

行政院國家科學委員會專題研究計畫執行進度報告

奈米元件之微觀熱傳分析(2/3)

Microscale Heat Transfer in Nano-Device

計畫編號：NSC 90-2212-E-002-238

執行期限：90年8月1日至91年7月31日

主持人：張建成 教授 台大應用力學研究所

一、中文摘要

近年來科學工程技術發展的趨勢，主要是在強調系統的微小化以及探討一些微觀尺度下的物理現象。在微小尺度下，傳統力學已經不在適用。因此，除了繼續設計研發新的元件之外，研究微小尺度之物理行為是一個相當重要的部分。分子動力學(MD)在模擬微小尺度下的現象，是一個相當有效力的工具，他可以幫助瞭解物理變化的過程。本期計畫的目的是在 MD 中引入非線性高斯迭代法(INGA)以生成許多彼此獨立之平衡態的分子系統，並計算物理量如內能、壓力和比熱。

關鍵詞：元件、分子動力學、非線性高斯迭代法

Abstract

Recently, the development in science and technology have emphasized on miniaturization of systems and study of micro-scale phenomena. The classical mechanics is useless in micro-scale. Therefore, the study of micro-scale physical phenomena is the important part except designing and creating new device. Simulation based upon molecular dynamics is a powerful tool in micro-scale phenomena and it can help us to understand physical processes. The proposal aims of the study is to

introduce an iterative nonlinear Gaussianization algorithm (INGA) for generating independent replicas of molecular systems in equilibrium compute physical quantities, such as potential energy, pressure and specific heat capacity.

Keywords: device, Molecular dynamic, iterative nonlinear Gaussianization algorithm

二、計畫緣由與目的

近幾年來，微觀尺度下的物理行為，無論在科學或是工程上，一直是重要的研究課題，尤其是介電體或半導體的薄膜熱傳機制之探討。微觀尺度下的物理現象主要是由質量、能量和電荷傳輸所控制，因此，瞭解並掌握這些傳輸物理現象是相當重要的部分(Tien et al., 1998)。藉由分子動力學模擬，我們可以計算出在統計力學裡，平衡態下的物理量之系重平均如壓力、內能、壓縮係數和比熱。然而典型的 MD 為了增加平均值的精確度或降低其不準度，必須模擬幾十萬乃至百萬步。本期研究引入非線性高斯迭代法(Lin, 2000)，藉由此法能生成獨立之分子系統，以求降低模擬步數、提高精準度，改善 MD 需要長時間模擬的缺失。

三、計畫方法與簡介

MD 主要是在計算各個分子的運動，由其運動行為，即各個分子的位置、速度... 等等，描繪出整個系統的溫度、內能和壓力等各種不同的巨觀物理參數。此外，MD 的最大好處是它不僅能估算靜態(static)物理參數，還能計算動態(dynamic)物理現象，如熱流或電荷傳輸(Thijssen, 1999)，以及非平衡(non-equilibrium)下的模擬(Hafskjold et al., 1993)。

在 MD 裡，我們是對每個分子解其運動方程式，即

$$m_i \ddot{\vec{r}}_i = \vec{F}_i = -\frac{\partial \Phi}{\partial \vec{r}_i} \quad (1)$$

其中 m_i 、 \vec{r}_i 和 \vec{F}_i 分別是質量、位置和作用力，而 Φ 是系統的位能。在確定系統位能之後，我們給予系統的初始狀態，即各個分子的位置與速度。在位置的初始化當中，為了避免有過大的互斥力，所以使用面心(fcc)結構，而速度的初始化，採用在 Maxwell 分佈下的速度場(Haile, 1991)。

為了將整個系統有效的從初始狀態轉移至預期的平衡狀態，我們使用溫度控制的方法，即每隔一定的步數，將每個分子的速度作某個倍數之放大或縮小，使系統的溫度和預期的系統溫度相同，等到系統已達到預期的狀態後，取消溫度控制，讓系統自然的在平衡態附近振盪，不做人為控制。時間的演算法上，我們是藉由五階 Gear's predictor-corrector algorithms 計算各分子的位置、速度以及加速度。最後，由各分子的位置、速度以及加速度，推算巨觀的物理參數(Haile, 1991)。

