

令和 5 年 6 月 16 日現在

機関番号：14401

研究種目：基盤研究(C) (一般)

研究期間：2020～2022

課題番号：20K05062

研究課題名(和文) 多階層の高次界面制御による共有結合材料の選択的熱伝導抑制機構の解明

研究課題名(英文) Selective Control of Thermal Conduction in Covalent Materials with Hierarchical Structures based on Underlying Mechanism behind Suppression of Thermal Conduction on multi-size scales of Interfaces

研究代表者

吉矢 真人 (Yoshiya, Masato)

大阪大学・大学院工学研究科・教授

研究者番号：00399601

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,300,000円

研究成果の概要(和文)：実材料中には様々な長さスケールの構造欠陥が存在し多彩な材料特性の発現へと繋がることが期待され階層的構造制御に注目が集まっているが、各スケールにおける材料特性への寄与は必ずしも明らかではない。本研究では従来の熱伝導理論に囚われることなく計算科学的手法、特に第一原理計算や分子動力学法や格子動力学法を併用し、構造欠陥による熱伝導度変化の定量評価を試み、局所熱伝導度の評価を通じて、様々な長さスケールの構造欠陥が熱伝導特性に与える影響を解明した。

研究成果の学術的意義や社会的意義

従来は材料中の様々な熱伝導度への影響は、構造欠陥の長さスケールと平均自由行程の相対的關係にて理解されてきた。これにより例えば結晶粒の微細化、特にナノスケール結晶粒の導入による熱伝導度の低下が説明されてきた。また、異なる構造欠陥種の影響は加算則による説明が試みられてきた。本研究では計算科学的手法を駆使し計算機実験を行う事で、長さスケールの個別の構造欠陥種の熱伝導度を明らかにするとともに加算則に囚われない影響の解明を行った。これは学術的には従来理論を越えた新たな知見の獲得で今後の研究を加速させる意義があると共に、ますますダウンサイジング化が進むデバイスの放熱・遮熱への道を拓いた意義がある。

研究成果の概要(英文)：Increasing attention has been paid to roles of structural defects with wide range of length scale on realizing various materials properties. However, their actual contributions have not been clarified yet. In this study, without being confined to conventional theories of thermal conductivity, we have attempted to clarify the roles of the structural defects on controlling thermal conduction by ab initio calculations and molecular dynamics together with lattice dynamics, through quantifying the changes of thermal conductivity and local thermal conductivity near the structural defects, which has revealed the influence of the structural defects on thermal conduction in materials.

研究分野：計算材料科学

キーワード：熱伝導 第一原理計算 分子動力学法 格子動力学法 転位 結晶粒界 ドメイン

1. 研究開始当初の背景

従来の熱伝導理論では熱伝導低下に繋がるフォノン散乱を説明するために、主として平均自由行程と構造欠陥の長さスケールの比較を基に、議論が進められてきた。本課題で主対象とする擬3元系硫化物に関しては、材料中に含まれる様々な長さスケールの多様な構造欠陥が、材料の全熱伝導度を大きく減少させていることが実験事実として明らかにされていた。この擬3元系硫化物は閃亜鉛鉱型の派生結晶構造を有しているため、カチオンの質量差に注目し、その母構造であるシリコンの原子間相互作用を用い、摂動分子動力学法にて熱伝導度計算を行い、結晶構造内包界面、カチオン混在の効果、カチオン配置の乱れ、規則相と不規則相の混在によりそれぞれ熱伝導度がどのように低下するかを明らかにしてきた (ACS Appl. Nano Mater., 1, 6, (2018) 2579-2588)。しかしながらこの段階では、これらカチオン種の実際の性質を取り入れられてはならず、それゆえ、これらの構造欠陥の熱伝導度への影響の議論は半定量的に留まっていた。特に構造欠陥の階層性に関しては未だ明らかでない部分が多かった。

2. 研究の目的

本研究では、Cu、Zn、Sn という異なるカチオンを有する擬3元系硫化物、Cu-Zn-Sn-S を主たる対象とし、フォノン散乱及び熱伝導のメカニズムを明らかにするためにモデル材料を併せて対象とし、階層的構造のそれぞれの因子がフォノン熱伝導にどのような影響を与えるかを明らかにすることを目的とした。特にマイクロメートルを切る構造欠陥の長さスケールにより焦点を当て、従来理論の問題点を明らかにした上で、熱伝導度制御に向けて今後の研究にて注目する必要がない材料の諸因子を明らかにすることも目指した。

