

審査の結果の要旨

氏名　　デレック アシュリー トーマス

熱電材料は、世界的なエネルギー需要の増大と共に近年ますます注目されるようになってきている。しかし、実用化されている熱電材料は地球上の埋蔵量が少ない元素を使用しているため、低環境負荷かつ十分な性能を有する材料の探索が続いている。カーボンナノ構造は、ナノ構造化による熱電変換性能の向上および低環境負荷の点から熱電材料として高い可能性を秘めているが、多様なカーボンナノ構造の中で熱電特性が研究されているのはカーボンナノチューブやグラフェン等、一部のものにこれまで限られていた。本論文は、コニカルカーボンナノファイバーの熱電材料としての可能性に注目し、その熱電特性を理論計算によって解明することを目指したものである。本論文は6章からなる。

第1章は緒言である。熱電現象の原理とその排熱回収等への応用を概説し、エネルギー需要の全世界的な増大と共に熱電材料への注目が高まっていることを述べている。さらに、ナノ構造材料が、熱電変換素子の小型化と熱電性能の向上の点から特に注目され、熱電材料探索の重要な対象となっていることを指摘し、本研究の意義を明確にしている。

第2章では、本研究の基盤となる理論と先行研究について、より詳しく述べている。出力や効率等、熱電材料の性能評価に重要な物理量に重点を置いてその理論的な基盤を概説すると共に、特に性能指数 ZT ($=(\text{電気伝導率}) \times (\text{ゼーベック係数})^2 \times (\text{温度}) / (\text{熱伝導率})$) の持つ意味と重要性について詳述した後、ナノ構造の熱電特性について先行研究を概観している。特にナノカーボン材料について詳しく述べ、高い電気伝導率と低い熱伝導率を併せ持つ可能性がある点でコニカルナノファイバーの熱電特性を詳しく調べる価値があることを指摘し、本研究の意義をさらに明確にしている。

第3章では、本研究で用いたナノファイバーのモデリングの方法について述べている。まず、本研究において考案した、様々なコニカルナノファイバーの構造を3つの整数で表現する記法を説明した後、本研究で用いた古典分子動力学法について概説している。次に、これを用いて熱平衡状態におけるナノファイバーの構造について検討し、熱力学的安定性等の観点から、以降の章の研究に用いた構造モデルが妥当であることを確認した。

第4章では、古典分子動力学法を用いた格子熱伝導率の評価について述べている。まず、1次元熱伝導の理論を概説した上で、古典分子動力学法を用いた熱伝導特性の計算手法を説明している。そして、コニカルナノファイバーおよび比較対象としてカーボンナノチューブ、グラフェン、およびグラファイトについて格子熱伝導率を評価した結果を述べている。本研究で検討した2種類のコニカルナノファイバー（カップ積層ナノファイバーとヘリックスナノファイバー）の熱伝導率が、いずれもナノチューブやグラフェンに比べて2桁程度低いことを示した。さらに、2種類のコニカルナノファイバーは熱伝導率の点では同程度

であるものの、フォノン分散の様子は大きく異なっていることを指摘した。

第 5 章では、熱電特性の評価について述べている。コヒーレント伝導領域にある 1 次元系における熱電特性関係の物理量（電子による電気伝導度および熱伝導度、ゼーベック係数）の、タイトバインディング法に基づく非平衡グリーン関数法による評価方法を述べた後、コニカルナノファイバーに対するこれらの諸量の計算結果、およびそれらと前章で得た格子熱伝導率とから算出した性能指数 ZT の計算結果を述べている。2 種類のコニカルナノファイバーの ZT の値はフェルミ準位の位置によって大きく変動すること、そしてフェルミ準位の値によってはいずれのナノファイバーにおいても ZT が 1 を大きく超え得ることを指摘した。

第 6 章は総括である。

以上のように、本論文は、コニカルカーボンナノファイバーの熱電特性を理論計算により解析した。ドーピング等によってフェルミ準位を適切な位置に調整すれば、熱電特性の性能指数 ZT が 1 を大きく超え得る可能性を明らかにし、ナノ構造の熱電特性を理解する上で有用な知見を得た。よって本論文のナノスケール電子・熱物性学、計算マテリアル工学への寄与は大きい。

よって本論文は博士（工学）の学位請求論文として合格と認められる。