

## フォノンの粒子性と波動性を利用した熱輸送制御

志賀拓磨

東京大学大学院工学系研究科 機械工学専攻

shiga@photon.t.u-tokyo.ac.jp

排熱を電気に直接変換できる熱電変換の性能は無次元性能指数  $zT$  によって決まる。 $zT$  は材料の電気・熱特性の両方に依存し、ゼーベック係数( $S$ )、電気伝導率( $\sigma$ )、熱伝導率( $\kappa$ )と温度( $T$ )を用いて、 $zT=(S^2\sigma/\kappa)T$  で表される。 $zT$  は熱伝導率の逆数に比例することから、これまで構造制御によって熱伝導率を低減し、熱電性能を向上させる方法が取られてきた。構造制御の中でも特にナノ構造化が熱伝導率低減に有効であることが実験的に示されているが、電気的特性をあまり犠牲にせず、熱(フォノン)輸送を効果的に阻害するためのナノ構造体の種類や長さスケールを選定するためには、熱伝導に寄与するフォノンの周波数や平均自由行程を知る必要がある。フェルミ面近傍のキャリアが寄与する電気伝導とは異なり、熱伝導に寄与するフォノンのエネルギー帯は幅広い。例えばシリコンでは、16 THz までの周波数帯、1 nm-10  $\mu\text{m}$  の平均自由行程領域のフォノンが熱伝導に寄与する。したがって、単一の構造制御ではなく、長さスケールが異なる構造体を複数組み合わせ合わせた構造制御が必要となる。このようにナノ構造体の種類や長さスケールを同定するためには、対象とする材料の周波数または平均自由行程領域におけるフォノンの熱伝導率、すなわち熱伝導率スペクトルを高精度に求める必要がある。本講演では、第一原理に基づいた熱伝導スペクトルの計算手法と、熱伝導率スペクトルに基づいた熱電変換効率向上のための構造デザインについて紹介する。また、近年注目を集めているフォノンニック結晶など、フォノンの粒子性と波動性を用いた熱伝導制御の現状と課題についても触れる。