

氏名	徳永敦士
学位の種類	博士(工学)
学位記番号	工博甲第315号
学位授与の日付	平成23年 3月25日
学位授与の条件	学位規則第4条第1項該当
学位論文題目	気液相変化における界面輸送機構の研究
論文主査委員	主査教授 鶴田隆治 " 金元敏明 " 鹿毛浩之 准教授 宮崎康次 " 長山暁子

学位論文内容の要旨

近年、MEMS や NEMS に代表される機械加工技術が大きな進展を遂げており、熱工学の分野においてもナノ・マイクロスケールにおける伝熱促進技術が注目され、その熱・物質伝達特性の解明が望まれている。代表寸法がナノ・マイクロオーダーまで小さくなれば、現象は物質そのものの特性よりも、むしろ界面抵抗が支配因子となる。すなわち、この気液界面での熱・物質伝達に伴う界面抵抗は、高熱流束輸送機構において非常に重要なものとなる。

本論文では、非平衡界面における相変化現象を対象にした気液界面における分子境界条件を明らかにし、物質輸送及び熱輸送についての理解を深めるものである。まず、気液界面の物質輸送を取り上げ、主に凝縮における物質伝達から蒸気分子の凝縮確率を平均化して得られる凝縮係数を実験的に評価し、分子動力学法及び遷移状態説理論によって構築された理論式による予測結果との比較検証を行っている。また、凝縮係数の実験値には不凝縮性気体の影響が強く表れていると考え、非平衡分子動力学シミュレーション(NEMD)によって検証している。次に、非平衡界面における熱輸送問題を明らかにするために、気液界面における特異な現象である逆温度こう配について検証している。この逆温度こう配現象は、凝縮界面において高温の蒸気温度が低温の凝縮面に向かうにつれて上昇する現象であり、熱力学のパラドックスとして議論が続けられている未解決の問題である。ここでは、単原子分子であるアルゴン分子による NEMD 解析を行い、界面近傍の熱流束、気液の化学ポテンシャル差の直接計算によって、熱・物質輸送量の定量評価を加えた非平衡熱力学的考察、及び気体分子運動論的検討を行っている。

本論文の構成は以下の通りである。第1章では、気体分子運動論に基づいた気液界面の物質輸送についての一般的な記述法を説明した後に、これまでに構築された速度依存性を

表現する凝縮係数及び平衡系の分子境界条件について説明している。第2章では、依然として正確な実験値が得られていない水の凝縮係数について、滴状凝縮法を用いた実験評価について詳細に報告している。第3章では、非平衡分子動力学法 (NEMD) により、水の凝縮係数に及ぼす不凝縮性気体の影響を明らかにしている。第4章では非平衡界面の輸送現象であり、熱力学のパラドックスとして議論されてきている逆温度こう配現象について NEMD 解析を行い、得られた熱・物質輸送量から非平衡熱力学的考察を行っている。第5章では、逆温度こう配現象の NEMD 解析の結果から非平衡界面の輸送現象について分子運動論的に検証している。最後に、第6章において本研究の知見をまとめ、総括している。

学位論文審査の結果の要旨

近年のナノ・マイクロスケールにおける伝熱技術の進展とともに、蒸発や凝縮などの高熱流束潜熱輸送が注目され、気液界面での熱・物質伝達に関わる界面抵抗が重要視されている。従来、気液界面の輸送現象は気相側における気体分子運動論に基づいて記述されており、例えば凝縮の場合には界面に入射する全ての分子が一定の確率をもって凝縮するという分子境界条件が適用されている。また、蒸発や反射分子の速度分布が Maxwell 分布に従うことを前提としている。しかしながら、近年の分子動力学解析(MD)によって蒸気分子の凝縮確率に速度依存性があり、蒸発・反射分子についても Maxwell 分布に従わないことが示されている。これら気液界面における分子境界条件は、単に物質輸送量を与えるだけでなく、界面近傍の温度分布を適切に表現する重要な役割を演じるため、本論文では非平衡界面を対象とした気液界面における分子境界条件を明らかにし、物質輸送及び熱輸送についての検討を深めている。

