

固液界面の境界条件とマイクロ伝熱機構

Boundary Conditions and Microscale Heat Transfer at Solid-Liquid Interface

長山 暁子 (九州工業大学)

Gyoko NAGAYAMA (Kyushu Institute of Technology)

e-mail: nagayama@mech.kyutech.ac.jp

1. はじめに

界面とは、ある均一な相が他の均一な相と接している境界のことであり、一般に気相と液相、液相と液相、液相と固相、固相と固相の異相間で形成される。お互いが完全に混ざり合うことはないが、この界面間に存在する分子・原子の働きによって、熱が輸送されることになる。界面を介した熱伝導現象と言え、固相と固相の界面に表面粗さが起因する接触熱抵抗 (Thermal contact resistance) が思い浮かびやすいが、固相と液相の界面における界面熱抵抗 (Thermal boundary resistance) も存在する。後者については、1941年、ロシアの物理学者 P. L. Kapitza (1978年ノーベル物理学賞受賞) が極低温実験中に液体ヘリウムと銅の界面に有限の温度差を持つことを発見し、これをきっかけに界面熱抵抗の存在が広く受け入れられ、彼の名前から Kapitza resistance と呼ばれるようになった [1, 2]。それからちょうど70年を経た今、ナノテクの全盛時代に突入り、マイクロ・ナノシステムにおいて界面熱抵抗の重要性がますます高まっている。原子・分子の個々の運動を通じてみた固液界面における熱や流れの伝達・輸送現象への理解が求められている。そこで、本稿では分子熱流体の視点から固液界面の境界条件をはじめ、界面における流動抵抗と熱抵抗について、関連文献をレビューするとともに最近の研究動向および筆者らの初歩的な分子動力学的研究例を紹介する。

2. 従来の固液界面境界条件と伝熱機構

マクロ的な視点から見た固体と流体との間の伝熱機構は、流動機構と常に関連している。「粘性流体はその接する固体壁面で滑らない」という従来の概念は多くの教科書に記述され、基本的にすべりなしの境界条件 (No-slip boundary) に基づいて温度境界層の熱伝達解析は展開されることとなっている [3, 4]。固体表面に沿って流体が層流で流

れる場合には、固液界面に液体分子が整然と層流をなして動き、固体と流体の間に熱エネルギーは分子伝導 (Molecular conduction) の機構で伝達される。この熱の分子伝導の主役は、界面で整然と並ぶ液体分子であり、筆者はこの機構を「分子のバケツリレー」とイメージしている。乱流においては渦伝導 (Eddy conduction) 機構が分子伝導に付加され、層流の場合に比較すると熱伝達は著しく増加することになる。しかし、乱流の場合の固液界面において、層流底層あるいは粘性底層が存在することによって界面近傍において整然たる層流運動が維持され、結局層流と同じ分子伝導機構で、熱が「分子のバケツリレー」によって伝達される。そのため、マクロな系においては、速度や温度が固液界面で連続し、すなわち、速度すべりなしや温度ジャンプなしの連続の境界条件 (Continuous boundary condition) が多く用いられ、固液界面の界面熱抵抗を考慮しなくてもよいケースがほとんどである。

3. 固液界面のすべり境界条件

近年、マイクロ・ナノチャンネル、バイオチップおよび分子デバイスなどマイクロ・ナノシステムがあらゆる先端技術から注目されている。微細加工技術の進歩とともに、流路の代表寸法がすでに μm から nm へ、固液界面の分子間相互作用の影響が現れる極めて小さいスケールに近づいている。このような小さな系では、流れは層流であるものの、界面の影響が顕著に現れ、固液界面の濡れ性や界面形状が重要な役割を果たし、従来の固液界面境界条件が必ずしも成立しないことが分かってきた [5-35]。

図1に示す表面がなめらかな平行平板間に形成する平面ポアズイユ流れの例について考えると、界面における速度すべりなしの場合、速度分布は次式で表すことができる。

$$U(z) = -\frac{h^2}{2\mu} \frac{dp}{dx} \left\{ 1 - \left(\frac{z}{h} \right)^2 \right\} \quad (1)$$

