

平成31年1月18日

## 若手研究者海外挑戦プログラム報告書

独立行政法人 日本学術振興会 理事長 殿

受付番号 201880075

氏名 榎 将弘

(氏名は必ず自署すること)

若手研究者海外挑戦プログラムによる派遣を終了しましたので、下記のとおり報告いたします。  
なお、下記記載の内容については相違ありません。

### 記

1. 派遣先: 都市名 フィラデルフィア (国名 アメリカ合衆国)
2. 研究課題名 (和文) : フッ化グラフェンの熱伝導機構の探究
3. 派遣期間: 平成30年7月1日 ~ 平成30年12月28日 (181日間)
4. 受入機関名・部局名: Mechanical Engineering and Applied Mechanics, University of Pennsylvania
5. 派遣先で従事した研究内容と研究状況 (1/2 ページ程度を目安に記入すること)

分子動力学法(MD法)によってフッ化グラフェンの熱伝導機構を探究することを目的として研究を始めた。MD法では、原子間相互作用を適切なポテンシャルによって表現し、ニュートンの運動方程式を解くことで、各原子の変位や速度の時間発展を求めることができる。それらの微視的な情報を基に、熱伝導機構を解析するのが本研究内容である。MDシミュレーションのために、Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator (LAMMPS)を用いた。MD法を用いた熱伝導率計算にはよく2つの手法が使われており、1つは平衡分子動力学法(EMD法)、もう1つは非平衡分子動力学法(NEMD法)であるが、そのうち系のサイズによる熱伝導への影響が比較的小さいEMD法を本研究では採用した。熱伝導率はGreen-Kubo公式を用いて計算した。

最初に、比較的シミュレーションが容易なアルゴンを対象にしたシミュレーションを行うことでMD法とLAMMPSの扱いに慣れ、続いて修飾していないグラフェンと欠陥を有するグラフェンについてシミュレーションを行うことで、一般的なグラフェンのシミュレーションに適した系のサイズや計算時間等の計算条件を把握した。

最後に、フッ化グラフェンために開発されたポテンシャルを用いてMDシミュレーションを行った。しかし、修飾していないグラフェンの熱伝導率が前述の値や文献値と比べて妥当な値を示さず、また、グラフェンの表面にフッ素原子を配置した場合の熱伝導率と比べても、実験値や文献値ほどの熱伝導率の低下を示さなかった。理由として、ここで用いたポテンシャルがフッ化グラフェンの機械的特性を調べるために開発されたものということが挙げられる。熱物性を調べるためにはポテンシャルの改良が必要である。

6. 研究成果発表等の見通し及び今後の研究計画の方向性 (1/2 ページ程度を目安に記入すること)

本プログラムでの研究成果は、2018年12月20日に派遣先であるペンシルバニア大学の機械工学専攻主催のセミナーで招待講演を行った。所属先以外の研究グループからの参加や新しい目線の質問もあり、有意義なセミナーとなった。また、2019年1月30日に九州大学カーボンニュートラル・エネルギー国際研究所で開催される「THERMAL ISSUES FOR HYDROGEN AND NEW REFRIGERANTS FOR ENERGY SYSTEMS」というワークショップにおいて研究発表を行う予定である。

今後の研究計画の方向性は以下のように考えている。

本プログラムでは、当初目的としていたフッ化グラフェンの熱伝導機構の調査には至らなかったが、修飾していないグラフェンと単一の空孔欠陥を有するグラフェンに関しては、EMD法によって熱伝導率を求めたところ、興味深い結果が得られた。この結果は、熱伝導率と欠陥の密度や位置に関するものであり、例えば、グラフェンを熱電材料として応用するために、欠陥を導入して熱伝導率を低下させる技術の開発に役立つと考えている。そこで、今後は、本プログラムを通して得られたグラフェンのEMDシミュレーションに関する知見を活かして、(1)計算セルの大きさは十分かを再確認し、続いて(2)さらに欠陥の配置を変化させたときの熱伝導率の変化を計算し、そして(3)熱キャリアであるフォノンの振動モードに依存した熱伝導機構を調べることで考察を深め、投稿論文や学会発表という形で公表し研究成果を社会に還元したいと考えている。

7. 本プログラムに採用されたことで得られたこと (1/2 ページ程度を目安に記入すること)

まず、実験と理論の共同研究の重要性の再認識が挙げられる。私が日本で所属している研究グループはナノスケールでの伝熱に関して、実験的な研究を主体として研究を進めているが、原子レベルのスケールにおける物理現象の深い理解となると、理論的な研究を並行して進めることが欠かせない。どちらの研究も、研究環境の整備からデータの取得、結果のまとめに至るまで、過去の研究によって蓄積された経験が重要になってくる。本プログラムでは、お互いの経験を持ち寄ることで、より充実した研究がより早くできることを実感した。さらに、本プログラムは国際共同研究となることから、言語や文化のバックグラウンドが異なる研究者と議論をし、研究を進めたが、単に日本人同士で共同研究するよりも、多様なアイデアが出てくるのではないかと感じた。

本プログラムを通して、特に異国の環境で新しい研究を始めたことで、毎日が新しい困難の連続だったが、毎日少しずつでも前進したと捉えることでポジティブな思考をすることが身についたと感じる。また、将来についても、派遣先研究グループのPh.D学生との議論を通して、自分の価値観に従って、より柔軟に考えられるようになった。

派遣先で定期的開催されるセミナーへの参加を通して、多くの研究者と知り合い、議論することができた。将来、共同研究をできたらと思える研究者にも出会えた。