



Title	Evaluation and Prediction of Interfacial Thermal Resistance between Water and Nanostructure Surfaces using Molecular Dynamics Method and Thermal Circuit Model
Author(s)	江, 志文
Citation	大阪大学, 2025, 博士論文
Version Type	VoR
URL	https://doi.org/10.18910/101646
rights	
Note	

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

The University of Osaka

Abstract of Thesis

Name (江志文)	
Title	Evaluation and Prediction of Interfacial Thermal Resistance between Water and Nanostructure Surfaces using Molecular Dynamics Method and Thermal Circuit Model (分子動力学法と熱回路モデルを用いた水とナノ構造表面間の熱抵抗の評価と予測)
<p>Abstract of Thesis</p> <p>With the development of microelectronic devices and the miniaturization of energy systems, thermal management at the nanoscale has become increasingly important. For instance, reducing the interfacial thermal resistances (ITRs) can prevent devices from overheating, whereas increasing the ITRs enables microdevices to maintain stable operation under extreme temperature conditions.</p> <p>The solid-liquid (S-L) ITR is a critical factor influencing nanoscale heat transfer processes. The S-L ITRs of flat surfaces primarily depend on factors such as wettability and liquid pressure in the experimental and molecular dynamics (MD) studies. The S-L ITRs of flat surfaces can be measured using both experimental and MD methods. However, it is important to explore the relationship between the S-L ITRs of flat surfaces and those of nanostructure surfaces, which would facilitate the design of heat transfer in nanostructure surfaces by enabling the evaluation and prediction of the S-L ITRs, thereby reducing the computational and experimental costs of MD simulations and experiments for nanostructure surfaces.</p> <p>The objectives of the present study are to evaluate the ITRs of nanostructure surfaces using MD simulations, to predict the ITRs of nanostructure surfaces through thermal circuit models (TCMs), and to assess the feasibility of employing the coarse-grained (CG) water model as a replacement for the simple point charge/extension (SPC/E) water model in the fields of ITR evaluation based on MD simulations and TCMs.</p> <p>To evaluate and predict the S-L ITRs of nanostructure surfaces, the relationship between the S-L ITR and the density depletion length (DDL) on nanostructure surfaces was investigated using the CG and SPC/E models in copper (Cu)-water and Cu-graphene-water systems, employing non-equilibrium MD simulations; Six TCMs were proposed to predict the ITRs of nanostructure surfaces. The TCMs A and B were established under the assumption that there was no energy transfer between water and the nanopillar sidewalls; the TCMs C and D assumed that heat transfer between the water and the solid walls occurred under analogous temperatures of the nanopillar sidewalls and groove bottom surfaces; the TCMs E and F were analogous to TCMs C and D, considering the temperature difference of the nanopillar sidewalls from that of the groove bottom surfaces. TCMs A, C, and E utilized the thermal conductivities of solids and liquids calculated from MD simulations, while other TCMs employed experimental and empirical thermal conductivities.</p> <p>The findings obtained in this dissertation are summarized as follows. The ITRs between the groove bottom surface and water near the top nanopillar surface could be correlated with the DDL. The DDL could effectively be related to variations in S-L ITRs, even on nanostructure surfaces, including the Wenzel and Cassie-Baxter states. Regardless of water models, the DDL depended on water pressure, surface wettability, and surface roughness. The TCMs C to F could reasonably predict the ITRs in the Wenzel state on nanostructure surfaces, especially the TCMs E and F show good performance in predicting ITRs of nanostructure surfaces. Considering the energy transfer between the nanopillar sidewalls and water, the TCMs C to F could also approximately predict the ITRs of nanostructure surfaces in the Cassie-Baxter state. Regarding the influence of water molecular models, the CG model could replace the SPC/E water model for the qualitative evaluation of S-L ITRs. The composite surface slightly weakened the accuracy of TCM predictions in the Wenzel and Cassie-Baxter states because the graphene coating affected the distribution of the energy exchange ratio between the nanopillar sidewalls and the liquid. The ITR of flat surfaces can be used to evaluate and predict the ITRs of nanostructure surfaces through the proposed TCMs, providing thermal design and safety guidance for heat transfer and heat dissipation at the interfaces between nano and micro-devices, thus saving experimental and computational costs substantially.</p>	

論文審査の結果の要旨及び担当者

氏名 (江志文)	
	(職)
論文審査担当者	主査 教授
	副査 教授
	副査 教授
	副査 准教授
	氏名
	芝原 正彦
	赤松 史光
	津島 将司
	藤原 邦夫