まず、気液界面の物質輸送、特に凝縮における物質伝達を取り上げ、蒸気分子の凝縮確率を平均化して得られる凝縮係数を実験的に評価し、MD による予測結果との比較検証を行っている。その方法は、界面現象が支配的な滴状凝縮法によるものであり、不凝縮性気体や不純物の実験系への混入を避けるために高真空実験装置を設計・製作し、界面抵抗がより支配的となる低圧条件下での水の滴状凝縮実験を行っている。実験では、凝縮面に銅・ニッケル型の薄膜熱電対を薄膜技術により製作し、また $\phi 25 \mu\text{m}$ の極細熱電対を挿入するなどの工夫を行い、表面温度の計測精度を高めている。これらの先端的な温度計測によって数 μm 程度の微小液滴を対象とした局所熱流束と界面熱伝達率とから水の凝縮係数を評価し、0.6-0.8 の値を得ている。一方、水の凝縮係数の理論値は 1 に近い値であることから、不凝縮性気体や不純物への配慮はしたものの、凝縮系ではそれらが極微量でも存在すれば界面近傍に蓄積することが考えられ、依然その影響があるものと推察するに至った。

そこで、凝縮係数の実験値と理論値との差の原因として不凝縮性気体を取り上げ、非平衡分子動力学解析(NEMD)によってその影響を検証している。その結果、非平衡度とともに界面への凝縮流れが強くなり、不凝縮性気体分子が界面近傍に蓄積し、その濃度境界層が

発達するために凝縮係数が低下することを明らかにしている。実験でも熱流束の増大とともに凝縮係数が低下していることから、実験値と理論値の差の原因として不凝縮性気体の影響が強く、実際の系においては無視できないことを示している。

次に、非平衡界面における熱輸送の問題を明らかにすべく、気液界面近傍の温度場における特異な現象である逆温度こう配現象について検討している。低温の凝縮面に近づくにつれて気相温度が上昇するという一見不思議な現象であり、その存在を含め、未解明の問題とされてきた。本論文ではアルゴン分子を用いた NEMD 解析を行い、界面近傍の熱流束及び気液の化学ポテンシャル差の直接計算による熱・物質移動量の定量的評価を加えた非平衡熱力学的考察、さらに分子運動論的検討を行っている。その結果、NEMD においては実際に明瞭な逆温度こう配が観察され、同時に非平衡熱力学によって評価したエントロピー生成率は正となり、熱力学の第二法則には違反しないことを明らかにしている。また、界面近傍の速度分布を比較することにより、反射分子の速度分布に平衡系と非平衡系との間で違いのあることを新たに示している。すなわち、非平衡界面においては反射分子の高速側の存在割合が増えており、蒸気側に戻される余剰エネルギーが原因で界面温度が上昇することを見出した。実際に、エネルギーの適応係数を新たに定義して計算すれば、非平衡系では 1 以下となり、非平衡度とともにその値が減少していくことを示している。これらの結果より、長年議論されてきた逆温度こう配現象は、非平衡界面における反射分子の界面への適応限界が原因であると結論付けている。

以上、本論文は気液界面における相変化現象に関し、物質輸送と熱輸送の両問題について、実験と分子動力学解析及び非平衡熱力学からの検討を加えたものであり、その素過程の解明を行っている。機械工学、化学工学、特に熱流体工学の発展に寄与するところが大きく、本論文は博士（工学）の学位論文に値するものと認められる。

なお、審査委員及び公聴会における出席者から、NEMD シミュレーションにおける新規性、非平衡熱力学への反映方法、結果の物理的解釈など、種々の質問がなされたが、いずれも著者からの的確な回答がなされ、質問者の理解が得られた。

以上により、論文調査及び最終試験の結果に基づき、審査委員会において慎重に審査した結果、本論文が博士（工学）の学位に十分値するものであると判断した。