ここで，平行平板間距離は $2h$ ，流体の粘性係数は μ ，流れ方向における圧力勾配は dp/dx である。

固液界面においてすべり速度が生じる場合，ナビエのすべり境界条件（Navier slip boundary condition, 1827）として，図2に示すように，スリップ長さ l_s （流体のすべり速度 V_s が界面から固相中に0になるまでの長さ）がよく用いられる。

$$l_s = \frac{V_s}{\left(\frac{dV_s}{dz} \right)} \quad (2)$$

図1に示す平面ポアズイユ流れの例についてスリップ長さ l_s を用いて表現すると，流体の速度分布は，

$$U(z) = -\frac{h^2}{2\mu} \frac{dP}{dx} \left\{ \left[1 - \left(\frac{z}{h} \right)^2 \right] + 2 \frac{l_s}{h} \right\} \quad (3)$$

で表せる。

流路の代表寸法がスリップ長さより十分大きければ，右辺スリップ長さを含めた項が0に近似でき，式(3)は式(1)に一致する。すなわち，スリップ長さが完全に0にならなくても，そのオーダーがナノスケールあるいはマイクロスケールであれば，マクロな流れに対してはすべりなしの境界条件が成立することになる。しかし，マイクロ・ナノチャンネルのような流路の代表寸法とスリップ長さとが比較的に近い場合においては，流れが層流で

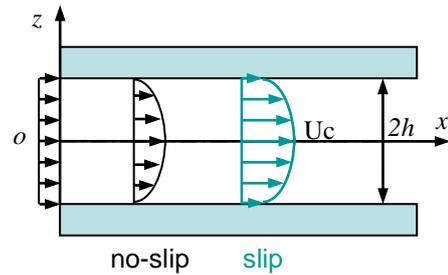


図1 平面ポアズイユ流

あっても，スリップ長さを含めた項が流路寸法の減少によりその割合が大きくなり，すべりなしの境界条件が成立しなくなる。式(3)より，すべり速度 V_s と流路中心速度 U_c の比を求めると，

$$\frac{V_s}{U_c} = \left(1 + \frac{h}{2l_s} \right)^{-1} \quad (4)$$

が得られる[18]。ここで，仮に $l_s = h$ とすると，

$$\frac{V_s}{U_c} = \frac{2}{3} \quad (5)$$

となり，マイクロ・ナノシステムにおいては流路寸法によってすべり速度を無視できないことが分かる。

一方，流路寸法が小さくなれば，液体側の熱伝導による流体内部の熱抵抗が比較的小さくなり，固液界面におけるわずかな界面熱抵抗でも極めて重要な意味を持つようになってくる。熱的すべり境界条件として，速度のスリップ長さ（Hydrodynamic slip length）に類似した熱的スリッ

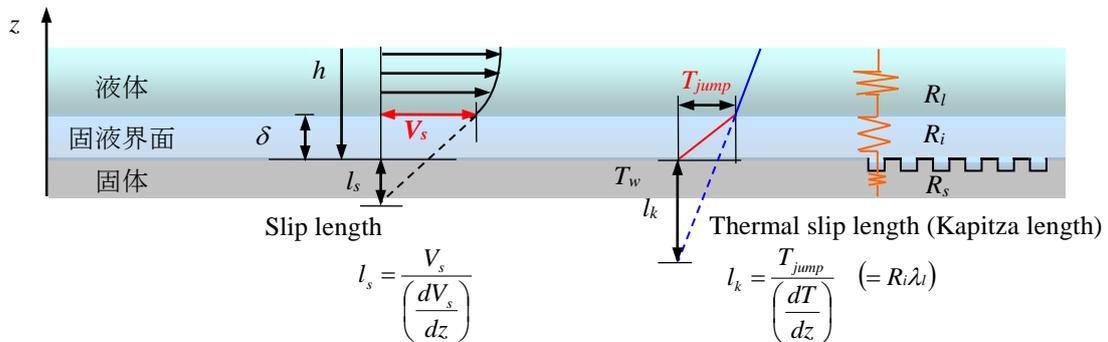


図2 固液界面における境界条件および界面抵抗の概念図

長さ (Thermal slip length), すなわち, Kapitza length がよく用いられる.

$$l_k = \frac{T_{jump}}{\left(\frac{dT}{dz}\right)} \quad (= R_i \lambda_l) \quad (6)$$

ここで, R_i は固液界面熱抵抗, λ_l は液体の熱伝導率を表している.

図 2 に示すように, 熱的スリップ長さ l_k は, 界面における固体と液体の温度差 (すなわち, 温度ジャンプ T_{jump}) が界面から固相中に 0 になるまでの長さである [1]. これは, 固液界面熱抵抗 R_i を液体の熱伝導と比較したときの等価液体厚さという直感的な表現である [33]. ところが, マイクロ・ナノシステムにおいて, 固液界面における速度スリップと温度ジャンプとのアナロジーが成立するかどうか, どのように成立するのかはまだ明らかにされていない. これらの詳細は, 固液界面におけるマイクロ伝熱機構とどのようにつながっていくのかが興味深い点である.

