

ナノスケール・サーマルマネジメント基盤技術の創出
2017 年度採択研究代表者

2021 年度 年次報告書

小原 拓

東北大学 流体科学研究所
教授

分子界面修飾とナノ熱界面材料による固体接合界面熱抵抗低減

§ 1. 研究成果の概要

パワー半導体など高密度発熱体からの大量の熱を効率的に輸送するため、微細な積層構造で熱の流れを阻害する界面熱抵抗を低減することが求められている。本研究は、固体層表面を特殊な分子で修飾する、固体表面間を分子で接合する、固体表面間にナノ物質層を介在密着させる(熱界面材料=TIM)などの技術により、固体層間に強力な熱的接続を形成するための学理を確立するものである。

2021年度は、SAM(自己組織化単分子膜)による固体表面改質の研究を進め、各種末端をもつPEG(ポリエチレングリコール)鎖SAMなどについて、その構造や水との間の界面熱抵抗をMD(分子動力学)シミュレーションにより解析した。また、界面活性剤の固体表面への吸着について、固液分子の振動モード適合の効果を基本的なモデルを用いて解析した。

異方性熱伝導率の制御など機能性に優れたTIM材料を模索する一環としてLbL(交互累積膜)による多層構造膜のMD解析を前年までに行ったが、PAA/PEIによるLbLを実験的に創成し、その熱伝導率をTDTR法により計測した。また、金属ナノワイヤ垂直配向型TIMなど、特色あるTIMの創製を進めている。TIMの究極とも言える固体表面の分子接合について、硫黄原子を両端にもつアルカン鎖(ジチオール)による接合面のMD解析を行い、面圧力と熱コンダクタンスとの関係など、特性を明らかにした。

SAM表面と液体との親和性や固気液界面のピンニング力をMDシミュレーションにより解析した。また、固体表面の性状と残留気泡の関係や気泡量と接触熱抵抗の相関などを実験により解明した。

実界面スケールで様々な現象が複合して発現する現象について、ロックインサーモグラフィ法による熱抵抗計測法を確立し、断面計測においては三層試料の接触熱抵抗の測定が可能となった。また、表面加熱-裏面検知による界面熱抵抗面分布計測が高分解能で可能となった。

§ 2. 研究実施体制

(1) 小原グループ

- ① 研究代表者: 小原 拓 (東北大学 流体科学研究所 教授)
- ② 研究項目
 - ・固液界面熱輸送特性の解析
 - ・各種材料の TIM 適用性検討

(2) 菊川グループ

- ① 主たる共同研究者: 菊川 豪太 (東北大学 流体科学研究所 准教授)
- ② 研究項目
 - ・有機分子修飾界面における熱輸送特性のナノスケール解析
 - ・ソフトな固液界面における界面親和性の分子論的解析

(3) 佐藤グループ

- ① 主たる共同研究者: 佐藤 正秀 (宇都宮大学 工学部基盤工学科 教授)
- ② 研究項目
 - ・SAM 修飾表面の構築と高充填性分子接合表面創製プロセス構築への基礎的研究
 - ・ナノ材料分散型ソフトマター系熱界面材料と創製法の探索

(4) 八木グループ

- ① 主たる共同研究者: 八木 貴志
(産業技術総合研究所 物質計測標準研究部門 グループ長)
- ② 研究項目
 - ・界面熱抵抗計測技術の開発
 - ・分子修飾層等による固液界面の熱抵抗の評価
 - ・フォノン熱輸送計算技術の開発

(5) 元祐グループ

- ① 主たる共同研究者: 元祐 昌廣 (東京理科大学 工学部 准教授)
- ② 研究項目
 - ・TIM 内温度分布、液膜厚さ分布の同時測定法の開発
 - ・固体表面上の残留気泡面積と表面粗さの関係の計測

(6) 長野グループ

- ① 主たる共同研究者: 長野 方星 (名古屋大学 大学院工学研究科 教授)
- ② 研究項目
 - ・微視的スケールにおける局所的界面熱抵抗の計測手法および分布評価法の開発
 - ・実在接触界面における熱抵抗因子を考慮した界面熱抵抗のモデル化

【代表的な原著論文情報】

- 1) Puneet Jain and Masahiro Motosuke, “Temperature sensitivity of BODIPY dye (pyrromethene 597) over different linear organic solvents”, Japanese Journal of Applied Physics, Vol. 61 (2022), 056504, DOI: 10.35848/1347-4065/ac5fc9.
- 2) Hiroki Matsubara, Donatas Surblys, Yunhao Bao, and Taku Ohara, “Molecular dynamics study on vibration-mode matching in surfactant-mediated thermal transport at solid-liquid interfaces”, Journal of Molecular Liquids, Vol. 347 (2022), 118363. DOI:10.1016/j.molliq.2021.118363.
- 3) Yuting Guo, Donatas Surblys, Hiroki Matsubara, and Taku Ohara, “A molecular dynamics study of the effect of functional Groups and side chain on adsorption of alcoholic surfactant and interfacial thermal transport”, Journal of Molecular Liquids, Vol. 335 (2021), 116243, DOI: 10.1016/j.molliq.2021.116243
- 4) Hiroki Matsubara and Taku Ohara, “Effect of the in-plane aspect ratio of a graphene filler on anisotropic heat conduction in paraffin/graphene composites”, Physical Chemistry Chemical Physics, Vol. 23 (2021), pp. 12082-12092. DOI:10.1039/D1CP00556A.
- 5) Donatas Surblys, Hiroki Matsubara, Gota Kikugawa, and Taku Ohara, “Methodology and meaning of computing heat flux via atomic stress in systems with constraint dynamics”, Journal of Applied Physics, Vol. 130 (2021), 215104, DOI: 10.1063/5.0070930.