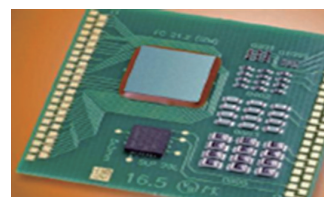


封止材開発への応用に向けた ソフトマテリアルの熱伝導率シミュレーション

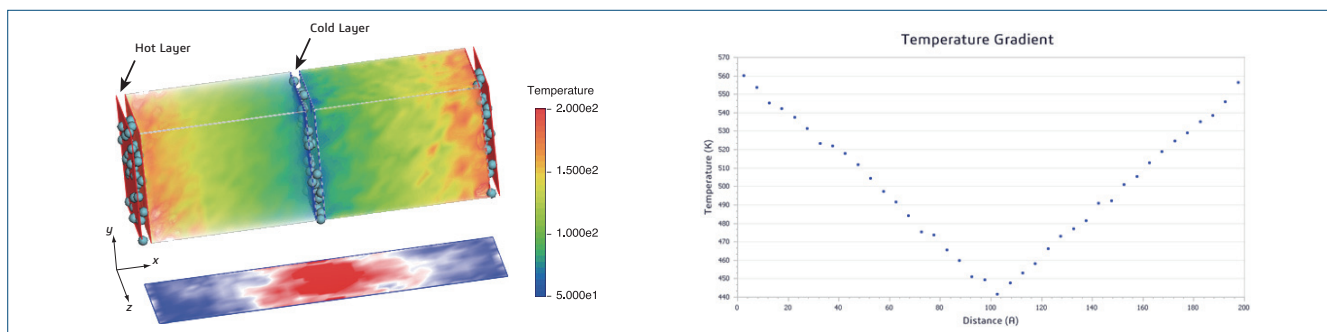
背景

携帯電話やパソコンなどに使用される半導体・電子部品の小型化および集積化に伴う発熱密度の上昇を抑え、熱収支を向上させるために、新規の高機能な封止材開発がますます重要になってきています。デバイスの放熱を向上させる上で重要な物性は熱伝導率ですが、熱伝導率と材料の組成の相関を実験的に議論することは難しいのが現状です。そこで、原子・分子レベルでのシミュレーションを活用することで、材料開発の指針を得ることができます。

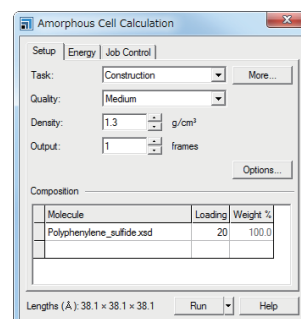


理論

ソフトマテリアルの熱伝導率は、非平衡分子動力学法に基づいて計算することができます。この方法では、3次元周期境界条件を課したユニットセルをある格子軸に対して平行に分割し、分子動力学シミュレーションを行いながら決められた時間間隔で、分割されたユニットセルの端と中央の領域で運動エネルギーを交換することで、エネルギー流束を与えます。エネルギーを交換する方法として、2つの方法が提案されており、1つは常に一定のエネルギーを交換する方法で[1]、もう1つは、エネルギーを交換する層において、運動エネルギーが最大・最小の粒子同士の運動エネルギーを交換する方法です[2]。エネルギー交換の前後では、系の運動量とエネルギーが保存されます。系に生じたエネルギー流束に対する応答として温度勾配が生じ、その応答係数として熱伝導率が定義されます。



密度0.2652 g/cc、温度500 Kで計算したアルゴンガスの平均温度の3次元分布とx軸に対する温度勾配。2つの赤と青の平面で挟まれた領域(Hot LayerとCold Layer)にある粒子同士で運動エネルギーを交換します。計算された熱伝導率の値は0.0337 W/m/Kで、実験値は0.0352 W/m/Kであることが知られています。ユニットセルの下に示したのは、系の局所密度の投影図で、温度勾配に対して密度が減少していることが分かります。



Amorphous CellモジュールのGUI。
ポリマーの二面角を自動的に変化させてアモルファス構造を作成できます。

シミュレーションのワークフロー

分子構造作成

- 材料の構成要素となる分子モデルをスケッチします
- ポリマー構造はリピートユニットから作成します

Visualizer

アモルファス構造作成

- 分子構造を元にアモルファス構造を作成します
- 密度や組成を変更できます

Amorphous Cell

構造の平衡化

- 分子動力学計算の前に構造最適化を行います
- 温度を指定して分子動力学計算を実行し平衡化を行います

Forcite Plus

熱伝導率計算

- 非平衡分子動力学計算を実行して熱伝導率の計算を行います

MaterialsScript & Forcite Plus

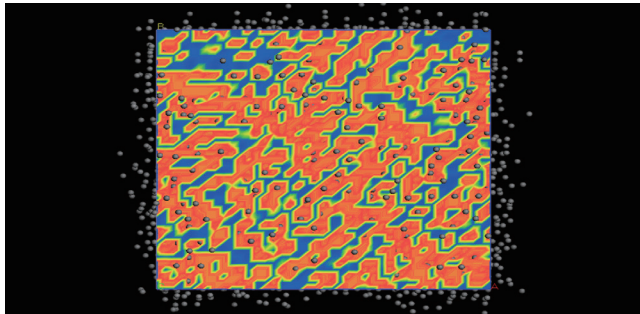
以下は、熱伝導率シミュレーションのワークフローです。大きく分けて、4つのステップからなり、全ての処理をMaterials Studio上で行うことができます。