4. すべり境界条件に関する研究動向

4.1 スリップ長さ

固液界面におけるスリップ長さに関する研究は, 約十数年前から実験と分子動力学シミュレーションの両方から盛んに行われてきた.

表 1 に実験で得た水のスリップ長さのデータをリストアップしている [6-16]. スリップ長さの実験値は, 固体面の濡れ性, 表面構造と測定方法などの違いでばらつきはあるが, おおよそ数 nm から数十 μm までの範囲内に報告されている. なお, 水以外の液体を含めた詳細なレビューは文献 [17] を参照願いたい.

固液界面におけるすべり速度の発生が多くの実験によって明らかになってきたが, そのメカニズムは十分な解明に至っていない. 表 1 に示した例をはじめ, 多くの実験では, 固液界面におけるすべり速度が実際どこで生じるかは不明のままである. 固液界面層という極めて狭い空間において, すべり速度が固体と界面に最も近い液体との間の相対速度なのか, あるいは界面近傍の液体の内部

表 1 水に関するスリップ長さ l_s の実験測定値

著者	固体表面	l_s	測定方法
Zhu and Granick (2001) [6]	Octadecyltriethoxysiloxane coated mica	2.5 μm	SFA ¹
Trethway and Meinhart (2002) [7]	Octadecyltrichlorosilane(OTS) coated Si	1 μm	μ -PIV ²
Choi et al. (2003) [8]	SiO ₂ layer covered Si Octadecyltrichlorosilane(OTS) coated Si	10 nm 30 nm	流体
Jin et al. (2004) [9]	OTS-coated glass & PDMS	<10 nm	TIRV ³
Cottin-Bizonne et al. (2005) [10]	Pyrex & OTS-coated Pyrex glass	20 nm	DSFA ⁴
Majumder et al. (2005) [11]	Carbon nanotubes of MWCNT membrane	68 μm	流体
Cross et al. (2006) [12]	DPPC Bilayers deposited on Pyrex glass	10 nm	DSFA
Choi et al. (2006) [13]	Nanostructured Si with SiO ₂ layer Teflon coated nanostructured Si	3 μm 20 μm	流体
Choi et al. (2006) [14]	Nanograting Si with SiO ₂ layer Teflon coated nanograting Si	30 \pm 16 nm 143 \pm 35 nm	流体
Joseph et al. (2006) [15]	CNT forest on Si covered with SiO ₂ and Ni	1.5 μm	μ -PIV
Huang et al. (2006) [16]	Water / PDMS & OTS-coated glass	100 nm	TIRV

¹ 表面間力測定装置(Surface force apparatus); ² マイクロ粒子画像流速測定法(Micro particle image velocimetry);

³ 全内部反射速度測定法(Total internal reflection velocimetry); ⁴ 動的表面間力測定装置(Dynamic surface force apparatus).

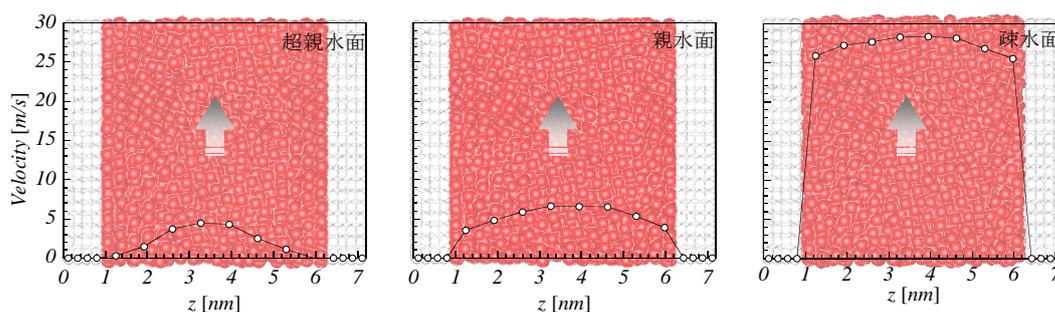


図3 ナノチャンネルにおける平面ポアズイユ流れ：スナップショットと速度分布。

で液体と液体との間の相対速度なのかを見極めるためには、分子スケール以下の分解能を有する計測技術が必要と思われる。検証できる実験事実はまだ得ていないが、今後解明されればと考えている。