3. 研究の方法

本研究における熱伝導計算では、関数形が単純で理解が容易な古典的原子間相互作用ポテンシャルを用い、研究代表者が考案した摂動分子動力学法およびそれに基づく局所熱伝導度評価を行った。研究代表者は第一原理計算も主たる手段として頻繁に用いるが、原子間結合の記述に関しては第一原理計算には劣るものの本研究ではモデル精度、すなわち構造モデルの大きさが重要な鍵となるためである。逆格子空間での解析に強い格子動力学も併用した。構造モデルが大きくなった場合は第一ブリルアンゾーンが極めて小さくなり、もはや波数ベクトルが良い量子数ではなくなるが、格子動力学計算はフォノンの基礎的理解を与えるため併用した。加えて、第一原理計算も用いた。上述の古典的原子間相互作用の関数形は固定しているが、各パラメータは第一原理計算から得られた結果を再現する様に原子間結合の特徴を抽出した。また、古典的原子間相互作用を用いた計算の物理精度の確認のために、両手法で同じ計算が可能な小さな構造モデルを用い、第一原理計算の結果との照合を行うことで、議論の正確性を期した。

4. 研究成果

(1) 結晶構造内包界面

単純な結晶構造は格子定数が数 Å 程度であるが、多元系化および並進対称性の低下により格子定数が 10 Å を越えるものも少なくない。本研究の擬3元系硫化物でも、カチオンの配置や並進対称性の低下により単位格子の格子定数が 10 Å を越えることがある。この擬3元系硫化物では閃亜鉛鉱型結晶構造に3種のカチオンが配置し、そのカチオン配置はシア面を内包することが知られている。その場合、結晶構造内包界面間の距離はナノメートルスケールやオングストロームスケールにまで低下する。

従来の熱伝導理論では同相界面である結晶粒界にてフォノンが散乱するとされる。この時に想定されている結晶粒径は、マイクロメートルスケールである。平均自由行程がこの結晶粒径により決められるというのが最も粗い近似である。実際には、結晶粒界にてフォノン伝播が途絶することはないが平均自由行程は材料設計のガイドラインとして容易にも散ることが出来る目安となる指標である。小傾角粒界は転位の配列で記述することが出来るため、転位によるフォノン散乱は容易に構造欠陥によるフォノン散乱のメカニズムの理解に繋がる。

図1にモデル材料中の2種類の転位によるフォノン散乱の様子を局所熱伝導度で示す。転位芯近傍ではいずれも原子配

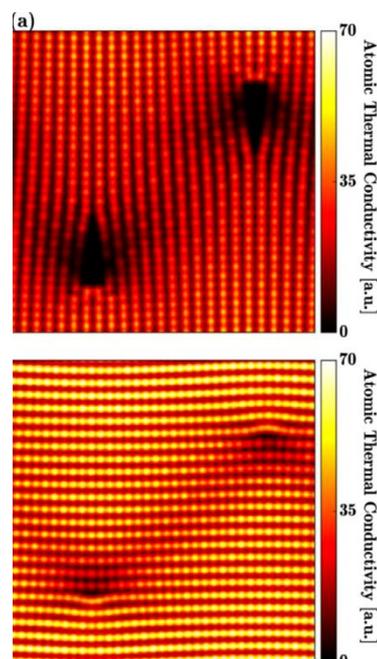


図1 MgO中の原子熱伝導度。完全結晶に比べ、転位芯のみならず周囲の熱伝導度の低下が認められる。

列の乱れに起因して、局所熱伝導度が大きく低下している様子が見て取れる。加えて転位芯の間では局所熱伝導度の低下が認められる。これは転位間相互作用による原子の変位、すなわち原子間の結合歪との直接相関は少なく、結合歪みの結果として生じた協調的原子振動が当方的材料中の転位にて生じ、それが熱伝導度に影響しているためであることを明らかにした (Scr. Mater., 202 (2021) 113991)。加えて、弾性論に基づく転位論からは転位線から数バーガーズベクトル分とされる転位芯領域の外側においても、局所熱伝導度が大きく低下していることが分かる。これはこの材料にて、伝導を担うフォノンモードが大きく非局在化しているため、転位芯領域から離れた場所でも局所熱伝導度が低くなる。すなわち熱伝導を担うフォノンの準粒子的描像では理解できず、波動性をきちんと理解しなければならないことになる。

