



Title	酸化物における転位構造が微視的熱輸送に及ぼす影響
Author(s)	関本, 渉
Citation	大阪大学, 2025, 博士論文
Version Type	
URL	https://hdl.handle.net/11094/101649
rights	
Note	やむを得ない事由があると学位審査研究科が承認したため、全文に代えてその内容の要約を公開しています。全文のご利用をご希望の場合は、大阪大学の博士論文についてをご参照ください。

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

The University of Osaka

論 文 内 容 の 要 旨

氏 名 (関 本 涉)	
論文題名	酸化物における転位構造が微視的熱輸送に及ぼす影響
<p>論文内容の要旨</p> <p>本論文では、酸化物における転位の格子熱伝導度低減機構を原子レベル計算により明らかにし、その支配因子を報告した。転位が格子熱伝導機構にあたる影響に関する体系的な理解を得ることを目的としてMgOとSrTiO₃の二つの酸化物を対象に、原子レベル計算を用いて格子熱伝導機構を解析した。</p> <p>第1章では、研究全体の背景、目的について述べた。</p> <p>第2章では、用いた計算手法と計算手順について述べた。また、転位の格子熱伝導度機構を評価するために用いた計算モデルの作製方法についても述べた。</p> <p>第3章では、モデル材料MgOと、モデル材料と機能性材料の二つの側面から注目されるSrTiO₃の完全結晶の格子熱伝導機構を明らかにするために、格子熱伝導度やフォノン状態を解析した。MgOでは、MgとO原子が高度に結合することで、同程度の格子熱伝導度への寄与を示した。また、縦波・横波のフォノンモードの寄与が方位により異なることを明らかにした。一方、SrTiO₃では、異なる結合種（Sr-O、Ti-O）により各元素の寄与が異なり、TiO₆八面体が協調振動することで熱伝導の多くを担うことを明らかにした。その結果、一般に格子熱伝導の多くを担う音響フォノンに加え光学フォノンも格子熱伝導度に寄与することを明らかにした。</p> <p>第4章では、転位構造が格子熱伝導度に与える影響を明らかにするために、格子熱伝導度の転位構造依存性を解析した。その結果、刃状転位ではバーガースベクトルの大きさが転位芯構造やその周囲の局所構造に影響を与え、格子熱伝導度が低下することを明らかにした。また、らせん転位では刃状転位とは異なる局所構造変化によって、過剰体積が小さいにもかかわらず格子熱伝導度が低下することを明らかにした。さらに、拡張転位は部分転位と積層欠陥に分解することで、完全転位よりも低い格子熱伝導度を示した。従来の解析手法では考慮されていない転位の種類や構造により異なる微視的な構造変化とその格子熱伝導度低下機構を示した。</p> <p>第5章では、完全刃状転位が格子熱伝導機構に与える影響を明らかにするために、完全刃状転位による局所構造変化や微視的な格子熱伝導度を解析した。転位芯構造の違いにより原子熱伝導度が変化し、転位芯の周囲では結合歪に応じて局所的にフォノンの周波数帯が異なることを明らかにした。また、転位による振動の異方性による非調和性の発現がフォノンの伝導を阻害し、特に音響フォノンの低周波数帯の伝導を著しく低下させることを示した。さらに、転位周囲での異方的な歪場が縦波・横波を個別に散乱することを明らかにした。</p> <p>第6章では、刃状転位以外の様々な完全転位がフォノン散乱機構に与える影響を明らかにするために、それらの転位による局所構造変化と微視的な格子熱伝導度を解析した。らせん転位は転位芯周囲の結合角変化による局所構造変化が格子熱伝導度を低下させることを明らかにした。また、刃状転位と比較するとらせん転位は調和フォノンへの影響は弱い、転位芯での非調和性の発現により格子熱伝導度が低下したことを示した。混合転位では結合長と結合角の変化を伴うことで、完全刃状や完全らせん転位よりも格子熱伝導度がさらに低下することを明らかにした。</p> <p>第7章では、拡張転位が格子熱伝導機構に与える影響を明らかにするために、拡張転位に加え積層欠陥の微視的な格子熱伝導機構を解析した。拡張刃状転位は縦波・横波すべてのフォノンを散乱し、拡張らせん転位では積層欠陥との相互作用により散乱されにくい横波フォノンが存在することを明らかにした。拡張転位は広範囲の異方的な歪を伴い、非調和性が発現することで完全転位とは異なる格子熱伝導機構を示した。</p> <p>第8章では、第7章までで得られた結果を実材料への応用に向けて一般化するために、分子動力学法をもちいて塑性変形をシミュレーションし、複雑な転位組織が格子熱伝導度に与える影響を解析した。その結果、単一な転位組織と比較して、転位組織の複雑さが格子熱伝導度をさらに低下させることを明らかにした。転位組織の複雑化が格子熱伝導度を大幅に低減する要因の一つであることを示した。</p> <p>第9章では、研究全体を総括した。</p>	