一方、これらの詳細は分子動力学シミュレーションを用いたアプローチにより解明が可能となっている。これまでに、ナノ空間における流動現象の分子動力学シミュレーション研究は数多く行われている [18-28]。分子動力学解析によるスリップ長さは 100nm 以下の結果が最も多く報告され、実験値との間に大きいギャップがあるが、界面濡れ性（固液間分子相互作用）や表面構造などに依存するとの点については、実験結果と定性的に一致する。

筆者らの研究例 [18, 35] は界面濡れ性との関連に着目しており、結果の一部は本誌 2007 年 1 月号「固液界面の濡れ性の機構」特集にて紹介した [35]。ここでは、図 1 に示す平面ポアズイユ流のナノチャンネル版を分子動力学シミュレーションによって再現し、スリップ長さとの関連について補足する。間隔約 5.5nm のナノチャンネルに飽和状態に近い単純分子の LJ (Lennard-Jones) 流体を満たし、片端から駆動力を加えて非平衡分子動力学解析を行った。図 3 では、超親水面、親水面および疎水面のスナップショットに同じ駆動条件で得た速度分布を重ねてみた。超親水面の壁面近傍では、流体分子が規則的に並んで擬固体 (solid-like) 的な性質を示す。速度分布の形状は従来の放物線状となっており、流路中心部の流速は親水面に比べて比較的低い値となるが、固液界面においては速度が 0 となり、すべりなしの境界条件が成り立っている。この場合、固体と界面に層状に並んだ液体分子の間に相対速度が生じておらず、液

体内部にある分子と分子の間で速度勾配が生じる。しかし、固液間分子相互作用で疎水性が増すことになると、壁面近傍の液体分子の並び方がランダムになっていき、擬固体的な層状構造が乱れる。図 3 の中間に示す親水性が比較的弱い面で、流路中心部の流速は超親水面より大きくなっており、固液界面にすべり速度が生じていることが確認できる。この場合、界面の液体分子が固体分子に対して相対速度を持ち、界面で生じるスリップ長さを約 0.31nm と見積もる。また、すべり速度および中心部流速が最も大きい疎水面では、スリップ長さは約 1.22nm となるが、流路サイズに比べるとかなり大きいと考える。

分子動力学解析結果と実験で得たスリップ長さとの間に数桁のずれが生じてしまい、その原因の一つとして、計算系が理想に近い固液界面を扱っており、実際の界面との対応が不十分だったことが考えられる。また、先にも述べたように、計測技術の精度の問題で、計測したすべり速度の発生位置がもし液体内部にずれたとすれば、実験値が過大評価になっている可能性がある。さらに、流動抵抗の指標としてのスリップ長さが、固液界面熱抵抗とどのようにつながっていくのか解明が必要と考える。

4.2 熱的スリップ長さ (Kapitza Length)

スリップ長さに比べて、熱的スリップ長さに対する実験研究への関心は比較的に薄かった。主な原因として、固液界面における熱計測がネックであることが挙げられる。近年、Ge らは時間領域サーモリフレクタンス法 (Time-domain thermoreflectance) を用いて、水と自己組織膜で修飾した平坦面との界面における熱的スリップ長さの計測に初めて成功し、疎水面では 10–12nm、親水面では 3–6nm との結果を得た [30]。

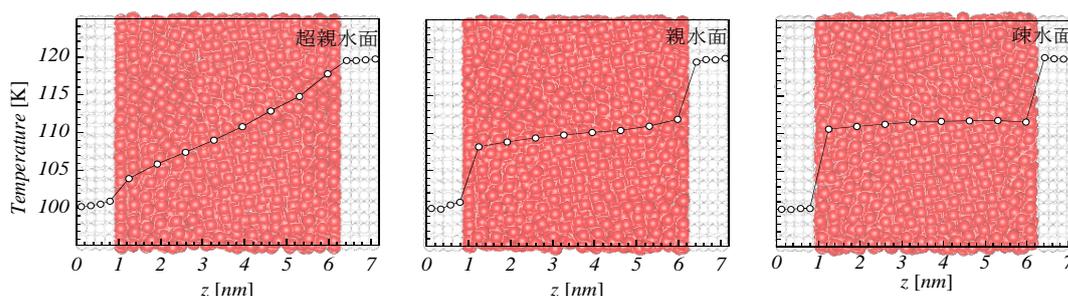


図4 ナノチャンネルにおける熱の流れ（壁温 100K–120K）：スナップショットと温度分布.

