

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

2020 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。

2020年度は、これまでに開発した試料作成・実験計測・計算解析法を適用し、界面熱輸送特性の解明を進めた。まず、固体表面の分子修飾が固液界面熱抵抗に与える影響について、親水性SAM(自己組織化単分子層)で修飾した固体表面試料を作成し、水との間の固液界面熱抵抗をTDTR(時間領域サーモフレクタンス)法で計測すると共に、MDS(分子動力学シミュレーション)により整合的な結果を得た。さらにMDSでは、SAM内部の熱流束に対するスペクトル分解等の解析を行い、SAM分子の設計を目指した研究を進めている。また、より動的な界面修飾として、液体に添加した界面活性剤の吸着による界面熱抵抗の低減効果をMDSにより解析し、一端が界面に吸着した長鎖界面活性剤分子が他端を液体中に伸ばして熱輸送を行う伝熱効果を明らかにした。

固体-TIM間の親和性が界面熱抵抗に及ぼす影響を解析するため、SAM修飾表面における残留気泡量を計測すると共に、親和性と熱抵抗の相関を評価するための研究を進めている。

実在界面スケールの熱抵抗は、以上の全ての要素が重畳して発現するが、その線分布をロックインサーモグラフィによりマイクロスケールで計測する技術を確立し、また、面分布計測の可能性を見出した。

フォノン熱輸送の実測を目標とする超高速TDTR装置とTDTRシミュレータの開発、LbL(交互累積膜)やグラフェン懸濁TIMなどの試料創製とMDS解析などについても成果を得た。

§ 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 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) Leton C. Saha and Gota Kikugawa, “Heat conduction performance over a poly (ethylene glycol) self-assembled monolayer/water interface: A molecular dynamics study”, *Journal of Physical Chemistry B*, Vol. 125 (2021), pp. 1896–1905, DOI: 10.1021/acs.jpcc.0c09385.
- 2) Takuya Ishizaki, Taichi Igami, and Hosei Nagano, “Measurement of local thermal contact resistance with a periodic heating method using microscale lock-in thermography”, *Review of Scientific Instruments*, Vol. 91 (2020), 64901, DOI: 10.1063/1.5130937.
- 3) Yoshiaki Kawagoe, Donatas Surblys, Hiroki Matsubara, Gota Kikugawa, and Taku Ohara, “Cross-plane and in-plane heat conductions in layer-by-layer membrane: Molecular dynamics study”, *Langmuir*, Vol. 36 (2020), pp. 6482–6493, DOI: 10.1021/acs.langmuir.0c00845.
- 4) Yuting Guo, Donatas Surblys, Hiroki Matsubara, Yoshiaki Kawagoe, and Taku Ohara, “Molecular dynamics study on the effect of long-chain surfactant adsorption on interfacial heat transfer between a polymer liquid and silica surface”, *Journal of Physical Chemistry C*, Vol. 124 (2020), pp. 27558–27570, DOI: 10.1021/acs.jpcc.0c08940.
- 5) 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 polymer surfactant and interfacial thermal transport”, *Journal of Molecular Liquids*, Vol. 335 (2021), 116243, DOI: 10.1016/j.molliq.2021.116243.
- 6) Hiroki Matsubara, Gota Kikugawa, and Taku Ohara, “Comparison of molecular heat transfer mechanisms between water and ammonia in the liquid states”, *International Journal of Thermal Sciences*, Vol. 161 (2021), 106762, DOI: 10.1016/j.ijthermalsci.2020.106762.
- 7) Hiroki Matsubara and Taku Ohara, “Effect of in-plane aspect ratio of graphene filler on anisotropic heat conduction in paraffin/graphene composite”, *Physical Chemistry Chemical Physics*, Vol. 23 (2021), 12082, DOI: 10.1039/d1cp00556a.