このように、熱伝導度が転位芯から離れた領域における弾性歪場に直接依存しないことや、フォノンの波動性が重要となるという事は、転位が配列し弾性歪場の打消しが生じ得る小傾角粒界でも同様に、また大傾角粒界でも同様に、更に本研究の主たる対象である結晶格子内のシア面、すなわち格子の連続性が無い結晶格子内包界面から離れた領域でも、同様に熱伝導抑制を行うことが出来ることを意味している。つまり、非局在化したフォノンの散乱が生じ、適切に結晶格子内包界面を導入することにより、局在化した電子の状態を変えることなく、同じ量子波動であるフォノンのみを散乱して熱伝導低下を図れることを見出した。

(2) ナノ界面による平均自由行程以上の変化

熱伝導度は、輸送される熱エネルギーの単位熱量としての比熱、フォノン群速度、そして平均自由行程の積で大まかに理解することが出来る。詳細にはこれらはフォノン周波数の関数と考えるべきだが、音響モードがフォノン熱伝導度の主たる担い手という近似の下では3つのスカラー量の積で表されることも多い。平均自由行程の代わりにフォノン群速度で割った形となる緩和時間を用いることもある。高温古典極限を与えるデュロン・プティの法則が示すように、比熱は少なくとも高温では材料により大きく変わらないか物質が決まれば定まる値を考えることもできる。通常は逆格子空間でのフォノン分散曲線の傾きで定義される群速度は、それゆえに物質が決まればその単位格子で決定され物質が決まれば定まる値と考えることもできる。つまり、残る1つが様々な材料中の構造欠陥により熱伝導度を変えると考え、それが平均自由行程の変化として理解されることが多い。

この考えが構造欠陥の長さスケールがナノメートルスケールになっても適用可能かどうかを定量的に明らかにするため、モデル材料 MgO に関して、結晶粒界での面方位や相対位置関係および原子位置関係を変えず、結晶粒界の面間隔のみを変化させ、結晶粒界近傍のみの局所熱伝導度およびそれ以外の結晶内部の局所熱伝導度を評価した。図2に粒界局所熱伝導度および粒内局所熱伝導度を示す。粒界部分の局所熱伝導度が粒内に比べて低い値を示すことは、粒界でのフォノン散乱という観点で容易に理解できる。粒径が変わらずやや一定の値を示しているが、結晶粒径が小さくなるに伴い単位長さあたりの粒界数が増加するため、この傾向からのみでも結晶粒微細化による熱伝導度の低下が説明できる。他方、結晶粒内での局所熱伝導度に注目すると、結晶粒径の低下に伴い局所熱伝導度が低下していることが見て取れる。少なくともモデル中では構造欠陥が全く存在しないため、これを説明する因子は結晶粒内の原子の結晶粒界との距離のみである。つまり、前項目(1)にて説明したフォノンの波動性が重要となり、熱伝導を担うフォノンモードの非局在化が粒内のフォノンにも結晶粒界の影響を与え、その結果として結晶粒内での局所熱伝導度が結晶粒径の低下とともに小さくなったものと考えられる。他のモデル材料での検討を重ねた結果、ナノメートルスケールになれば結晶粒界が近傍に存在することにより、結晶粒内のフォノン状態そのものが変化していることが明らかとなっている。すなわちフォノンの伝播に対する結晶粒界での散乱という理解よりも、ナノ結晶粒ではフォノン状態の変化をもたらすと理解する方がより正確といえる (Appl. Phys. Lett., 119 (2021) 231604)。

(3) カチオン配置の変化による影響

一般に合金効果として知られる元素の混合あるいは配置の乱れによる熱伝導低下は、純シリコン中にて質量のみが異なる放射性同位体の添加割合を変えた精緻な実験により明らかにされている。本研究の前段階での熱伝導度の理論計算においても、質量の異なるカチオンの混在による熱伝導度低下が認められている。本研究では、Cu、Zn、Sn という質量のみならず原子半径/イオン半径や結合の強さが異なる3種のカチオン元素の特徴を取り入れ、その影響の定量評価