一方，界面熱抵抗に対する分子動力学的研究は進んでいる [29-42]. 丸山らは，世界に先駆けて分子動力学解析による固液界面熱抵抗の評価を行い，熱的スリップ長さが接触角によって変化し，比較的ぬれにくい固液界面においては，10–20nm 程度とする結果を示した [33, 34]. Khare らは固液界面の速度スリップと温度ジャンプとの間にアナロジーが存在することを報告した [29]. また，別々の角度から，Xu ら [31] と Kim ら [32] は，熱的スリップ長さと界面濡れ性との関連性を示した. 小原らは，固液界面における分子間エネルギー伝搬について，固体壁の原子配列や分子運動の各自由度の寄与を詳細に調べた [36-39]. 芝原らは，ナノ構造間隔が固液界面のエネルギー伝達および界面熱抵抗に及ぼす影響に着目した [40-43].

筆者らは，図3に示すナノチャンネルと同じ計算系を用いて，壁温 100K と 120K に設定した場合の非平衡分子動力学解析を行った. 図4にその温度分布を示す. 式(6)の定義に従って熱的スリップ長さを評価すると，超親水面（左）では 0，親水面（中）では 8.7nm，疎水面（右）では 42nm と見積もる.

図3と図4の結果を合わせて考えると，超親水面では速度・温度ともに連続するが，親水性が弱まる方向になると，固液界面における速度・温度ともに不連続的に変化することが分かる. 前者は，液体の擬固体分子層が固体壁の分子との強い分子間相互作用によって界面で層状に配置され，分子伝導機構（分子のバケツリレー）の大役を担ったためと考えられる. 後者においては，界面における液体分子と固体分子の相互作用が弱く，分子配置の乱れが生じたところに，バケツリレーが中断あるいは迂回しなければいけないので，分子伝導がうまくいかなくなる. なお，同じサイズのナノ

チャンネルに飽和状態ではなく，準安定 (metastable) 状態の液体を満たして駆動力を加えた場合は，疎水性固液界面において気泡あるいは隙間が生じてしまうことになる [44]. このような場合には，界面における液体分子の配置が疎になりやすい状況となり，スリップ長さや熱的スリップ長さをさらに増大させる傾向になろうと考える.

5. 固液界面のナノ構造とマイクロ伝熱機構

マイクロ・ナノシステムにおける固液界面の境界条件の決定にあたっては，固液界面の液体分子と固体分子の接触機構に対する理解が重要である. マクロな系において極めて平坦とされる固体表面でも，従来の表面粗さと異なる概念の微細構造を持つ可能性がある.

筆者らは，図2に示すような固液界面付近で数分子層程度の界面層内に形成したナノ構造が，界面における液体分子の配置に直接的な影響を及ぼし，界面濡れ性を制御することができると考えている [45]. すなわち，界面濡れ性のマクロな評価パラメータである接触角は，ミクロな視点からみれば，液体分子が固体に接触する際，界面条件に応じてエネルギー的に一番安定な状態になるように配置を変化した結果である.

ナノ構造を有する固液界面近傍における液体分子の密度分布を二次元的に表現し，図5に示す. 参考のため，固液気三相を有する計算系の結果を右に示し，親水面では液膜，疎水面では液滴がナノ構造面上に付着している様子が分かる. 図5より，界面近傍においては，固体壁（青）の形状に沿って液体分子が密に配置していることが分かる. 親水面（上）では，構造内の液体分子が強く拘束されて格子振動を繰り返す（擬固体分子層），局所の密度がほぼ 0（青）になる箇所があると確認で

