

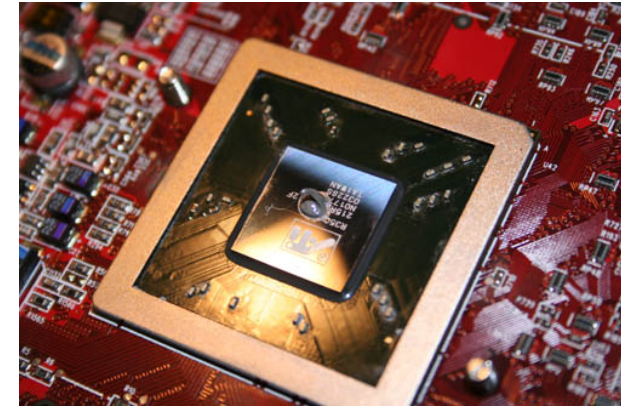
Heat transfer mechanism at interfaces

Donatas SURBLYS, 助教
分子熱流動研究分野 (小原研究室)

背景

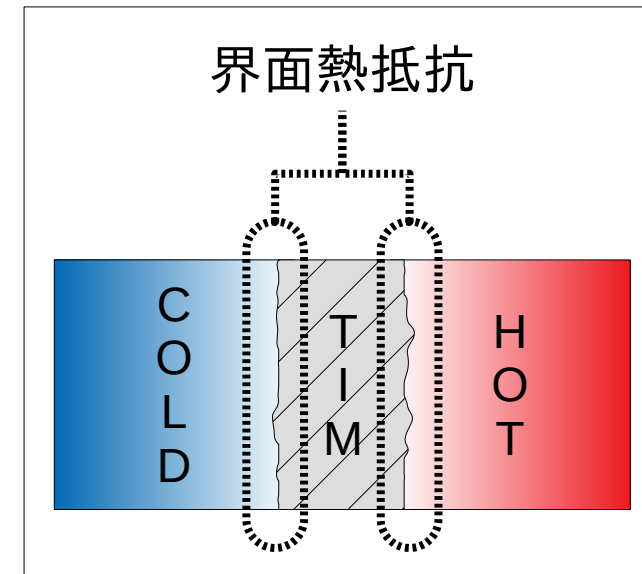
- 電子デバイスの小型化によって、効率的な熱散逸が課題となっている。
 - CPU, GPU, パワーモジュールなど.
- 微小サイズのため、界面効果が大きい.
- 固体間の真実接触面積を増やすため、よく熱界面材 (Thermal interface material; TIM) が使われる。
 - 固体-TIMの界面熱抵抗を下げることによって更なる性能の向上が期待される.

Thermal grease on GPU*:



