固体表面構造が固液界面の局所熱輸送機構に及ぼす影響

に関するスペクトル解析

Spectral analysis on effects of solid surface structures on mechanism of local heat transport across solid-liquid interface

○学 西 健太郎 (大阪大) 正 藤原 邦夫 (大阪大, JST さきがけ)
正 芝原 正彦 (大阪大)

Kentaro Nishi¹, Kunio Fujiwara^{1,2}, and Masahiko Shibahara¹

¹ Osaka University, 2-1 Yamadaoka, Suita, Osaka 565-0871, Japan

² JST, PRESTO, 4-1-8-Honcho, Kawaguchi, Saitama 332-0012, Japan

Key Words: Molecular Dynamics, Heat Transfer, Solid-liquid Interface, Spectral Heat Flux, Solid Surface Structures

近年のナノスケールデバイスの性能向上のために、固液界面の熱輸送機構への理解が重要となっている。これまでの分子動力学に基づく基礎的な研究では、固体の完全結晶面と液体の界面に関する研究が一般的であったが、最近の研究において結晶面に吸着した固体原子が固液界面熱輸送に影響を及ぼすことが分かっている⁽¹⁾。ただし、その他の表面構造(特に、ステップ、空孔、クラスター)においては詳細な熱輸送機構が明らかになっていない。そこで本研究では粒子の振動特性の観点から、熱流束を周波数成分に分解する熱流スペクトル解析を用いて、固体結晶表面の構造が固液界面の局所熱輸送機構に及ぼす影響をスペクトルの観点から明らかにすることを目的とした。

本研究で用いた計算系を Fig. 1 に示す。2 つの固体壁面間に液体分子が充填された計算系を用いた。液体分子、固体原子には定性的な理解を目的としてそれぞれ Ar, Pt を用いた。計算領域は $(4.708 \times 4.708 \times 8.730 \text{ nm}^3)$ であり、壁面間の距離は 6.00 nm とし、 x, y 方向に周期境界条件を適用した。計算系内の下壁面上に、step, vacancy, cluster, adatom の表面構造となるように Pt 原子を配置し、上下壁面の最も外側の1層を固定層とし Langevin 法を用いることで上壁面、下壁面をそれぞれ $130, 70 \text{ K}$ に温度制御した。粒子間のポテンシャル関数には 12-6 Lennard-Jones ポテンシャルを用いた。計算手順は、まず 0.5 ns 間速度スケールリング法を用いて液体に温度制御を行う。それ以降は液体に温度制御を行わず、 0.5 ns 間緩和計算を行う。その後、 10 ns 間計算を行い、局所領域を通過する熱流束及び熱流束のスペクトル、固液界面熱抵抗を計算した。熱流スペクトルの算出には先行研究の方法⁽²⁾を用い固液界面の局所領域に着目して行った。

結果の一例として、Fig. 2 に各表面構造における、液体分子から表面構造端部に流れる熱流スペクトル $q(\omega)$ を示す。表面構造の形状によって熱輸送を行う周波数の寄与の分布が異なり、空孔では $2\sim4 \text{ THz}$ 付近のピークが存在するが、ステップ、クラスター、吸着原子の順にピークの帯域が狭まり 2 THz 付近のピークが顕著になることが分かった。

Fig. 1 Calculation model.

Fig. 2 Spectral heat flux.

参考文献

- (1) K. Fujiwara, et al, Sci. Rep. 9, (2019), 13202.
- (2) K. Sääkklähti, et al., Phys. Rev. E, 93(5), (2016), 052141.