論文審査の結果の要旨及び担当者

氏 名 (関 本 渉)			
論文審査担当者	(職)	氏 名	
	主 査	教授	吉矢 真人
	副 査	教授	安田 弘行
	副 査	教授	小泉 雄一郎

論文審査の結果の要旨

格子熱伝導度は多くの機能性材料に要求される物性であり、様々な格子欠陥に影響される。格子欠陥の中でも転位は材料中に普遍的に存在しており、近年ではその転位を用いた格子熱伝導制御が注目されている。しかし、その転位が格子熱伝導機構に与える影響の理解は限られているため、制御指針の確立が困難になっている。本論文では、転位の影響を定量的に評価可能な計算的手法を用いて、二つの材料を対象に、転位構造が微視的な格子熱伝導に与える影響を解明している。一つはモデル材料である MgO である。もう一つは、モデル材料のみならず熱電変換材料としても注目される SrTiO_3 である。

第3章では、 MgO と SrTiO_3 の完全結晶における格子熱伝導機構について議論している。その結果、 MgO では Mg と O 原子が高度に結合しているのに対し、 SrTiO_3 では Ti と O 原子が協調的な振動をすることによって格子熱伝導度の多くが担われることを明らかにしている。それにより、 SrTiO_3 では音響フォノンに加え、光学フォノンも格子熱伝導度に寄与することを示している。

第4章では、 MgO と SrTiO_3 の転位構造と格子熱伝導度の転位構造依存性について議論している。その結果、刃状転位とらせん転位といった転位の種類の違いによって、転位構造は大きく異なることが示されている。また、完全転位では空隙とその周囲の局所構造変化が、拡張転位では部分転位と積層欠陥への分解によって格子熱伝導度に寄与することを明らかにしている。

第5章では、完全刃状転位が格子熱伝導度やフォノン状態に与える影響を議論している。刃状転位では、転位芯周囲の異方的歪場や空隙といった転位構造に起因した非調和性が、音響フォノンの低周波数伝導を阻害し、格子熱伝導度を大きく低下させることを明らかにしている。

第6章では、刃状転位以外の様々な完全転位がフォノン散乱に及ぼす影響を議論している。らせん転位では刃状転位とは異なる転位芯近傍での非調和性によって格子熱伝導が阻害されることを明らかにしている。

第7章では、拡張転位と積層欠陥の格子熱伝導特性を議論している。拡張刃状転位はすべてのフォノンモードを散乱する一方、拡張らせん転位では特定の横波フォノンが散乱を受けにくいことを明らかにしている。

第8章では、第7章までで得られた結果を実材料への応用に向けた一般化をするために、分子動力学法により塑性変形をシミュレーションし、それにより得られた複雑な転位組織が格子熱伝導機構に与える影響を議論している。その結果、転位線が屈曲することによって直線的な転位よりも格子熱伝導度が大幅に低下することが示されている。

以上のように、本論文は機能性材料として幅広く用いられる酸化物における転位について、その微視的な格子熱伝導機構を体系的に解明しており、その結果をもとに実材料への応用に向けた一般化についても示されている。よってその学術的・工学的価値は高く、本論文は博士論文として価値あるものと認める。