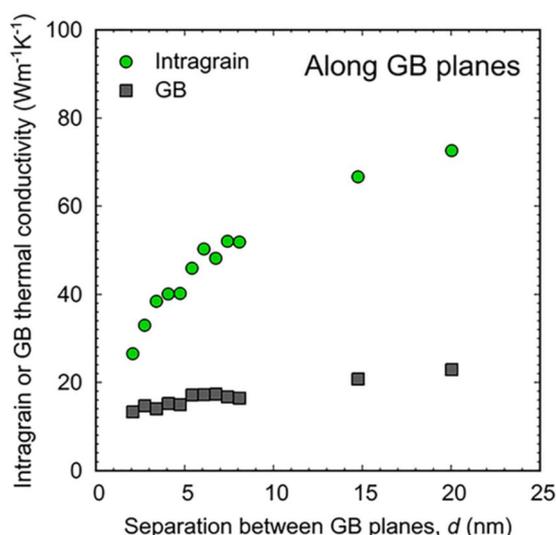


図2 粒界面間隔が変化した場合の粒界局所熱伝導度および粒内局所熱伝導度の変化。粒界局所熱伝導度は予想通り粒内に比べて低い値を示すが、粒内局所熱伝導度が粒界面間隔の低下とともに減少していることが明らかに見て取れる。

を試みた。

初めに3種の元素について、原子半径あるいは原子間距離、質量、結合の強さの3つの因子の平均値を求め、そのうち、1種類だけをその元素の状態に復することで、これら3つの因子の影響のみを抽出した熱伝導度計算を行った。その結果、原子間距離、質量、結合の強さの順に熱伝導度への影響が大きく、熱伝導度低下した。これら3つの因子はいずれこれら3種の元素の特徴であるが、主たる対象材料である硫化物中ではこれらの特徴は質量を除いて変化する。そのため本研究では、第一原理計算を行い、原子間距離は擬1元系硫化物の格子定数から、結合の強さは弾性定数の計算から、それぞれ古典的原子間相互作用パラメータを抽出した。擬三元系についても同様にして、三つの因子の影響のみを抽出した場合の計算機実験を行った。

擬一元系の場合には単純な予想に反して、原子間結合の影響を取り入れた場合に熱伝導度が大きく変化した。またいずれの場合でも SnS の場合に熱伝導度は最小となった。原子の質量の影響は最も熱伝導度に差が生じないという結果になった。この計算機実験からは、本研究の主たる対象である擬三元系硫化物の場合には、Snが入っていることが低熱伝導化に繋がるという事が示唆される。また本研究開始時になされていた計算では、擬三元系硫化物のカチオンの混在の影響を過小評価していたこととなる。擬三元系の場合には擬一元系の場合と大きく異なり、原子間距離のカチオンの違いによるばらつきが熱伝導度を大きく低下させている結果となった。これは、カチオン種により原子間距離が異なることにより、閃亜鉛鉱型類似結晶構造に結合歪みが導入され、周期性の崩れによりフォノン散乱が増加したためであると理解することが出来る。つまり、擬三元系硫化物では、単純予測によけるカチオン質量のばらつきのみならず、原子間結合距離の変化や原子間結合の強さの違いが同等以上に熱伝導度低下に影響していることが明らかとなった。

(4) 不規則化およびモザイク構造の形成の影響

上述のように不規則化すれば合金効果により熱伝導度は低下するものと予測される。本研究で計算を行った結果、その傾向が確認できた。次に規則相と不規則相がモザイク構造をメソスケールにて形成する効果について同様の計算を行った。前述のように両相は結晶格子に大きな違いはなく、カチオン配置が規則的か不規則的かの違いが主である。実験的にはこれに伴い僅かな塑性変化も認められている。本研究で計算を行った結果、モザイク構造の長さスケールが小さくなると共に熱伝導度の低下が認められた。しかしながら、ある一定の長さを下回ると、熱伝導度が逆に規則相に比べて増加するという結果が得られた。このことはフォノン散乱に異なるメカニズムが存在することも示唆されるが、(2)で明らかにしたことがここでも生じていると考えると容易に理解できる。

