

Fig. 2. Phonon dispersion relations of (a) a 25 nm-long (5, 5) single-walled carbon nanotube and (b) a nanographite ribbon. The dispersion relations were obtained by computing the energy density<sup>(7)</sup>. Softening of low energy phonons due to unfolding of SWNT is observed as indicated with the arrows.

わかる。図中の矢印で示すように、NGR の分散関係では、低周波数帯に位置する面外振動に由来するフォノン枝が湾曲する。従って、NGR のフォノン状態密度 (Phonon Density of States, PDOS) の分布は SWNT のそれに比べて低周波数側に偏る。

**3.2. SWNT 熱伝導率の長さ依存性** 非平衡 MD シミュレーションに用いて、SWNT の熱伝導率の長さ依存性を求めた結果、Fig. 3 に示すように、弾道的熱伝導から拡散性の比較的強い熱伝導への遷移過程が観測された。ナノチューブ長  $L=10$  nm 付近において、破線で示した  $\lambda \propto L$  (熱コンダクタンス一定) に熱伝導率のプロファイルが漸近することから、熱伝導はおおよそ純粋な弾道性を示すと考えられる。室温下では幅広い光学フォノンが励起されることより、音響フォノンに限らず、光学フォノンも弾道的に振舞うと考えられる。また、熱伝導の拡散性が増加するに従い、勾配  $|\partial\kappa/\partial L|$  は  $L=100$  nm 付近まで単調に減少し、その後、熱伝導率は凡そ  $L$  の指数関数で増加する傾向が観察された。

一方、NGR の熱伝導率の長さ依存性を評価したところ、SWNT の場合と同様に、弾道的熱伝導から拡散・弾道的熱伝導への遷移過程が観察された (Fig. 3)。SWNT と NGR の熱伝導率を比較すると、NGR の熱伝導率の方が大きく、その差が  $L$  の増加に伴って減少する傾向が見られた。弾道的熱伝導が支配的な領域における熱伝導率の差はフォノン分散関係の違いを反映している。フォノン状態が連続的に存在する無限長の物質においては、弾道的熱伝導は分散関係の形状には依存せず、フォノン枝の始点と終点のみによって決まることが知られているが<sup>(10)</sup>、フォノン状態が離散的に存在する有限長物質の場合、弾道的熱伝導は分散関係及び PDOS の違いに依存する。前述の通り、NGR の方が SWNT より低周波数帯のフォノン状態密度が高いため、NGR の方が SWNT よりも高い弾道的熱伝導を示すものと考えられる。また、 $L$  の増加に伴い SWNT と NGR の熱伝導率の差が縮まる傾向は、フォノン枝形状の変化がフォノンの散乱特性にも影響を及ぼす可能性を示唆する。

**3.3. SWNT 熱伝導率の直径依存性** 2つの異なる直径を有する SWNT に関して、熱伝導率の長さ依存性を計算した結

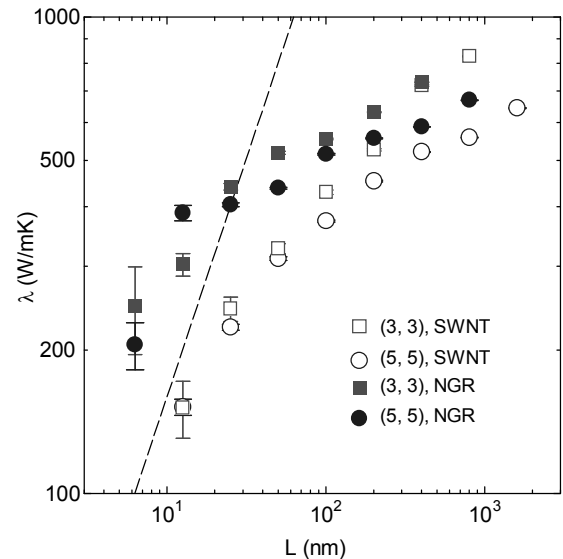


Fig. 3. Length dependences of thermal conductivity of SWNTs and NGRs. Profiles of SWNTs (NGRs) are shown for two different diameters (widths). Dashed line denotes  $\lambda \propto L$  to indicate the slope in case of pure ballistic heat conduction. The error bars denote the fitting residuals.

果を Fig. 3 に示す。  $L < 100$  nm においては、(3,3)SWNT と (5,5)SWNT の熱伝導率には、違いがほとんど見られなかった。これは、この領域で弾道的熱伝導が支配的であることを示唆し、前節での考察と一致する。分散関係の直径への依存性を無視した場合、弾道的熱伝導はフォノンの数のみに依存する。本研究では断面積の定義として  $A = \pi r^2$  を用いているため、フォノン数は原子の数つまり断面積  $A$  に比例する。従って、長さが同じ場合、 $A$  でスケールされた熱伝導率は、 $d$  に依存しない。一方、 $L > 100$  nm においては、(3,3)SWNT の熱伝導率が(5,5)SWNT のそれを上回り、その差は  $L$  とともに増加する傾向が得られた。これはフォノンの散乱強度又は頻度が、直径と共に増加することを示唆する。

#### 4. まとめ

非平衡古典分子動力学シミュレーションを用いて、室温下における、有限長 SWNT の熱伝導率の長さ依存性を計算した。熱伝導率の長さに対する勾配より、弾道的熱伝導から拡散・弾道的熱伝導への遷移過程を捉えた。また、SWNT と NGR の熱伝導率の長さ依存性を比較することにより、フォノン状態密度の弾道的熱伝導及び拡散熱伝導への寄与を明らかにした。さらに、SWNT 熱伝導率の直径依存性を計算することで、フォノン散乱による拡散効果がナノチューブの直径と共に増加することを示した。

#### 参考文献

- (1) C. Yu, L. Shi, Z. Yao, D. Li and A. Majumdar, Nano Lett. 5(2006), 1842.
- (2) E. Pop, D. Mann, Q. Wang, K. Goodson and H. Dai 6(2006), 96.
- (3) N. Mingo and D. A. Broido, Nano Lett., 5(2005), 1221.
- (4) J. Wang and J-S Wang, Appl. Phys. Lett. 88(2006), 111909.
- (5) S. Maruyama, Physica B, 323 (2002), 272.
- (6) S. Maruyama, Micro. Thermophys. Eng., 7(2003) 41.
- (7) J. Shiomi and S. Maruyama, Phys. Rev. B 73(2006), 205420.
- (8) W. Brenner, Phys. Rev. B, 42(1990), 9458.
- (9) Y. Yamaguchi, S. Maruyama, Chem. Phys. Lett., 286(1998), 336.
- (10) N. Mingo, D. A. Broido, Phys. Rev. Lett., 95(2005), 096105.