537 界面ナノ構造が熱抵抗に与える影響に関する分子動力学解析

A MD Study of Effects of Surface nano Structure on Thermal Resistance

○学 井上 浩介・大阪大院

正 芝原 正彦・大阪大

Kosuke INOUE, Osaka University
Masahiko SHIBAHARA, Osaka University

Key Words: Molecular Dynamics, Thermal Resistance, nano Structure

1. 緒言

近年マイクロテクノロジー技術の発達にともなって、微小加工技術やナノ粒子を用いた表面加工技術において数十 nm のスケールの構造や物体を製作することが可能になっている。そこで、本研究では界面に存在するナノスケールの構造物が流体と界面におけるエネルギー伝達に及ぼす影響について解析的に明らかにすることを目的としている。通常、マクロな系においては、固体の接触面には熱抵抗を考慮するが、固体と液体間には熱抵抗は考えない。ところが、近年の研究においてさらに微小な系においては固体と液体間に、固体と固体間と同様の接触熱抵抗が生じることが明らかにされている[1]。そこで、本研究では壁面微細構造物が固液間の接触熱抵抗に与える影響について古典分子動力学法を用いて調べた。

2. 計算方法

図 1 に本研究の計算モデルを示す。本研究ではユニットセルとして $5.6 \times 5.6 \times 5.7 \text{ nm}^3$ の系を用いた。上部境界、下部境界としてそれぞれ 3 層の固体表面を作成し、下部固体層は 350K、上部固体層は 300K で一定になるように温度補正を行なっている。次に、上部と下部の固体表面間に流体層があるとし、この流体層も上下固体壁面の補正温度の中間である 325K を初期条件として与えた。また、水平方向には周期境界条件を課した。流体分子は水分子と同等の特性をもつ Lennard-Jones ポテンシャル分子とし、固体表面と流路内の構造物については鉄分子と同等の特性をもつ Lennard-Jones ポテンシャル分子とした。それぞれのパラメータを表 1 に記す。1.5ns の緩和計算の後、系が平衡状態に達しているとみなして温度勾配、エネルギーの計算を行なった。運動方程式の時間積分には Verlet 法を用いて、時間刻みとしては 5fs を用いた。

また、熱抵抗 R_t の計算については以下の式を用いた[2]。

$$R_t = \frac{\Delta T}{Q}$$

Table 1 Potential parameters

Potential	σ Å	$\varepsilon \times 10^{-21}$ J
Fe-Fe	2.209	40.00
H ₂ O-H ₂ O	2.641	5.585
Fe-H ₂ O	2.415	3.597

Fig.1 Calculation model

Fig.2 Temperature distribution

(b) $\rho = 1.25 \times 10^3 \text{ kg/m}^3$

Fig.2 Temperature distribution

(a) $\rho = 1.0 \times 10^3 \text{ kg/m}^3$

(b) $\rho = 1.25 \times 10^3 \text{ kg/m}^3$

Fig3. Snapshots in equilibrium state under conditions (a) and (b)

Table2 Physical values calculated in the present study

		Q $\text{W/m}^2 \times 10^{10}$	ΔT K	R_t $\text{K} \cdot \text{m}^2 / \text{W} \times 10^{-9}$
(a)	Flat surface	0.531	24	4.52
	Nano structure surface	1.03	25	2.43
(b)	Flat surface	0.591	23	3.89
	Nano structure surface	1.15	20	1.75

ここで、 ΔT は固液界面間の温度ジャンプ、 Q は壁面の温度補正の際に温度補正部へ加えられたエネルギーである。

3. 計算結果

3.1 壁面構造物が系の温度勾配に及ぼす影響

本研究では流路幅一定の条件のもとで系の流体密度をパラメータとして計算を行なった。 $1.0 \times 10^3 \text{ kg/m}^3$ 、 $1.25 \times 10^3 \text{ kg/m}^3$ の2つの条件についての計算結果を示す、図2にそれぞれの

Fig.4 Relationship between density and thermal resistance calculated in the present study

場合における系の温度分布を示す。ここで、(a)は流体密度が $1.0 \times 10^3 \text{ kg/m}^3$ の場合、(b)は $1.25 \times 10^3 \text{ kg/m}^3$ の場合の温度分布である。図2において、グラフの横軸は下壁面表面を0とした系のz方向の長さとなっている。図2より、いずれの場合も高温側壁面と液層間に25K程度の温度ジャンプがあることがわかる。

また、図3に(a),(b)それぞれの場合の流路内の状態を可視化したものを示す。この図より、(a)の場合はフラットな場合、壁面構造物がある場合いずれの場合においても流体層に気泡が生じていることがわかる。(b)の場合は流路内に気泡は確認されなかった。図2において、(a)では界面構造物がある場合よりもフラットな壁面の場合の温度が高く、(b)においてはこれと逆の傾向になっている。(a)においては、界面がフラットな場合は、上壁面付近に気泡が生じており、構造物がある場合には構造物付近に気泡が生じている。構造物がある場合にフラットな場合よりも固液間温度ジャンプが大きくなっているのはこの気泡の存在によって、壁面からのエネルギーの伝達が妨げられたことが原因であると考えられる。

3.2 流体密度が固液間の熱抵抗に及ぼす影響

表2に温度補正の際に加えられたエネルギー Q 、固液間の温度ジャンプ ΔT 、これらの値より求められた熱抵抗 R_t の値を示す。また、図4に流体密度と熱抵抗の関係を示す。表2における(a),(b)は3.1における(a),(b)の場合と同様である。

表2と図4より、固液間の熱抵抗は界面がフラットな場合、壁面構造物がある場合、いずれの場合においても流体密度が大きいほうが熱抵抗は小さくなっている。これは密度が高い条件の方が流体分子の数が多く、高温壁面から低温壁面へとエネルギーが伝わりやすくなるためであると考えられる。また、密度が低い条件ではいずれの場合においても気泡が生じており、この気泡の存在によってエネルギーの伝達が妨げられていることが考えられる。

3.3 壁面構造物が固液間の熱抵抗に及ぼす影響

表2ならびに図4より、流体密度が同じである条件においては壁面がフラットな場合より構造物がある場合の方が熱抵抗の値が小さくなっていることがわかる。表2より、界面構造物がある条件においては、温度ジャンプに大きな差は無いが、壁面がフラットな場合に比べてエネルギー Q の値が増加していることで熱抵抗の値が小さくなっていることがわかる。これは壁面構造物により、伝熱面積が増えたことで、流体層へのエネルギー伝達量が増加したためであると考えられる。

参考文献

- [1]Shigeo MARUYAMA and Tatsuto KIMURA, Thermal Science & Engineering Vol.7(1999).
- [2]伝熱工学, 庄司正弘, 東京大学出版会(1997).