非線性高斯迭代法主要是提供一個工具，即在原始樣本給定之後，其能生成許多統計上彼此獨立的新樣本(Lin, 2000)。此法分成兩部分 Forward 和 Backward 過程。Forward 過程是將原始樣本往高斯分佈去調整並記錄整個高斯化的過程。Backward 過程，先生成一筆滿足高斯分佈的樣本，之後沿著 Forward 過程逆向回去，產生新的獨立樣本。

由於吾人是由 Maxwell 分佈產生初始速度，在幾千步之後即可滿足 Boltzmann H 理論(Liboff, 1998)達到平衡條件。傳統

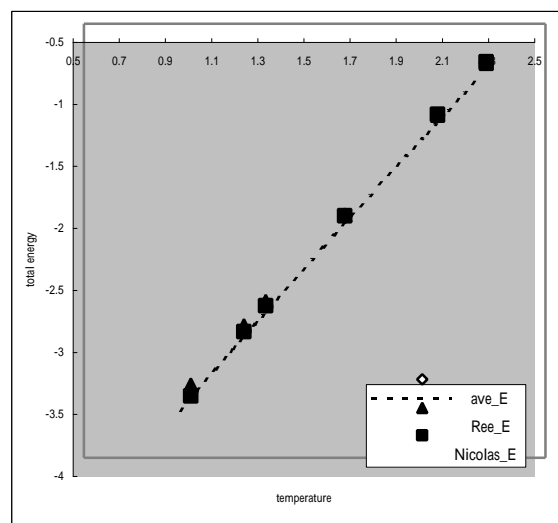
MD 為了降低不準度，必須作多步數的模擬。在此，我們引入 INGA 的方法，當系統平衡後，取適當的數據資料當作原始樣本，再藉由 INGA 能夠產生新的獨立樣本，之後，我們可利用新的獨立樣本，組合成一段新的模擬實驗以計算統計上的系重平均，也就是各個物理量的計算。

四、結果與討論

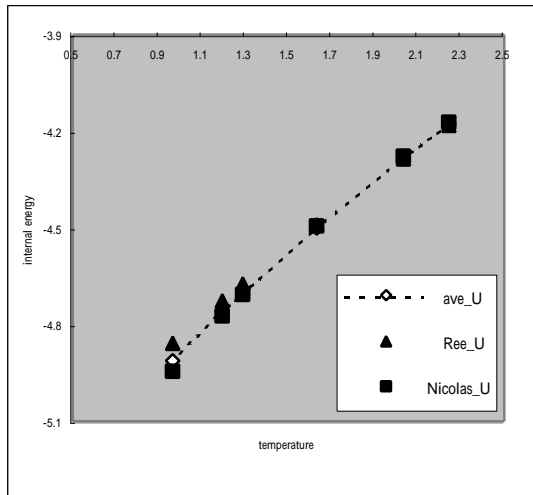
在 MD 的模擬上，我們使用了 Lennard-Jones 的模式，即(Haile, 1991)

$$\Phi(r) = 4 \left[\left(\frac{1}{r} \right)^{12} - \left(\frac{1}{r} \right)^6 \right] \quad (3)$$

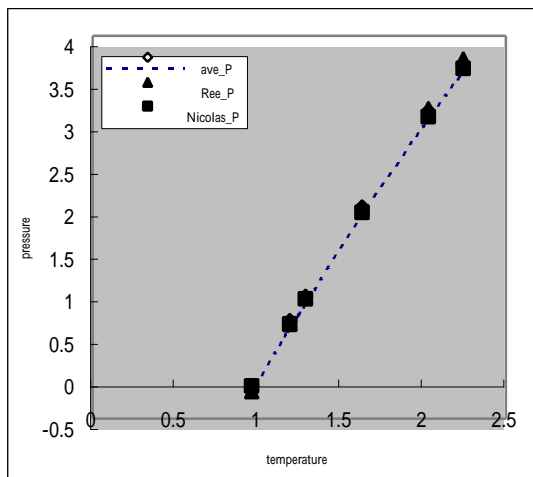
其中 Φ ， r 是無因次化後的位能和距離。模擬的初始條件是 256 個分子，無因次化的密度 $\rho=0.7$ ，週期性的邊界條件，彼此的位能只考慮距離小於 2.5 的範圍內，初始位置為 fcc 結構。在內能、總能量和壓力的計算裡，每一步的時間間隔為 0.003，平衡後時間間隔為 0.009，並取平衡後 10000 步每間隔 20 步的溫度、內能和壓力資料作原始樣本，利用 INGA 產生新樣本，組合成 175000 步，最後由這新的模擬數據計算物理量--內能、總能量和壓力，即圖一至圖三。