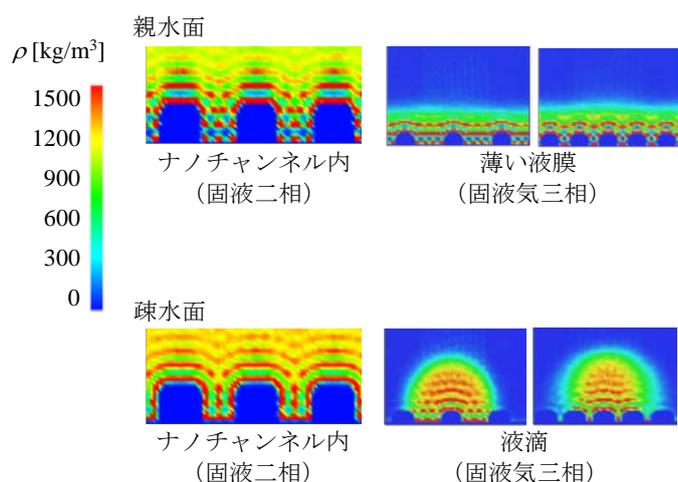


図5 ナノ構造と固液界面近傍の液体分子の密度分布（上：親水面；下：疎水面）。

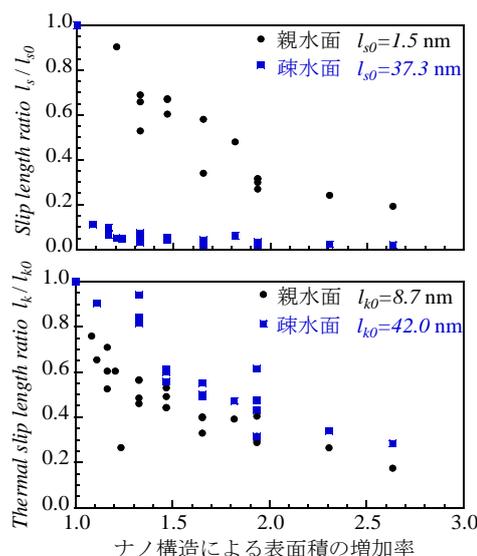


図6 ナノ構造と固液界面のすべり境界条件。

きる。この場合は，固体に接触している液体分子の移動がほぼない状況であり，分子伝導が確実に実現され，連続の境界条件が成立する。一方，疎水面（下）では，液体分子が構造内に閉じ込められて固体壁と激しく衝突し，分子層間においてほぼ飽和密度（緑）になっているのが特徴である。ナノ構造の空間制限により分子の移動自由度は平坦面より減らされるが，構造内衝突が増えることで熱伝達を増大させることが考えられる。

ナノ構造が固液界面のすべり境界条件に及ぼす影響を調べ，その結果の一部を図6に示す。計算の詳細は文献 [46, 47]を参照願いたい。筆者らは，ナノ構造を増やすことによって固液の実質接触面積が増加することが最も重要と考えており，横軸はナノ構造面と平坦面の表面積比，縦軸はナノ構造面と平坦面のスリップ長さおよび熱的スリップ長さの比を示している。図6よりナノ構造を密に設けることによって，スリップ長さと熱的スリップ長さがともに減少していくことが分かる。

ここでもう一度強調したいのは，ナノ構造による効果は，3節で示した考え方と同じく，流路代表寸法が極めて小さいスケールに近づいている場合に限る。分子動力学解析で示したナノ構造の効果は，さらに実験的に検証する必要がある。近い将来，界面構造の分子設計による固液界面の熱物性を自在に制御することがもう夢ではなくなるような気がする。

6. おわりに

固液界面における熱や流れの伝達・輸送現象が考えれば考えるほど，いかに「奥が深い」ことを実感している。ポスドクの時期から魅了され，本日まで続いてきた研究テーマではあるが，まだまだ理解が「不連続的」であることが再認識できた。浅学ながら，固液界面の気になる「点」を興味本位で紹介したが，「界面の熱伝導」という「線」を通して，本特集号のテーマである「熱・エネルギーを輸送するということ」の「面」に少しでも「連続」できたら幸いに思う。

本研究にあたっては，九州工業大学鶴田隆治教授，元大学院生椎木誠一氏，川越政子氏と柳井康祐氏の協力を得た。計算の一部は九州大学情報基盤研究センターのスーパーコンピューティングシステムを利用して行い，結果の一部は科学研究補助金 No. 1670167, 19560207, 21360099 によって得られた。記して感謝の意を表す。

最後に，いつも学会で激論を交わしながらも本稿をまとめる機会を与えて下さった東北大学流体力学研究所小原拓教授に感謝の意を表す。

参考文献

- [1] Kapitza, P. L., The Study of Heat Transfer in Helium II, J. Phys. (Moscow), **4** (1941) 181.
- [2] Pollack, G. L., Kapitza resistance, Rev. Mod. Phys., **41-1** (1969) 48.

