

令和 4 年 6 月 21 日現在

機関番号：14401

研究種目：基盤研究(B)（一般）

研究期間：2018～2021

課題番号：18H01382

研究課題名（和文）分子間エネルギー輸送機構に基づく、相変化を伴う複雑な流体-固体界面熱輸送の設計

研究課題名（英文）Design of complex fluid-solid interfacial energy transport with phase change based on intermolecular energy transport mechanism

研究代表者

芝原 正彦（Shibahara, Masahiko）

大阪大学・工学研究科・教授

研究者番号：40294045

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 13,600,000円

研究成果の概要（和文）：相変化を伴う複雑な流体-固体界面熱輸送を精密に設計するための知見を得るために、分子動力学シミュレーションと実験の両面から研究を実施した。本研究で提案した分子間エネルギー輸送機構に基づいた高時空間分解したエネルギー輸送の可視化手法により、表面性状に依存した流体-固体界面熱輸送特性の向上や低下が、微細な局所構造を有する界面領域のどこでの段階で生じたことに起因するのかについて、定常熱伝導、凝縮、凝固、蒸発、沸騰などの様々な熱輸送現象を対象に具体的に明らかにした。

研究成果の学術的意義や社会的意義

流体-固体界面における熱輸送現象は、エネルギー機器の動作の基礎であり、持続可能な社会の実現に不可欠な省エネルギー技術に直結する重要課題であるが、相変化を伴う固体壁面近傍の熱輸送現象は未解明な部分が多く、その制御は一般に困難である。本研究で提案した分子間エネルギー輸送機構に基づいた高時空間分解したエネルギー輸送の可視化手法により、相変化が生じる複雑な現象においても界面エネルギー輸送が向上・低下する局所領域と時刻を特定できるようになるため、その改善のための方法を原理的に、かつ、具体的に検討することが可能となる。

研究成果の概要（英文）：Both molecular dynamics simulations and experiments were conducted in order to obtain insights for the precise design of complex fluid-solid interfacial heat transport with phase changes. By the visualization method of high spatiotemporal decomposition energy flow based on the intermolecular energy transport mechanism proposed in this study, we specifically clarified where and at what stage in the region of the interface with fine local structure attributed to the improvement or deterioration of the fluid-solid interface heat transport depending on the surface characteristics in the cases of the various energy transport phenomena such as steady heat conduction, condensation, solidification, evaporation, and boiling.

研究分野：熱工学

キーワード：界面 エネルギー輸送 相変化 分子動力学

様式 C - 19、F - 19 - 1、Z - 19 (共通)

1. 研究開始当初の背景

流体 - 固体界面における熱輸送現象(熱伝導, 熱伝達, 蒸発, 凝縮, 沸騰)は, エネルギー機器の動作の基礎現象であり, 界面熱物質輸送の促進 (= 伝熱促進) あるいは, 界面熱物質移動の低減 (= 断熱性の向上) は, 省エネルギー技術に直結する重要課題である. しかし, 特に蒸発・凝縮等の相変化を伴う固体壁面近傍の熱輸送現象は現象自体に未解明な部分が多く, その制御は実験条件を試行錯誤で変更して実施されるのが一般的である.

一方で近年のナノテクノロジーや超微細加工技術の発展によって, 界面にナノメートルスケールの多孔質構造や円柱・矩形構造(以下, ナノピラーと称する)などを垂直配向させた伝熱面を用いた凝縮・蒸発実験が行われ, 伝熱促進効果が観察されたとの報告があり, 実用的な応用展開が望まれている. しかしながら, 「熱物質移動の原理から考えて, 放熱や断熱に最適な界面はどのような構造であるべきか?」という問いに答えるための学理や方法論は存在していない. なぜなら, このような流体 - 固体界面における熱輸送現象は, 時空間スケールが小さく, 実験による直接的な観察や計測が困難であるのに加えて, フーリエ則などの巨視的な法則や表面張力などの物理量がどこまで小さな時空間スケールまで評価に使えるかが不明であるからである.

このような背景下で, 分子スケールのエネルギー輸送機構に基づく固体界面近傍の熱輸送現象の理解が近年進み, 修飾基を有するような複雑な界面や構造を有する界面における熱輸送現象解明のために, 分子スケールの輸送機構への着眼が重要であることが認識されつつある. しかし, 現状, 相変化現象を含む複雑な流体 - 固体界面に分子スケールの熱輸送機構を応用することに成功した例はほとんどない. 分子スケールのエネルギー輸送機構に基づく高時空間分解された現象把握が成功すれば, 界面における分子スケールのエネルギー輸送機構を能動的に制御するための方法論の確立に直結し, 相変化を伴う複雑な流体 - 固体界面の熱輸送設計に有効な指針となると考えられる.

