

異方性物質に対する新しい異方的熱伝導率決定法の提案

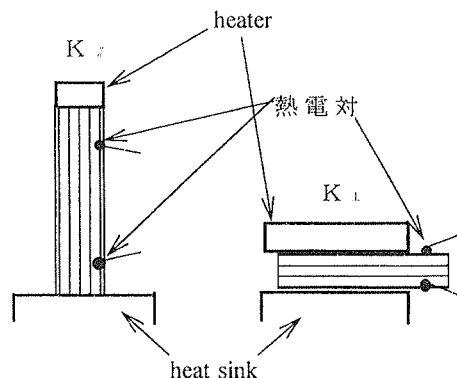
電子材料学講座 池部研究室 野 明彦

1. 序論

酸化物超伝導体単結晶は、CuO₂層に対して平行方向（ab面方向）の熱伝導率Kは良く、面に垂直方向（c軸方向）の場合は熱伝導率が悪い。また、c軸方向に厚い単結晶試料は得られにくく、Kの測定も難しい。そこで、c軸方向の熱伝導率を決定する新しい方法をコンピュータのシミュレーションにより提案する。

2. 導入

十分な厚みの無い異方性物質の試料のK_∥、K_⊥を測定する場合、図1のようなセッティングで温度差を測定し、定常熱流法によりK_∥、K_⊥を算出する。しかし、この測定法ではK_⊥の値は正確に求められてはいないのではないかと考えた。そこで、どのようなセッティングにすれば、より正確なK_⊥を求めることができるのかシミュレーションを行った。



3. 方法

測定容易なK_∥は既知として、K_⊥を求めることを考える。

図1

熱の流出入は3次元であるが、シミュレーションにおいては2次元系として計算を行った。試料の座標の取り方を図2に示す。2次元の熱拡散方程式、(ここでtは時間、Tは温度、cは単位体積当たりの比熱、dは密度、K_x、K_yはそれぞれの方向の熱伝導率、α_x、α_yは熱拡散率とする)

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha_x \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \alpha_y \frac{\partial^2 T}{\partial y^2}, \quad \left(\alpha_x = \frac{K_x}{dc}, \quad \alpha_y = \frac{K_y}{dc} \right)$$

を無次元化処理すると、

$$\frac{\partial T^+}{\partial t^+} = \frac{\partial^2 T^+}{\partial x^{+2}} + \frac{K_y}{K_x} \frac{\partial^2 T^+}{\partial y^{+2}}$$

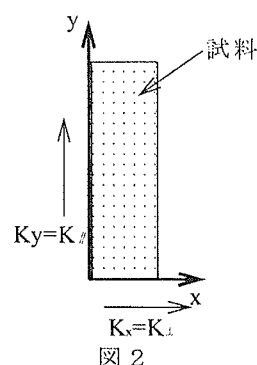
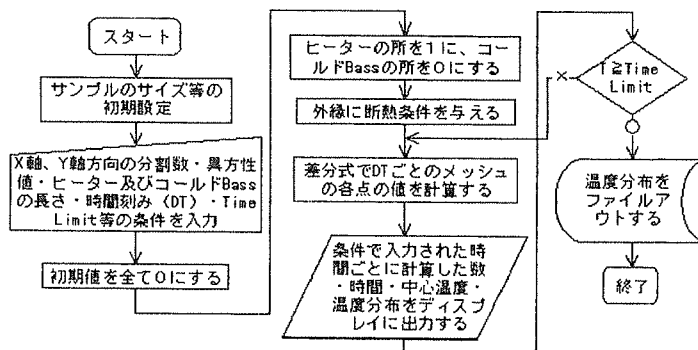


図2

となる。これを基礎方程式とし、前進差分法で差分化したものをシミュレーションプログラムに組み込む。そして、heater位置を変えたり、基礎方程式中のK_y/K_xを色々変えてやり、試料の温度分布を算出する。

その結果から、最適なheaterと熱電対のセッティングを見つける。そのセッティングで既にK_y、K_xが分かっている試料で実験を行い温度勾配を測定する。最後に解析値と実験値を比較し、温度勾配が一致したとき、解析の正しさが証明される。



【シミュレーションに使用したプログラムのフローチャート】

4. シミュレーション

シミュレーションでは、図3に示すような3通りのセッティングを想定した。そして、試料の縦横の長さの比も 7:1、5:1、4:1 の様に変え全部で9つの場合で、異方性比 $A = (K_{\parallel}/K_{\perp})$ を変え、それぞれの温度分布を算出した。なお、シミュレーションでは温度は最高温度が1、最低温度が0として計算した。

