

カーボンナノチューブ熱伝導のバリステック-拡散クロスオーバー  
Crossover from ballistic to diffusive thermal transport in carbon nanotubes

山本貴博<sup>1)</sup>, 小鍋哲<sup>2)</sup>, 塩見淳一郎<sup>3)</sup>, 丸山茂夫<sup>3)</sup>  
(東大工・マテリアル工学専攻<sup>1)</sup>, 東理大理・物理学科<sup>2)</sup>, 東大工・機械工学専攻<sup>3)</sup>)

Abstract : We present a theoretical scheme that seamlessly handles the crossover from fully ballistic to diffusive thermal transport regimes and apply it to carbon nanotubes. At room temperature, the micrometer-length nanotubes belong to the intermediate regime in which ballistic and diffusive phonons coexist, and the thermal conductivity exhibits anomalous nonlinear tube-length dependence due to this coexistence. This result is in excellent agreement with molecular-dynamics simulation results showing the nonlinear thermal conductivity. Additionally, we clarify the mechanism of crossover in terms of characteristic frequency, which is a new concept derived from the scheme.

ナノ材料の熱制御は次世代デバイス開発における最重要課題の1つである。カーボンナノチューブ (CNT) は、その熱伝導率の理想値が 3000W/m-K と極めて高いことから、電子デバイスの放熱材料としての応用が期待されている。しかしながら、これまでに報告されている CNT の熱伝導率測定値はバラつきが大きく、そのままでは放熱材料としての実用化は難しい。CNT を放熱材料として実用化するためには、CNT 熱伝導率の値を決定する因子が何であるかなどの基礎物理の解明が必要である。内的因子としては、チューブ長さや直径などの結晶構造やフォノン-フォノン散乱などの散乱効果が挙げられる。外的因子としては、不純物や欠陥、熱源との接触熱抵抗、周辺環境への熱散逸などが挙げられる。本研究では、前者の先天的な要因について議論する。

丸山・塩見らによる分子動力学シミュレーションによると[1]、サブミクロン長の CNT はチューブ長の増加に対して熱伝導率 (室温) が非線形に増加する。本研究においては[2]、バリステック熱伝導から拡散熱伝導までの全領域を統括的に取り扱うことのできる理論を開発し、これを CNT に適用することによって分子動力学シミュレーション結果の解析を行った。その結果、チューブ長を数ナノから数ミリメートルへと変化させたとき“バリステック熱伝導”から“拡散熱伝導”へとクロスオーバーすること、また、デバイスなどに応用される典型的な長さ (数  $\mu\text{m}$ ) の CNT においては、バリステック・フォノンと拡散的フォノンが共存する“準バリステック熱伝導”を示すことが明らかとなった。

また直径依存性については、直径の細い (3, 3) CNT の方が太い (5, 5) CNT よりも熱伝導率が高い。これは太いナノチューブの方が細いものよりも光学的フォノンモードが数多く励起されるために、それらのフォノン散乱の影響が顕著に現れることに由来する。

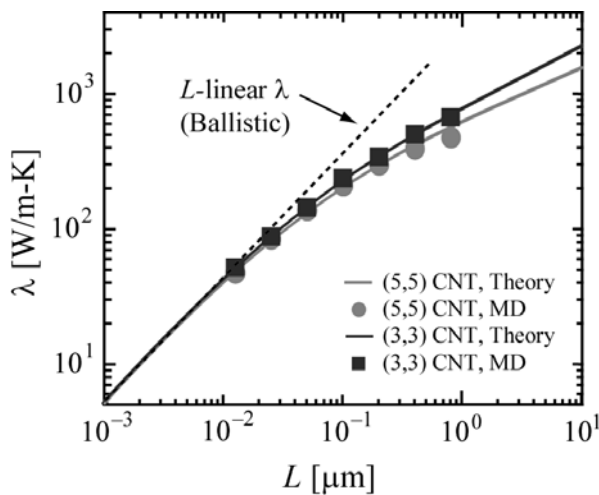


図1: カーボンナノチューブの熱伝導率の長さ依存性

参考文献

- [1] S. Maruyama, Physica B **323**, 193 (2002); J. Shiomi and S. Maruyama, Jpn. J. Appl. Phys. **47**, 2005 (2008).
- [2] T. Yamamoto, S. Konabe, J. Shiomi and S. Maruyama, submitted.

<sup>1)</sup> Takahiro Yamamoto: Dept. of Materials Engineering, The Univ. of Tokyo, Tokyo 113-8656

<sup>2)</sup> Satoru Konabe: Dept. of Physics, Tokyo Univ. of Science, Tokyo 162-8601

<sup>3)</sup> Junichiro Shiomi and Shigeo Maruyama: Dept. of Mechanical Engineering, The Univ. of Tokyo, Tokyo 113-8656