2. 研究の目的

本研究では, 分子間エネルギー輸送機構に基づき熱流束を直接可視化し, 相変化現象を含む複雑な流体 - 固体界面における熱輸送設計の指針となる方法論を確立することを目的とする. 具体的には,

高時空間分解した流体 - 固体界面の分子間エネルギー伝達機構

流体 - 固体界面に存在する微細構造特性

平均化された界面熱輸送

の三者の相関関係を分子間エネルギー輸送機構に基づき解明する.

このアプローチは, 巨視的な熱輸送現象に直結する分子スケールの現象を能動的に制御する方法として独自のものである. また, フーリエ則の成立条件を満たしていないほど高時空間分解した熱流束やエネルギー流束を直接的に可視化する方法は分子動力学法の他には存在せず, 目的を達成するためには必要不可欠な手法である.

3. 研究の方法

本研究では既述の目的を達成するために, 以下の項目(1)と(2)を並行して実施した.

(1)シミュレーションを用いた界面特性が分子間エネルギー輸送機構ならびに流体 - 固体界面熱輸送に及ぼす影響の評価

流体 - 固体界面におけるさまざまな熱輸送現象をモデリングして, 分子動力学法によりシミュレーションを行った. 対象とした界面熱輸送現象は, 固液間における定常熱伝導現象 [1,2], 凝縮現象 [3,4], 凝固現象 [5,6], 蒸発現象 [7], 沸騰現象 [8] である. 流体分子は水分子またはアルゴン分子を用い, 固体面としては Pt, Cu, Pb などの金属原子からなる固体系を対象として, 非平衡状態における定常または非定常現象の解析を行った. 図 1 に 凝縮現象の解析に用いた計算モデルの一例を示す. 最初に, 定常熱伝導現象を対象に伝熱面全体において時空間平均した界面熱抵抗値を求めて, 既往研究と比較することで解析方法の妥当性を確認した. 次に,

非平衡非定常現象を対象に, 伝熱面全体において空間平均した界面熱抵抗値の時間変化を求めて, 凝縮・凝固・蒸発・沸騰のそれぞれの過程における現象論的な変化との関係を考察した. 次に, 濡れ性と関連する固液間相互作用強さや固体界面微細構造を多様に変化させて, 分子間のエネルギー輸送量を直接的に定量的に可視化する手法を用いて, 濡れ性や微細構造に依存した流体 - 固体界面の分子間エネルギー伝達機構の変化を詳細に調査し, 濡れ性や微細構造が流体 - 固体界面のエネルギー伝達機構に及ぼす影響について物理的に考察を行った.

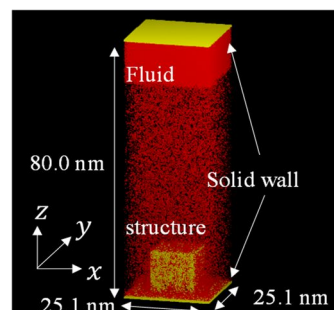


図 1 計算モデル例

(2)界面微細構造が流体 - 固体界面における巨視的な熱輸送特性へ与える影響の実験的評価

最初に、ジルコニアナノ粒子（粒径 100nm）が伝熱面（ステンレス鋼）に付着した場合の巨視的な固液界面熱抵抗の変化を温度傾斜法により測定を行い、定常熱伝導現象における微細構造の影響について巨視的な観点から評価と考察を行った[9]。次に、電子ビームリソグラフィ法により 100nm x 100nm の立方体ピラー周期構造を有する Si 面を作成し、その周期構造間隔を変化させることで、界面微細構造が流体 - 固体界面における巨視的な熱輸送特性に与える影響を実験的に調べた。具体的には、前述の周期構造を有する面を加熱または冷却することにより、蒸発・凝縮現象を対象とし、液滴の蒸発速度[10]および凝縮熱伝達率[11]を測定した。図2に作製した凝縮実験装置を示す。また、接触角の計測、電子顕微鏡による表面観察、伝熱面の温度分布の変化の計測などを同時に行い、フラット面との比較を行うことで、界面微細構造が液滴の蒸発速度および凝縮熱伝達率へ与える影響とその要因について実験的に考察を行った。

