

高分子の熱伝導性に関する分子動力学計算

○鴫崎晋也¹、信時英治¹

早川晃鏡²、前田利菜²、柿本雅明²

¹三菱電機先端総研（〒661-8661 尼崎市塚口本町 8-1-1）

²東工大院理工（〒152-8552 目黒区大岡山 2-12-1-S8-26）

【序論】近年、モータ、自動車用インバータ、家電製品、LED照明やコンピュータ周辺機器等など、様々な電子機器の小型化と高性能化に伴い、電子部品から発生する熱を逃がす放熱性が大きな問題になっており、放熱効果の高い絶縁性ポリマー材料が求められている。絶縁性ポリマーの熱伝導性はフォノンが担うため、ポリマー構造の秩序性に大きく依存する。一般にポリマーは複雑な分子構造を有するため、ポリマー材料の熱伝導率を分子レベルで解明することは容易でない。本研究ではポリマー構造の秩序性と熱伝導率の関係を明らかにするために、平衡分子動力学法に基づく熱伝導率シミュレーション手法の開発を行った。

【計算方法】熱伝導率の平衡分子動力学シミュレーションは熱平衡系で熱流束の揺らぎを計算し、揺動散逸定理に基づき熱流束の自己相関関数から熱伝導率を算出する。複雑な構造を有するポリマーでは振動状態が複雑なため熱伝導率評価に不可欠な低周波数フォノン（音響フォノン）の自己相関関数を定量的に計算できないという問題があった。

我々は、熱伝導を担う音響フォノンだけを自己相関関数から選択的に抽出することにより、ポリマーの熱伝導率を定量的に計算できる分子シミュレーション技術を開発した。

【結果と考察】開発した分子動力学法の計算精度を検証し、高分子の構造と熱伝導性の相関に関する知見を得るため、ポリエチレンを採り上げ、熱伝導率の結晶化度依存性について検討した。図1は、ポリエチレンにおける熱伝導率の結晶化度依存性について、計算結果と実験結果を示したものである。図1より、開発手法から得られた熱伝導率の計算値は、実測値と良好に一致していることがわかった。また、ポリエチレン結晶では主軸方向に極めて大きい熱伝導率を示す一方、ポリエチレンアモルファスでは熱伝導率が等方的であることも確認した。すなわち、開発した分子動力学法では、高分子の熱伝導率を定量的に予測することが可能であり、高分子の結晶化による高熱伝導率化についても分子レベルから実験結果を再現できることを実証した。当日は自己組織化高分子の熱伝導性についても、興味ある知見が得られたので報告する予定である。

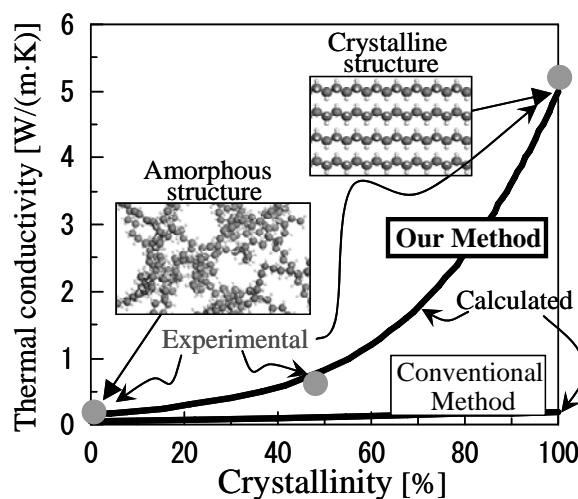


Fig.1 Computer simulation of crystallinity dependence of 3D-averaged thermal conductivity for polyethylene polymer

【謝辞】本研究の一部はNEDO 産業技術研究助成事業の補助により遂行した。