以上の様に、古典的原子間相互作用のパラメータを第一原理計算から抽出し、摂動分子動力学法により局所熱伝導度の評価も含め、熱伝導メカニズムを本研究では明らかにした。カチオン配置構造の不規則化は配置のエントロピー増大によるためであることから、焼鈍温度を増加させることで規則相に対する不規則相の割合を増やすことが出来ると推測される。他方、規則相と不規則相のメソスケールでのドメイン構造の形成に関しては、エンタルピー項の影響も考慮せねばならない。また熱電変換などに用いる場合には、本研究の対象外ではあるが電子的特性の影響も明らかにしなければならない。フォノン伝導と電子伝導は量子波動の伝播という点で共通する点があるものの、波動の局在制という観点では違いがある。しかしながら本研究で見出した長さスケールを跨いだフォノン熱伝導のメカニズムの変化に基づき検討を進めれば、社会が要求するデバイスに適した伝導現象の微視的制御に繋がるものと考えられる。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計6件（うち査読付論文 6件/うち国際共著 0件/うちオープンアクセス 3件）

1. 著者名 K. Shitara, K. Yokota, M. Yoshiya, J. Umeda, K. Kondoh	4. 巻 843
2. 論文標題 First-principles design and experimental validation of α -Ti alloys with high solid solution strength and low elasticity	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 Journal of Materials Science and Engineering A	6. 最初と最後の頁 143053
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1016/j.msea.2022.143053	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 S. Fujii, K. Funai, T. Yokoi, M. Yoshiya	4. 巻 119
2. 論文標題 Grain-size dependence and anisotropy of nanoscale thermal transport in MgO	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Applied Physics Letters	6. 最初と最後の頁 231604
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.2109/jcersj2.21032	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -
1. 著者名 B. Feng, A. Kumamoto, K. Matsui, M. Tanemura, M. Yoshiya, H. Yoshida, Y. Ikuhara	4. 巻 129
2. 論文標題 Surface segregation of 3 mol % yttria-doped tetragonal zirconia particle studied by atomic-resolution scanning transmission electron microscopy-energy-dispersive X-ray spectroscopy	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Journal of the Ceramic Society of Japan	6. 最初と最後の頁 561-565
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.2109/jcersj2.21032	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 T. Ishibe, R. Okuhata, T. Kaneko, M. Yoshiya, S. Nakajima, A. Ishida, Y. Nakamura	4. 巻 4
2. 論文標題 Heat Interfacial Transmission through propagon-phonon interaction in epitaxial amorphous-crystalline multilayer	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Communications Physics (Nature pub.)	6. 最初と最後の頁 153
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1038/s42005-021-00653-w	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -

1. 著者名 K. Shitara, M. Yoshiya, J. Umeda, K. Kondoh	4. 巻 203
2. 論文標題 Substantial Role of Charge Transfer on Diffusion Mechanism of Interstitial Elements in Titanium: A First-Principles Study	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Scripta Materialia	6. 最初と最後の頁 114065
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.scriptamat.2021.114065	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 W. Sekimoto, S. Fujii, M. Yoshiya	4. 巻 202
2. 論文標題 Direct numerical analyses of nanoscale thermal transport near MgO edge dislocations	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 Scripta Materialia	6. 最初と最後の頁 113991
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.scriptamat.2021.113991	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている (また、その予定である)	国際共著 -

〔学会発表〕 計35件 (うち招待講演 11件 / うち国際学会 11件)