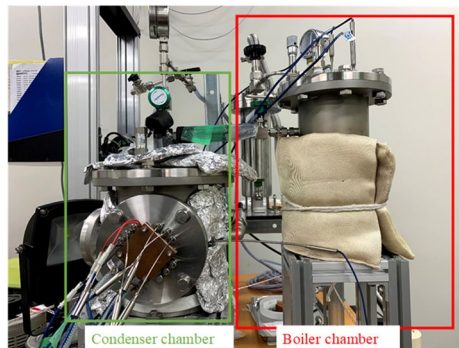


図2 凝縮実験装置

4. 研究成果

(1) シミュレーションを用いた界面特性が分子間エネルギー輸送機構ならびに流体 - 固体界面熱輸送に及ぼす影響の評価

固液間における定常熱伝導現象

水 - 銅界面において、ナノメートルスケールのスリット構造の大きさや濡れ性が、界面熱抵抗に与える影響を分子動力学シミュレーションにより評価した。その結果より、固液間相互作用強さや液体圧力の上昇に伴い、界面熱抵抗が減少することが確認された。また、液体圧力、スリット構造の大きさ、固液間相互作用強さによって、固液界面における Density Depletion Length (DDL) [12]が決まり、DDL と固液界面熱抵抗は一意的な関係にあることが分かった。一方で、スリット構造が液体分子で満たされるかどうかによって、DDL と固液界面熱抵抗の関係は大きく異なることも分かった。図3に DDL と固液界面熱抵抗の関係の一例を示す[1]。また、表面性状による固液界面熱抵抗変化の物理原因を詳細に明らかにするために、界面熱流束を原子スケールまで分解する試みや界面熱流束をスペクトル分解し、固体原子と液体分子の振動状態との適合性から説明する試みも行った。

白金ナノ粒子を含むアルゴン液体（ナノ流体）を対象に分子動力学シミュレーションを行い、ナノ粒子の濡れ性がナノ流体の有効熱伝達率に与える影響とそのメカニズムについて考察を行った。固液間相互作用が強くなると、ナノ流体の有効熱伝達率は有意に上昇するが、その原因は、ナノ粒子を構成する原子に加えて、ナノ粒子吸着層内外の液体分子のエネルギー輸送量が増加することであることが定量的に示された。図4にナノ粒子の濡れ性とナノ流体の有効熱伝達率の関係の一例を示す[2]。

凝縮現象

流体 - 白金界面の凝縮現象において、ナノメートルスケールの矩形構造や濡れ性が、高時空間分解した界面熱抵抗に与える影響を分子動力学シミュレーションにより評価した。流体分子としてアルゴンまたは水を用いた。その結果より、濡れ性のよい矩形構造を有する伝熱面では局所的な界面熱抵抗の差異が小さいが、濡れ性の悪い矩形構造を有する伝熱面では矩形構造基部において界面熱抵抗が小さく、かつ、初期核生成が観測できることが分かった[3]。また、凝縮過程における界面熱抵抗は、図5に示すように流体分子の表面被覆率と濡れ性に依存する固気界面熱抵抗と固液界面熱抵抗を用いた式で表現可能であることを示した[4]。

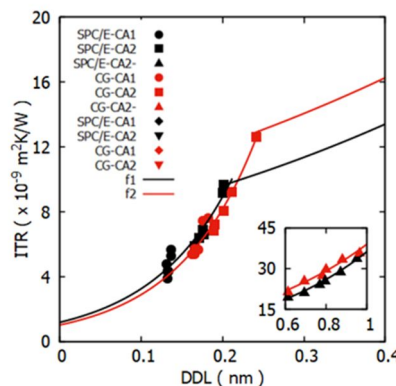


図3 DDL と固液界面熱抵抗の関係 (ナノ構造面の場合：凡例は水分子モデルと接触角の違いを表す。)