圖一 溫度對總能量圖



圖二 溫度對內能圖



圖三 溫度對壓力圖

在比熱的計算中，我們作能量控制，每一步的時間間隔為 0.003，平衡後時間間隔為 0.009，並取平衡後 10000 步的溫度和壓力資料作原始樣本，利用 INGA 產生新樣本，組合成 200000 步，最後由這新的模擬數據計算物理量—比熱，即圖四。

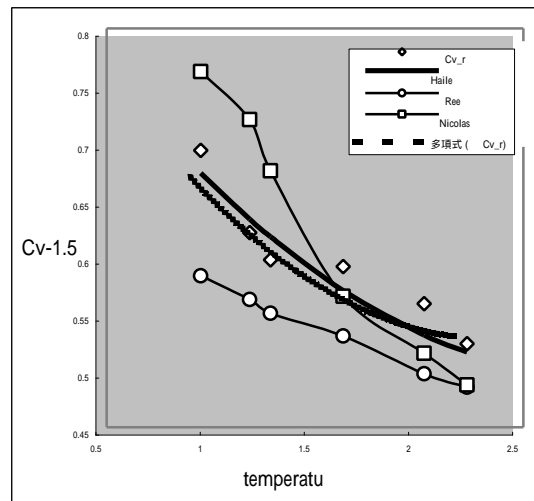
五、計畫成果自評

此報告是本計畫的第二期成果報告，主要是將分析的方法，加入 INGA 的探討與研究，這對於往後 MD 計算的發展，有決定性的影響。本期對於完成的程式，已經和前人的結果作比較，均有不錯的成果，可

算是完成階段性的任務。

儘管如此，模式仍有寬廣的發展空間，比如說，如何更快速的生成獨立的樣本 (sample)，非平衡態以及量子 (quantum) 效應下的 INGA 之應用。

對於以後的發展，我們希望將所發展出來的程式，應用在實際工程問題，也就是探討薄膜散熱的機制，進而建立分析理論之模式，謀求改進之道。



圖四 溫度對殘餘比熱圖

六、參考文獻

Hafskjold, B. and Ikeshoji, T., "Non-Equilibrium Molecular Dynamics Calculations of Heat Conduction in Liquid and through Liquid-Gas Interface," *Molecular Physics*, vol. 80, no. 6, pp. 1389-1412(1993).

Haile, J.M., *Molecular dynamics simulation*, John Wiley and Sons, Inc.(1991).

Huang, K., *Statistical Mechanics*, John Wiley and Sons, Inc.(1987).

Liboff, R.L. *Kinetic Theory*, John Wiley and Sons, Inc. (1998).

Lin, J.J. *Simulation and Synthesis of High-Dimensional Data and Related Issues*, Ph.D. dissertation,

- University of California, Davis.
- Nicolas, J.J., Gubbins, K.E., Streett, W.B., and Tildesley, D.J., "Equation of State for the Lennard-Jones Fluid," *Mol. Phys.*, 37, 1429(1979).
- Pathria, R.K., *Statistical Mechanics*, Butterworth-Heinemann(1996).
- Ree, F.H., "Analytic Representation of Thermodynamic Data for the Lennard-Jones Fluid," *J. Chem. Phys.*, 73, 5401(1980).
- Thijssen, J.M., *Computational physics*, Cambridge university press, New York(1999).
- Tien, C.L., Majumdar, A., and Gerner, F.M., *Microscale energy transport*, Taylor and Francis, (1998).