1. 発表者名 M. Yoshiya, W. Sekimoto, S. Fujii, T. Yokoi
2. 発表標題 Beyond correlations among local atomic coordination environments and resultant phonon thermal conduction near dislocations and grain boundaries
3. 学会等名 46th International Conference and Expo on Advanced Ceramics and Composites (ICACC2022) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Kaiyuan YAO、藤井進、吉矢真人
2. 発表標題 第一原理分子動力学法によるMoS ₂ /H ₂ O固液界面での水分子挙動解析
3. 学会等名 材料物性工学談話会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 植木洋平、藤井進、吉矢真人
2. 発表標題 Mg ₃ Sb ₂ 中フレンケル欠陥がフォノン状態に与える影響とその形成過程
3. 学会等名 材料物性工学談話会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 吉澤圭太、藤井進、吉矢真人
2. 発表標題 Cu-Zn-Sn-S系における規則・不規則相の結合状態と電子特性の評価
3. 学会等名 材料物性工学談話会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 浦田空、藤井進、吉矢真人
2. 発表標題 c-Si/a-SiO ₂ 界面における熱伝導低下とフォノン透過挙動に基づく理解
3. 学会等名 材料物性工学談話会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 原知史、関本渉、藤井進、吉矢真人
2. 発表標題 SrTiO ₃ 中刃状転位近傍の格子ひずみがフォノン熱伝導に及ぼす影響
3. 学会等名 材料物性工学談話会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 堀川貴矢、関本渉、藤井進、吉矢真人
2. 発表標題 原子レベル解析による閃亜鉛鉱型GaN中刃状転位の原子間結合長・結合角と熱伝導の関係
3. 学会等名 材料物性工学談話会
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Susumu Fujii, Tatsuya Yokoi, Atsuto Seko, Masato Yoshiya
2. 発表標題 orrelation between grain boundary structure and thermal conductivity: a computational and machine learning approach
3. 学会等名 14th Pacific Rim Conference on Ceramic and Glass Technology (PACRIM14) and GOMD 2021 Division Meeting (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 関本渉、藤井進、吉矢真人
2. 発表標題 摂動分子動力学法による転位近傍のフォノン伝導メカニズム
3. 学会等名 第31回日本MRS年次大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 藤井進、横井達矢、吉矢真人
2. 発表標題 計算科学と情報科学による粒界原子構造—熱伝導相関の解明
3. 学会等名 第15回物性科学領域横断研究会 凝縮系科学の最前線
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Susumu Fujii, Tatsuya Yokoi, Atsuto Seko, Masato Yoshiya
2. 発表標題 Nanoscale thermal transport at ceramic interfaces: a computational and machine learning approach
3. 学会等名 1st Japan-France Virtual Workshop on Thermoelectrics (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Yohei UEKI, Susumu FUJII, Masato YOSHIYA, Hiromasa TAMAKI, Tsutomu KANNO
2. 発表標題 Thermodynamic stability of Frenkel defect and its influence on phonon thermal conduction in Mg ₃ Sb ₂
3. 学会等名 1st Japan-France Virtual Workshop on Thermoelectrics (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Wataru SEKIMOTO, Susumu FUJII, Masato YOSHIYA
2. 発表標題 Impact of dislocation-core structures on phonon thermal conduction in MgO by perturbed molecular dynamics
3. 学会等名 1st Japan-France Virtual Workshop on Thermoelectrics (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Keita YOSHIKAWA, Susumu FUJII, Masato YOSHIYA
2. 発表標題 Comparisons of electronic conduction between ordered and disordered phases in quasi-ternary Cu-Zn-Sn-S sulfides
3. 学会等名 1st Japan-France Virtual Workshop on Thermoelectrics (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Yuta HINO, Susumu FUJII, Masato YOSHIYA, Takafumi ISHIBE, Yoshiaki NAKAMURA
2. 発表標題 Phonon thermal transport across heterogeneous interfaces by ab initio lattice dynamics calculation
3. 学会等名 1st Japan-France Virtual Workshop on Thermoelectrics (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 原知史、関本渉、藤井進、吉矢真人
2. 発表標題 SrTiO ₃ 中刃状転位近傍の結合歪みによる格子熱伝導度抑制機構の解明
3. 学会等名 日本金属学会2021年秋期講演大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 堀川貴矢、関本渉、藤井進、吉矢真人
2. 発表標題 ウルツ鉱型GaN転位における微視的構造変化が格子熱伝導へ及ぼす影響
3. 学会等名 日本金属学会2021年秋期講演大会
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 日野雄太、藤井進、吉矢真人、石部貴史、中村芳明