また、液体圧力、スリット構造の大きさ、

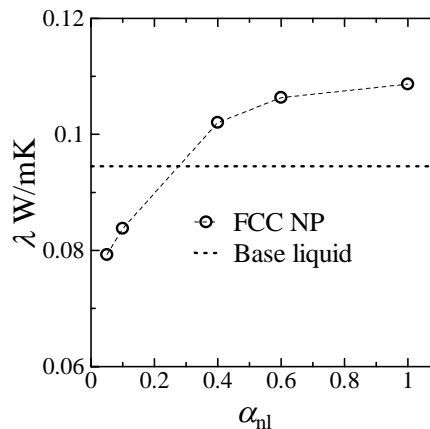


図4 ナノ粒子の濡れ性とナノ流体の有効熱伝達率の関係

凝固現象

水 - 固体界面の凝固現象において、表面性状や濡れ性が、高時空間分解した界面熱抵抗に与える影響を分子動力学シミュレーションにより評価した。固体面としては、白金、鉛、シリカを用い、ナノメートルスケールのスリット構造が付着した場合、OH基が付着したアモルファス面などの影響を調査した。前述の表面性状の変化は、凝固終了時の氷 - 固体界面の疑似液体層の厚さに影響を与え[5]、結果として氷 - 固体間の界面熱抵抗が生じることが分かった[6]。また、固体面の材質や表面性状は、過冷却後の臨界核生成速度と位置に影響があることから、図6に示すように氷結晶の巨視的な成長方向に影響を与えることも分かった。また、凝固時の界面熱抵抗の時間変化は水 - 固体界面のDDLの時間変化と相関があることも示された。

蒸発現象

ナノスリット内の液体アルゴンの蒸発現象において、スリット構造の大きさや濡れ性が、高時空間分解した界面熱抵抗に与える影響を分子動力学シミュレーションにより評価した。その結果、スリット構造の大きさや濡れ性は、気液界面構造に影響を与えるとともに、スリット表面と液体間の界面熱抵抗およびスリット内の三相界面における局所的なエネルギー輸送量を変化させることが分かった[7]。

沸騰現象

表面微細構造と濡れ性が、加熱面と接する液体中の臨界気泡核近傍における高時空間分解したエネルギーの流れや物理量に与える影響を分子動力学シミュレーションにより評価した。固体面としては白金、流体分子にはアルゴンを用いた。界面領域を一辺が 0.2~0.4nm の立方体からなる微細な空間に分割し、その空間における諸物理量の確率分布を用いて物理量を評価したところ、表面微細構造や濡れ性は臨界気泡核近傍の高時空間分解した密度、熱流束、ポテンシャルエネルギーに有意な影響を与えることが示された[8]。図7に臨界気泡核近傍と界面全体の局所瞬時熱流束の確率分布を示す。また、どのような表面微細構造近傍で臨界核生成が生じるかについても調査した。

(2) 界面微細構造が流体 - 固体界面における巨視的な熱輸送特性へ与える影響の実験的評価

固液間における定常熱伝導現象

ジルコニアナノ粒子が伝熱面に付着・堆積した場合の巨視的な固液界面熱抵抗の変化を温度傾斜法で計測した結果より、ナノ粒子の堆積により、固液界面近傍の熱抵抗は巨視的にも変化することが分かった。この変化の主要因は、ナノ粒子堆積層の有効熱伝導率の変化によるものであると考えられ、分子動力学シミュレーションでは計算可能な厚さを有しない固液界面熱抵抗の変化ではないことが明らかになった[9]。よって、巨視的な実験における固液界面熱抵抗と分子動力学シミュレーション結果の比較においては、本事実留意する必要があることが分かった。

凝縮現象

電子ビームリソグラフィにより 100nm × 100nm の立方体ピラー周期構造を有する Si 面を作成し(図8左)、その周期間隔を変化させることで、微細構造が濡れ性と凝縮熱伝達率に与える影響を実験的に調べた。作成した周期ナノ構造面における水滴の接触角は修正 Wenzel の式に従い、フラット面と比べて濡れ性が強化されることが示された。図8右に示すようにサブクール温度が 3 以下の時、周期ナノ構造面のほうがフラット面より凝縮熱伝達率が高くなることが示された[10]。