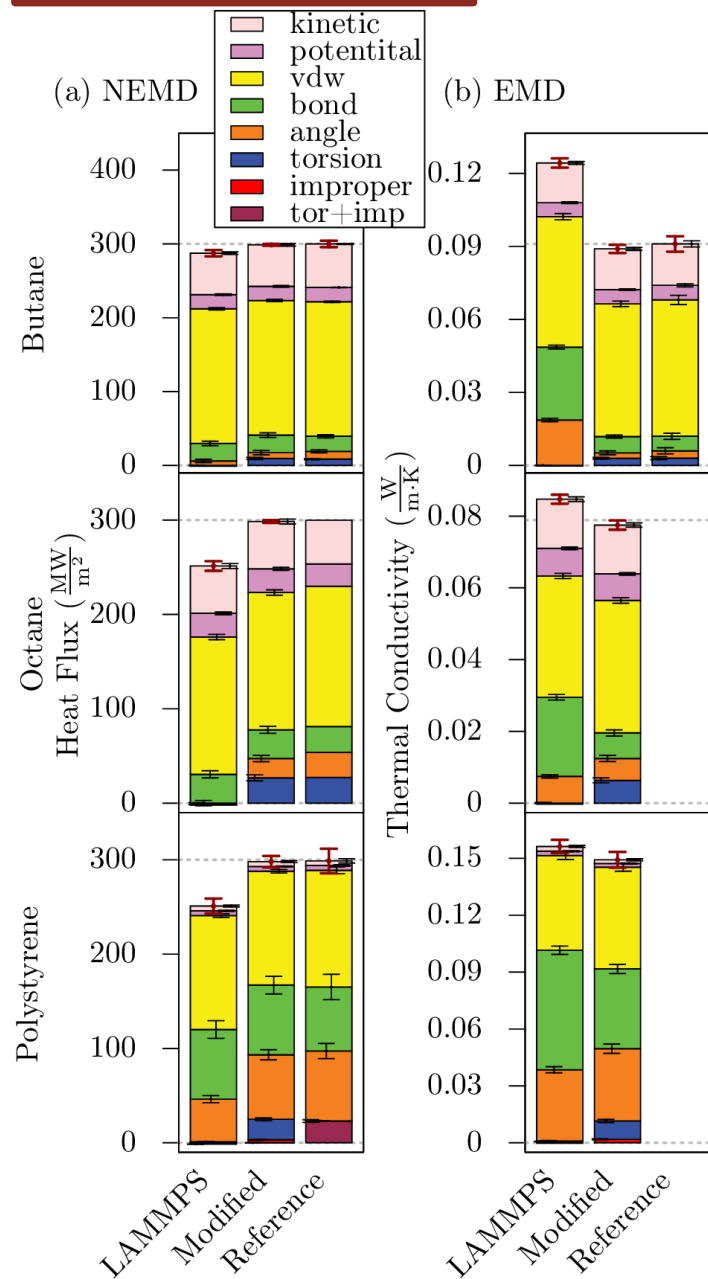
目的

- 分子動力学法 (Molecular Dynamics; MD) によって界面の熱輸送メカニズムを解明.
- 効率的な冷却を可能とする界面修飾や界面越材の提案.



*<https://en.wikipedia.org/wiki/File:Thermalgrease.jpg>

Confidential



現 体積 V に於ける平均熱流束は各原子の速度,
 状 エネルギーと応力テンソルから簡潔に見積もれる

・
 課題

$$\vec{J} \approx \frac{1}{V} \left\langle \sum_{i \in V} \vec{v}_i e_i - \sum_{i \in V} \sigma_i \cdot \vec{v}_i \right\rangle$$

原子
エネルギー

原子
速度

原子応力
テンソル

LAMMPS 分子動力学シミュレーションソフト (MD
 ソフト) などで使われる原子応力定義ではアングル
 などの多体相互作用の場合、厳密解と大きくずれる

目的：厳密解とよく合う様に、新たな原子応力
 テンソルを定義する

結果：新たな原子応力テンソルの定義による結果は
 厳密解とよく一致し、汎用 MD ソフトによる熱輸送
 特性解析が可能となった。

実装： LAMMPS の開発者との協議によりが本手法は
 「centroid/stress/atom」と命名され、一般公開ベ
 ジョンに取り入れられた。

https://lammps.sandia.gov/doc/compute_stress_atom.html

界面での熱流速スペクトル解析

- 固体の伝熱解析で広く使われる VDOS は液相と液相との界面には適用が困難
- 近年、熱流速スペクトル解析法が台頭してきた。

力と速度の相互相関関数

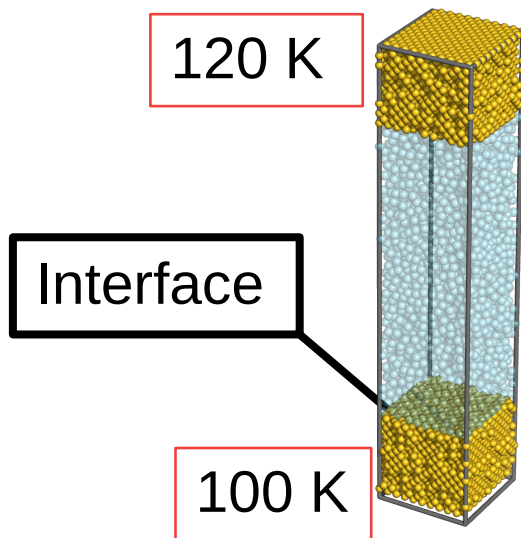
$$K(\tau) = \frac{1}{2A} \left\langle \sum_i \sum_{j \neq i} \frac{z_{ij}(\tau)}{|z_{ij}(\tau)|} \left(\vec{F}_{ij}(\tau) \cdot \vec{v}_i(0) \right) \right\rangle$$

そのフーリエ変換は
熱流速スペクトルに相当

$$\langle J \rangle = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \Re \left[\tilde{K}(\omega) \right] d\omega$$

- 物理的解釈や有効適応範囲などの課題が残っており、それらが解決できれば有効な解析手法となり得る。

- 単原子分子系の界面における熱流速スペクトル



本来、熱流速に影響しない虚数部が強く突出