- [3] 西川兼康, 藤田恭伸, 伝熱学, 理工学社(2003).
- [4] 甲藤好郎, 伝熱概論, 養賢堂 (1983).
- [5] 渡辺敬三, Yanuar, 水沼博, ニュートン流体の固体境界における滑りについて, 日本機械学会論文集 B 編, **63-611** (1997) 70.
- [6] Zhu, Y. X. and Granick, S., Rate-dependent slip of Newtonian liquid at smooth surfaces, *Phys. Rev. Lett.*, **87-9** (2001) 096105.
- [7] Tretheway, D. C. and Meinhart, C. D., Apparent fluid slip at hydrophobic microchannel walls, *Phys. Fluids*, **14** (2002) L9.
- [8] Choi, C. H., Westin, K. J. A. and Breuer, K. S., Apparent slip flows in hydrophilic and hydrophobic microchannels, *Phys. Fluids*, **15-10** (2003) 2897.
- [9] Jin, S., Huang, P., Park, J., Yoo, J. Y. and Breuer, K. S., Near-surface velocimetry using evanescent wave illumination, *Exp. Fluid*, **37** (2004) 825.
- [10] Cottin-Bizonne, C., Cross, B., Steinberger, A. and Charlaix, E., Boundary slip on smooth hydrophobic surfaces: Intrinsic effects and possible artifacts, *Phys. Rev. Lett.*, **94-5** (2005) 056102.
- [11] Majumder, M., Chopra, N., Andrews, R. and Hinds B. J., Nanoscale hydrodynamics: Enhanced flow in carbon nanotubes, *Nature*, **438-7064** (2005) 44.
- [12] Cross, B., Steinberger, A., Cottin-Bizonne, C., Rieu, J.-P. and Charlaix, E., Boundary flow of water on supported phospholipid films, *Europhys. Lett.*, **73-3** (2006) 390.
- [13] Choi, C.-H. and Kim, C.-J. Large slip of aqueous liquid flow over a nanoengineered superhydrophobic surface, *Phys. Rev. Lett.*, **96** (2006) 066001.
- [14] Choi, C. H., Ulmanella, U., Kim, J., Ho, C.-M. and Kim, C.-J., Effective slip and friction reduction in nanogated superhydrophobic microchannels, *Phys. Fluids*, **18** (2006) 087105.
- [15] Joseph, P., Cottin-Bizonne, C., Benoit, J.-M., Ybert, C., Journet, C., Tabeling, P. and Bocquet, L., Slippage of water past superhydrophobic carbon nanotube forests in microchannels, *Phys. Rev. Lett.*, **97** (2006) 156104.
- [16] Huang, P., Guasto, J. S. and Breuer, K. S., Direct measurement of slip velocities using three-dimensional total internal reflection velocimetry, *J. Fluid Mech.*, **566** (2006) 447.
- [17] Voronov, R. S. and Papavassiliou, D.V., Review of fluid slip over superhydrophobic surfaces and its dependence on the contact angle, *Ind. Eng. Chem. Res.*, **47** (2008) 2455.
- [18] Nagayama, G. and Cheng, P., *Int. J. Heat Mass Transf.*, **47** (2004) 501.
- [19] Thompson, P. A. and Troian, S. M., A general boundary condition for liquid flow at solid surfaces, *Nature*, **389** (1997) 360.
- [20] Barrat, J. and Bocquet, L., Large slip effect at a nonwetting fluid-solid interface, *Phys. Rev. Lett.*, **82-23** (1999) 4671.
- [21] Cieplak, M., Koplik, J. and Banavar, J. R., Boundary conditions at a fluid-solid interface, *Phys. Rev. Lett.*, **86-5** (2001) 803.
- [22] Bitsanis, I., Magda, J. J., Tirrell, M. and Davis, H. T., Molecular dynamics of flow in microscopes, *J. Chem. Phys.*, **87-3** (1987) 1733.
- [23] Ruckenstein, E. and Rajora, P., On the no-slip boundary condition of hydrodynamics, *J. Colloid Interface Sci.*, **96** (1983) 488.
- [24] Sokhan, V. P., Nicholson, D. and Quirke, N., Fluid flow in nanopores: An examination of hydrodynamic boundary conditions, *J. Chem. Phys.*, **115-8** (2001) 3878.
- [25] Somers, S. and Davis, H. T., Microscopic dynamics of fluids confined between smooth and atomically structured solid surface, *J. Chem. Phys.*, **96-7** (1992) 5389.
- [26] Travis, K. P. and Gubbins, K. E., Poiseuille flow of Lennard-Jones fluids in narrow slit pores, *J. Chem. Phys.*, **112-4** (2000) 1984.
- [27] Ding, X. D. and Michaelides, E. E., Kinetic theory and molecular dynamics simulations of microscopic flows, *Phys. Fluids*, **9-12** (1997) 3915.
- [28] Cao, B. Y., Chen, M. and Guo, Z. Y., Liquid flow in surface-nanostructured channels studied by molecular dynamics simulation, *Phys. Rev. E*, **74** (2006), 066311.
- [29] Khare, R., Keblinski, P. and Yethiraj, A.,