計算事例

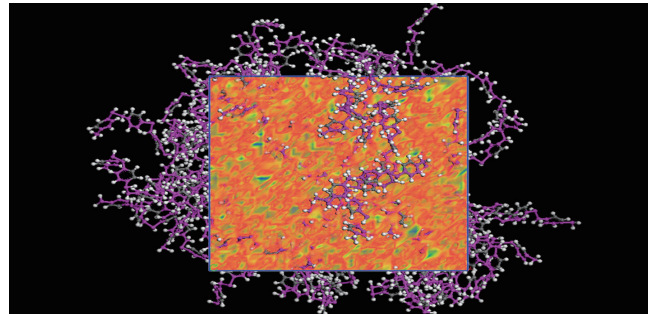
この手法を使った計算事例として、フルオログラフェン(FG)の熱伝導率を計算した事例があります[3]。この事例では、FGを様々な形状および割合でフッ素化させたときの、熱伝導率の変化について計算しています。

また、樹脂中にサイズの異なるグラファイトのナノ粒子を混ぜることで、どのように樹脂基材の熱伝導率が変化するかを調査しました。様々なサイズのナノ粒子を樹脂と混合した際の熱伝導率の計算を行った結果、熱伝導率は125 W/m/Kとなりました。実験値は150 W/m/Kであることが報告されており、実験値に近い値が得られています。また、樹脂基材の熱伝導率が、混合するグラファイトのナノ粒子のサイズによらず、数倍に向上することが分かりました。

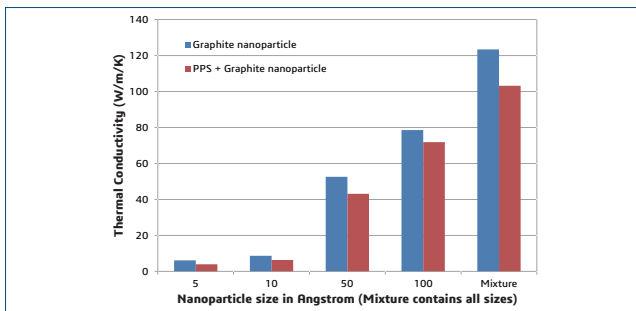
表1はさまざまな材料の熱伝導率の計算値と実験値です。計算値は実験値と良く一致しています。



グラファイトナノ粒子(粒子サイズ ~ 5 Angstrom)のユニットセルの断面上での温度分布。熱伝導率の計算値は6.01 W/m/Kで、実験値は~10W/m/Kです。



ポリフェニレンサルファイドのユニットセルの断面上での温度分布。熱伝導率の計算値は0.352 W/m/Kで、実験値は0.266 W/m/Kです。



グラファイトナノ粒子のサイズを変えた時のナノ粒子単体および樹脂との混合物の熱伝導率。Mixtureはすべてのサイズのナノ粒子を混合した計算を表します。

	T (K)	Thermal Conductivity (W/m/K)	
		Calc.	Expt.
Water	318	0.7	0.640
Freon	550	0.096	0.069
Butane	318	0.138	0.137
Butene	150	0.17	0.192
Argon	500	0.0337	0.035
Polypropylene (Atactic)	298	0.2124	0.175
Polypropylene (Isotactic)	298	0.2125	0.233

表1: 様々な材料の熱伝導率の計算値と実験値。

まとめ

- 非平衡分子動力学計算による方法では、系の組成や形態が熱伝導率に与える影響をナノスケールで解析できます。
- Materials Studioを使うと、初期構造の作成から熱伝導率の計算までを使いやすいGUIから簡単に実行することができます。
- Materials StudioをPipeline PilotやMaterialsScriptと組み合わせることで、材料の組成を変えながら、ハイスループット・スクリーニングを行い、目的とする物性値を示す材料の組成の候補を絞り込み、その候補から実験的に検証を行う材料の指針を得ることができます。

参考文献

[1] P. Jund and R. Jullien, Phys. Rev. B 59, 13707 (1999). [2] F. Müller-Plathe, J. Chem. Phys. 106, 6082 (1997). [3] W. Huang et al., Chem. Phys. Lett. 552, 97 (2012).

ダッソー・システムズの3Dエクスペリエンス・プラットフォームでは、12の業界を対象に各ブランド製品を強力に統合し、各業界で必要とされるさまざまなインダストリー・ソリューション・エクスペリエンスを提供しています。

ダッソー・システムズは、3Dエクスペリエンス企業として、企業や個人にバーチャル・ユニバースを提供することで、持続可能なイノベーションを提唱します。世界をリードするダッソー・システムズのソリューション群は製品設計、生産、保守に変革をもたらしています。ダッソー・システムズのコラボレーティブ・ソリューションはソーシャル・イノベーションを促進し、現実世界をより良いものとするためにバーチャル世界の可能性を押し広げています。ダッソー・システムズ・グループは140カ国以上、あらゆる規模、業種の約19万社のお客様に価値を提供しています。より詳細な情報は、www.3ds.com (英語)、www.3ds.com/ja (日本語) をご参照ください。