論文審査の結果の要旨

電子デバイスの高集積化やエネルギー・システムの小型化に伴い発熱密度が上昇するため、それらの機器を適正温度以下に維持して運用するための放熱促進技術が重要となっている。その対応策として、デバイスとヒートシンク間の接触熱抵抗の低減を目的とした熱伝導材料(TIM, 高粘度液体等)の利用や直接的な液冷法などが検討されている。一方で、デバイスの表面と TIM 間の界面熱抵抗や、デバイスと冷却媒体液の間の界面熱抵抗については、その大きさを予測する工学モデルがこれまで存在しておらず、経験や実測に基づいて利用されている。デバイスのサイズが小さくなるにしたがって、放熱に対する界面熱抵抗の寄与が相対的に大きくなることが知られている。特に、ナノ・マイクロメートルスケールのデバイスの放熱においては界面熱抵抗が支配的になるため、その予測と制御が重要となる。このような背景から、さまざまな発熱する機器における固液界面熱抵抗を予測する工学モデルや固液界面熱抵抗を低減する方法の提案が渴望されている。

本論文では、ヒートパイプなどの熱デバイスにおいて一般的に用いられている水と銅の界面ならびに水とグラフェンコーティングを施した銅との界面を想定し、放熱促進を目的として表面にナノメートルスケールの矩形スリット構造(以下、ナノ構造と称する)を設けた場合の界面熱抵抗の変化について分子動力学シミュレーションを用いて明らかにしている。さらに、その界面熱抵抗の大きさを予測する工学モデルを提案することを目的として実施した研究内容についても本論文に含められている。主な研究成果は以下の通りである。

1. ナノ構造を有する表面と水との間の界面熱抵抗について、(1) ナノ構造を有する基板の直上に厚みを有しない界面を定義する場合、(2) ナノ構造と同等の厚みを有する界面を定義する場合、の 2 つの定義に対して、非平衡分子動力学シミュレーションを用いて界面熱抵抗をそれぞれ算出し、既存の実験・解析研究と同等のオーダーを示すことを確認している。さらに、水圧、表面の濡れ性、ナノ構造サイズ、水分子モデルの変化に対して、(1) と (2) の定義による界面熱抵抗がそれぞれどのように変化するかを明らかにしている。また、界面熱抵抗に対する水圧、表面の濡れ性、ナノ構造サイズの影響は、先述の 2 つの定義や水分子モデルには大きくは依存せず、定性的に同様であることを示している。

2. 巨視的な熱工学において広く用いられている熱回路網法を、ナノ構造を有する界面と水との間の界面熱抵抗の予測に適用して、簡易的な界面熱抵抗予測モデルを提案している。この予測モデルにおいて、完全結晶面と水との間の界面熱抵抗変化の圧力依存性を与えて、ナノ構造中の温度分布とナノ構造側面からの熱輸送を考慮すれば、簡易的な熱回路網モデルであっても高精度で界面熱抵抗を予測可能であることを示している。また、ナノ構造を有する界面の熱抵抗予測には、不完全な濡れ状態であってもナノ構造側面からの熱輸送を考慮することが重要であること、ナノ構造と基板が同一温度であるという仮定がよい近似として成立することを示すとともに、ナノ構造自体の熱抵抗やナノ構造間に存

在する水の熱抵抗の大きさの影響は小さいことも示している。

3. ナノ構造を有する表面と水との間の密度欠損長さ (Density Depletion Length: DDL) と界面熱抵抗の関係を調べて、既存研究において示された完全結晶面における DDL と界面熱抵抗の関係を 1 つの指数関数によって近似することができないことを示している。また、この関係の記述のために、ナノ構造を有する表面が完全に濡れた状態と濡れが不完全な状態の 2 つに分けて、それぞれを別の指数関数で近似することを提案している。

4. グラフェンコーティングされた銅表面において、水との間の界面熱抵抗を計算し、本論文で提案する熱回路網法による予測モデルの一般性を確認している。その結果により、グラフェンコーティングを施されたナノ構造面において、界面熱抵抗の予測精度は低下するが、水圧、表面の濡れ性、ナノ構造サイズの変化による定性的な影響は予測可能であることを示している。

5. 水分子モデルが固液界面熱抵抗の計算結果に及ぼす影響を調べて、水圧、表面の濡れ性、構造サイズの影響を定性的に予測する場合には、クーロン力と分子構造を考慮した剛体モデルの代替として粗視化した水分子モデルを使用することが可能であることを示している。

以上のように、本論文は電子デバイスなどの放熱設計の際に重要となる固液界面熱抵抗について、水と銅界面を想定し、放熱促進を目的としてナノメートルスケールの矩形構造を設置した場合の影響について分子動力学シミュレーションを用いて明らかにしている。また、完全結晶面における固液界面熱抵抗の圧力依存性を用いた熱回路網法による簡易な界面熱抵抗予測モデルを提案している。また、密度欠損長さ (DDL) とナノ構造面の界面熱抵抗の関係に関する完全結晶面の場合との相違点や粗視化水分子モデルの界面熱抵抗計算への適用性についても示している。さらに、本論文で用いた熱回路網法によるナノ構造面の界面熱抵抗予測モデルの作成手順や評価方法は、液体分子や固体材質が異なる場合にも適用可能であることから、ナノ構造を用いた界面熱抵抗低減の効果を予測する際に本論文の研究成果を利用することが可能と考えられる。よって本論文は博士論文として価値あるものと認める。