- Molecular dynamics simulations of heat and momentum transfer at a solid-fluid interface: Relationship between thermal and velocity slip, *Int. J. Heat Mass Transf.*, **49** (2006) 3401.
- [30] Ge, Z., Cahill, D. G. and Braun, P. V., Thermal conductance of hydrophilic and hydrophobic interfaces, *Phys. Rev. Lett.*, **96-18** (2006) 186101.
- [31] Xue, L., Keblinski, P., Phillpot, S. R., Choi, S. U.-S. and Eastman, J. A., Two regimes of thermal resistance at a liquid-solid interface, *J. Chem. Phys.*, **118-1** (2003) 337.
- [32] Kim, B. H., Beskok, A. and Cagin, T., Molecular dynamics simulations of thermal resistance at the liquid-solid interface, *J. Chem. Phys.*, **129-17** (2008) 174701.
- [33] 丸山茂夫, 木村達人, 崔淳豪, 安井康二, 固液界面熱抵抗の分子動力学, 日本機械学会熱工学部門講演会講演論文集, **1998** (1998) 309.
- [34] Maruyama, S., and Kimura, T., A Study on Thermal Resistance Over a Solid-Liquid Interface by the Molecular Dynamics Method, *Therm. Sci. Eng.*, **7-1** (1999) 63.
- [35] 長山暁子, 鶴田隆治, 分子動力学的視点からみた固液界面の濡れ機構, 伝熱, **46-194** (2007) 12.
- [36] Ohara, T. and Suzuki, D., Intermolecular energy transfer at a solid-liquid interface, *Microscale Thermophysical Eng.*, **4-3** (2000) 189.
- [37] Ohara, T. and Torii, D., Molecular dynamics study of thermal phenomena in an ultrathin liquid film sheared between solid surfaces: The influence of the crystal plane on energy and momentum transfer at solid-liquid interfaces, *J. Chem. Phys.*, **122** (2005) 214717.
- [38] Torii, D., Nakano, T. and Ohara, T., Contribution of inter- and intramolecular energy transfers to heat conduction in liquids, *J. Chem. Phys.*, **128** (2008) 044504.
- [39] Torii, D., Ohara, T. and Ishida, K., Molecular-scale mechanism of thermal resistance at the solid-liquid interfaces: influence of interaction parameters between solid and liquid molecules, *J. Heat Transf.*, **132** (2010) 012402.
- [40] 芝原正彦, 功刀資彰, 香月正司, ナノスケールの構造物が界面エネルギー伝達へ与える影響 (分子動力学解析), 日本機械学会論文集 B 編, **70-693** (2004) 1273.
- [41] 芝原正彦, 功刀資彰, 向勝巳, 香月正司, ナノスケールの構造物間隔が界面のエネルギー伝達に与える影響, 日本機械学会論文集 B 編, **71-708** (2005) 2108.
- [42] 芝原正彦, 功刀資彰, 向勝巳, 香月正司, ナノスケールの構造物間隔が固液界面近傍の分子挙動に与える影響, 日本機械学会論文集 B 編, **71-708** (2005) 2112.
- [43] 芝原正彦, 井上浩介, ナノ構造間隔が固液界面熱抵抗に及ぼす影響に関する分子動力学的研究, 日本機械学会論文集 B 編, **74-737** (2008) 172.
- [44] Nagayama, G., Tsuruta, T. and Cheng, P., Molecular dynamics simulation on bubble formation in a nanochannel, *Int. J. Heat Mass Transf.*, **49** (2006) 4437.
- [45] 長山暁子, 椎木誠一, 鶴田隆治, ナノ微細構造面の濡れ挙動に関する分子動力学的研究, 日本機械学会論文集 B 編, **73-278** (2007) 1084.
- [46] Nagayama, G., Kawagoe, M., Tokunaga, A. and Tsuruta, T., On the evaporation rate of ultra-thin liquid film at the nanostructured surface: A molecular dynamics study, *Int. J. Therm. Sci.*, **49** (2010) 59.
- [47] Nagayama, G., Yanai, K. and Tsuruta, T., Effect of Nanostructures on Solid-liquid Interfacial Boundary Condition in Nanoflow, *Proc. 7th Int. Conf. Flow Dynamics*, (2010) 346.