶体を対象に行った。等方的な多結晶体において、結晶の平均粒径を用いることで、熱伝導率計算の際に必要なフォノン平均自由行程を予測可能であることが明らかとなったため、薄膜多結晶体においても同様のアプローチによる解析を行った。その結果、シミュレーションにより得られた限られた条件下でのフォノン平均自由行程は結晶粒径によって概ね整理可能であることが分かった。

また、結晶成長を模擬したシミュレーションと、熱伝導率を求めるために用いるフォノン輸送シミュレーションの連成を行った。具体的には、結晶成長シミュレーションによって生成した多結晶体構造から、フォノン輸送シミュレーションにおいて必要となる、フォノンと結晶界面の衝突の判定に用いる界面座標情報の抽出を行った。これによって、結晶成長シミュレーションによって得られた物理的な裏付けのある多結晶体構造の熱伝導率の取得が可能となった。