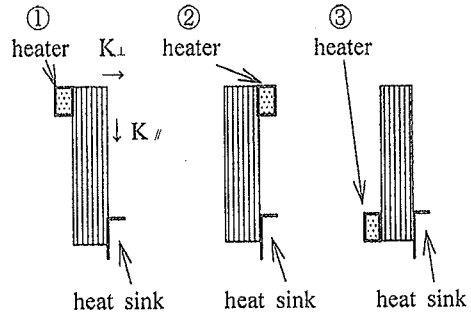


図 3

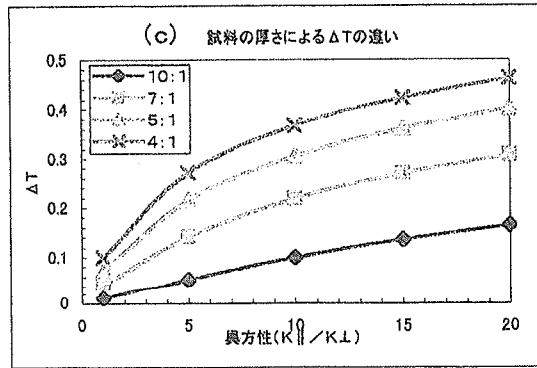
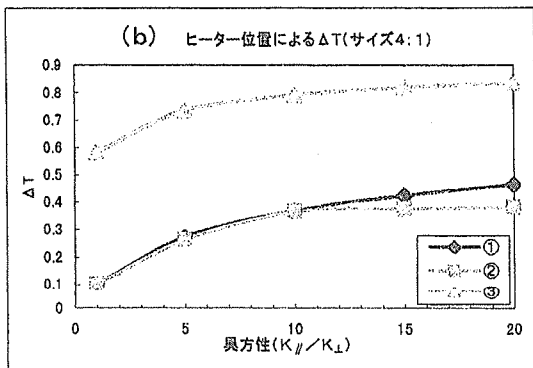
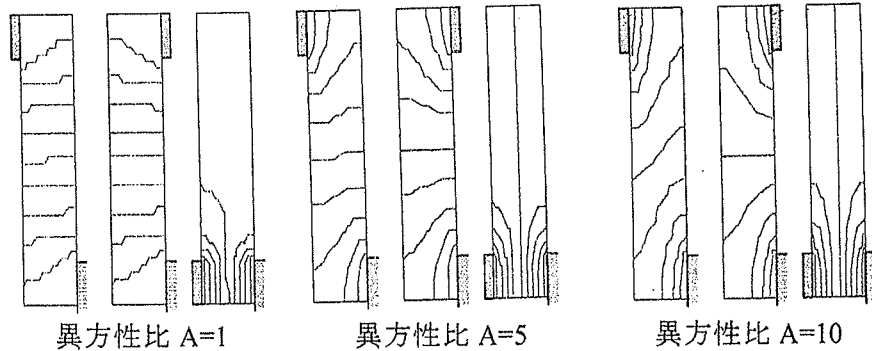
5. 結果

(a)にシミュレーションで得られた温度分布データの一部、異方性比 A 及び heater 位置を変化させた場合の関係を示す。なお、異方性比 A と ΔT の試料の長さによる関係は図4と同じセッティングを想定し、異方性と ΔT の heater 位置による関係は heat sink 寄りに熱電対をセッティングした場合を想定している。

(c)から試料は厚い方が ΔT が大きいことが分かる。(b)から heater 位置は一見、③が最適のように見えるが、温度分布を見ると位置により温度変化が激しく、測定には適していない。よって heater 位置は①が適している。 ΔT は heater と heat sink の中間から対称になっていて、heater 寄りまたは heat sink 寄りが最も ΔT が大きくなっていることが分かった。

(a)

このデータは試料サイズ 5:1 のものである。温度分布は 0.1 ごとに区切っている。



6. 結論

この結果から、図4の様なセッティングにして測定を行えば、縦横の長さの比が 10:1 の試料でも、十分に c 軸方向の熱伝導率を推定できることがシミュレーションにより明らかになった。

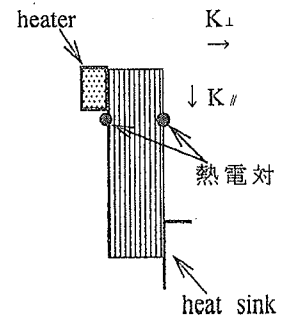


図 4