

日本伝熱学会学術賞を受賞して

*On Receiving Heat Transfer Society Award
for Scientific Contribution*



丸山 茂夫, 崔 淳豪 (東京大学)
Shigeo MARUYAMA and Soon-Ho CHOI
(The University of Tokyo)

日本伝熱学会第 40 期総会において、日本伝熱学会学術賞をいただきました。受賞対象となった論文は、*Thermal Science & Engineering*, Vol. 9, No. 3 (2001) に発表した「カーボンナノチューブによる熱伝導の分子動力学」です。我々が以前から進めてきたフラーレン・ナノチューブの生成や応用に関する研究と分子動力学法による伝熱の研究とがまさに融合した内容であり、研究の価値を認めて頂いた推薦者ならびに選考委員の方々に厚く御礼申し上げます。研究内容については、受賞対象論文やその後の研究論文を参考にして頂くとして、ここでは、本研究の背景について記述してご挨拶に代えたく思います。

分子伝熱に関する日米セミナーなどを通じて交流のある米国の研究者が薄膜材料における熱伝導の問題について実験とフォノンを用いた解析を行い、フォノンの界面散乱やフォノン同士の散乱の物理的な解釈と予測を渴望していることから、原理的にこれらの解析が可能な分子動力学法の活用を考えていたところ、京大の松本先生が分子動力学法によるフォノン分散関係の直接計算の可能性を示した。一方、研究室で実験的に生成している単層カーボンナノチューブは、直径が 1 nm 程度で炭素原子の結合が完全に閉じており、化学的に安定な表面を持った 1 次元材料である。この系であれば、煩わしい横方向の境界条件についての問題なしに、現実サイズのナノチューブ長に相当する炭素原子を直接配置することによって熱伝導の分子動力学法シミュレーションが可能であると考えた。結果的には、1 次元的な材料であるが故に独特な性質を示し、フォノン分散な

ども単純な 3 次元結晶とは比べものにならない複雑さを示すことに後で気づくことになった。

熱伝導率やフォノンの分散関係を求めた上で、もしやと思って他の研究者の論文を検索してみると数件の分子動力学法計算が見つかり、これらの熱伝導率が我々の計算結果より 1 桁程度も大きいことがわかった。カーボンナノチューブはダイヤモンドを超えて、最も熱伝導率の高い材料として期待されていたのである。一方、我々の現実的な計算では薄膜同様に熱伝導率がナノチューブ長さの影響によって大幅に減少していた。直径 1 nm の単層カーボンナノチューブの熱伝導率に関する信頼できる実験結果は存在しないが、多層のナノチューブに関する実験の結果からも熱伝導率が高くなるであろうことは推測でき、その値の予測がもう一つの重要なテーマとなる。実験で困難な熱伝導率の予測を分子動力学法で行うなど分不相応なことと思われるかもしれないが、この系に関しては、分子動力学法の手法とポテンシャルをチューンしていく方が実験手法を開発していくよりも近道であるかもしれない。

最後に、この記事を書いているのはボストンで開かれた Nanotube 2002 という国際会議からの帰りの飛行機であるが、カーボンナノチューブに関する研究は主に物理や化学の分野で進められてきたこともあって、輸送物性といったら電気伝導であり、熱伝導に関する発表は皆無であった。ところが、会議の Closing Remarks をつとめた、MIT の Prof. M. S. Dresselhaus が次回の会議までの最大の課題としてカーボンナノチューブの熱伝導問題をあげていたことは心強い。