2. 発表標題 第一原理格子動力学法によるカルコゲナイド異相界面での熱伝導解析
3. 学会等名 日本セラミックス協会第34回秋季シンポジウム
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 関本渉、藤井進、吉矢真人
2. 発表標題 原子レベル計算によるMgO中の転位芯構造が格子熱伝導に与える影響
3. 学会等名 日本セラミックス協会第34回秋季シンポジウム
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 浦田空、藤井進、吉矢真人
2. 発表標題 Si/SiO ₂ 界面近傍の局所原子配列がフォノン特性へ及ぼす影響
3. 学会等名 日本セラミックス協会第34回秋季シンポジウム
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 藤井進、横井達矢、世古敦人、吉矢真人
2. 発表標題 セラミックス材料における粒界構造－熱伝導度相関解明の取り組み
3. 学会等名 日本セラミックス協会第34回秋季シンポジウム（招待講演）
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 吉澤圭太、藤井進、吉矢真人
2. 発表標題 Cu-Zn-Sn-S系におけるカチオン配列の不規則性が電子伝導に及ぼす影響
3. 学会等名 日本熱電学会学術講演会(TSJ2021)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 日野雄太、藤井進、吉矢真人、石部貴史、中村芳明
2. 発表標題 PbTe/GeS異相界面における界面構造とフォノン伝導解析
3. 学会等名 日本熱電学会学術講演会(TSJ2021)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 植木洋平、藤井進、吉矢真人、玉置洋正、菅野勉
2. 発表標題 Mg3Sb2におけるフレンケル欠陥の熱力学的安定性と格子熱伝導度への影響
3. 学会等名 日本熱電学会学術講演会(TSJ2021)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 M. Yoshiya, W. Sekimoto, S. Fujii, T. Yokoi, A. Nakamura, K. Matsunaga
2. 発表標題 Modeling of Lattice Defects and Resultant Thermal Transport Properties of Materials
3. 学会等名 International Conference on Materials for Humanity (MH 21) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 吉矢真人
2. 発表標題 結晶中の格子欠陥がフォノン熱伝導度に与える影響
3. 学会等名 応用物理学会 フォノンエンジニアリング研究会 (招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 吉矢真人
2. 発表標題 実材料への応用を考えた第一原理計算およびそこから展開
3. 学会等名 第178回研究会、電子セラミック・プロセス研究会（招待講演）
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Susumu Fujii, Tatsuya Yokoi, Craig A. J. Fisher, Masato Yoshiya
2. 発表標題 Accurately predicting thermal conductivities across ceramic grain boundaries using a machine learning approach
3. 学会等名 8th International Congress on Ceramics (ICC8) (招待講演) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Yuta HINO, Naoki WATANABE, Susumu FUJII, Masato YOSHIYA, Takafumi ISHIBE, Yoshiaki NAKAMURA
2. 発表標題 Phonon Transmission through Heterogeneous Interface between Chalcogenides
3. 学会等名 8th International Congress on Ceramics (ICC8) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Wataru SEKIMOTO, Naoki WATANABE, Susumu FUJII, Masato YOSHIYA
2. 発表標題 Suppression Mechanisms of Thermal Conduction by Edge-Dislocation in MgO
3. 学会等名 8th International Congress on Ceramics (ICC8) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 吉矢真人、関本渉、船井浩平、藤井進、横井達矢
2. 発表標題 材料中ヘテロ構造が熱伝導に与える影響
3. 学会等名 日本金属学会春季講演大会（招待講演）
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 吉矢真人、藤井進、横井達矢
2. 発表標題 熱・電子伝導の実空間詳細解析と支配因子の機械学習による特定
3. 学会等名 第14回物性科学領域横断研究会（領域合同研究会）（招待講演）
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 吉矢真人、藤井進、横井達矢
2. 発表標題 セラミックス材料の局所熱伝導率とフォノン非調和性の実空間解析
3. 学会等名 第40回電子材料研究討論会（招待講演）
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 吉矢真人、関本渉、西岡亮平、船井浩平、藤井進、横井達矢
2. 発表標題 結晶不完全性による量子伝導の制御とその起源
3. 学会等名 日本金属学会秋季講演大会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 吉矢真人、関本渉、藤井進、横井達矢
2. 発表標題 酸化セラミックス中の転位や粒界が局所熱伝導に与える影響
3. 学会等名 日本セラミックス協会秋季シンポジウム
4. 発表年 2020年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

<p>吉矢研究室対外発表記録ページ http://www.mat.eng.osaka-u.ac.jp/msp8/publication_j.html 研究-論文発表・学会発表：吉矢研究室 http://www.mat.eng.osaka-u.ac.jp/msp8/publication_j.html#r2</p>

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究協力者	横井 達矢 (Yokoi Tatsuya) (70791581)	名古屋大学・工学研究科・講師 (13901)	
研究協力者	藤井 進 (Fujii Susumu) (90826033)	大阪大学・工学研究科・助教 (14401)	

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8 . 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------