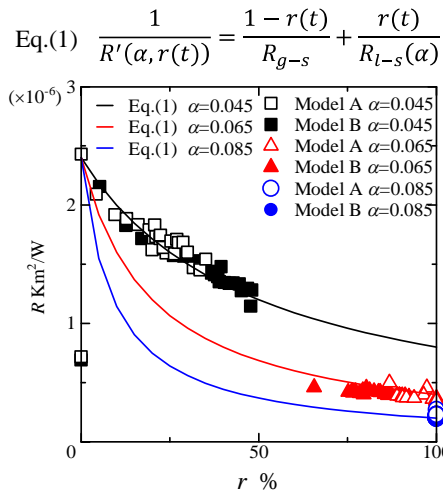


図5 凝縮時の被覆率と界面熱抵抗

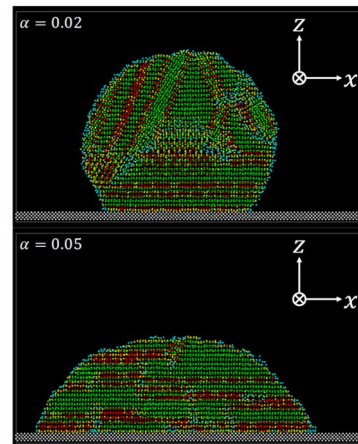


図6 濡れ性が氷滴の結晶成長に与える影響

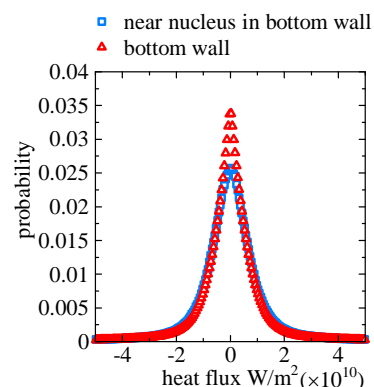


図7 臨界気泡核近傍と界面全体の局所瞬時熱流束の確率分布

蒸発現象

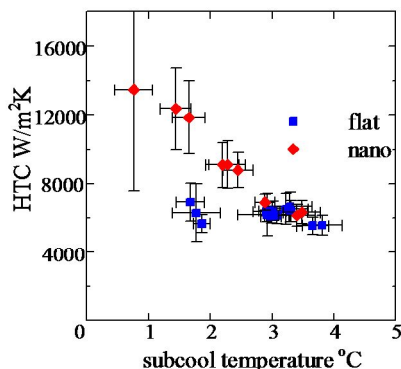
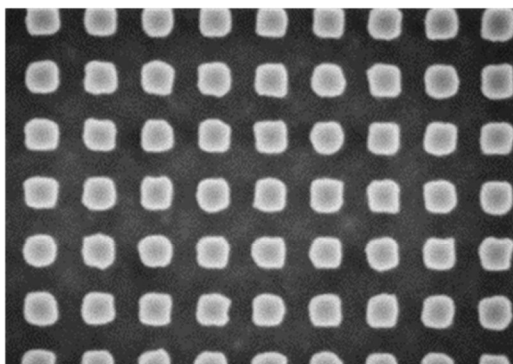


図8 作製したナノ構造面（左）とナノ構造面における凝縮熱伝達率の変化（右）

前述のと同様の周期ナノ構造面を用いて、液滴の蒸発速度および接触角の時間変化に対する微細構造の影響を調べた。フラット面と比較した場合に、ナノ構造面では接触角に対する物理的ピンギングの影響が観察され、蒸発促進が可能であることが示された[11]。

(3)まとめ

相変化を伴う複雑な流体 - 固体界面熱輸送を分子間エネルギー輸送機構に基づいて設計するための知見を得るために、分子動力学シミュレーションと実験の両面から研究を実施した。分子動力学シミュレーションでは、固液間における定常熱伝導現象、凝縮現象、凝固現象、蒸発現象、沸騰現象を対象とし、表面性状として伝熱面の濡れ性、微細構造、修飾基や結晶構造の影響を考慮した。～の現象において、表面性状に依存した局所界面熱抵抗の時間変化を明らかにし、その原因について分子間エネルギー輸送機構の観点から考察を行った。実験では、固液間における定常熱伝導現象、凝縮現象、蒸発現象を対象とし、ナノ粒子堆積層や周期ナノ構造面が、濡れ性、界面熱抵抗、凝縮熱伝達率、蒸発速度に与える影響を明らかにした。

時空間平均した流体 - 固体界面熱輸送に対する濡れ性や微細構造の影響はさまざまであるが、界面熱抵抗を低減し、熱伝達率が上昇する条件はどのような場合であるかを本研究で具体的に示すことができた。また、それらの時空間平均した流体 - 固体界面熱輸送の向上・低下が、複雑な界面構造のどこでどの段階で生じるかを明確に理解するためには、本研究で提案した分子間エネルギー輸送機構に基づいた高時空間分解したエネルギー輸送の可視化が有用であることを示すことができた。このような解析方法は、今後の更なる計算機の発展に伴って、相変化を伴う複雑な熱輸送に適した界面の設計に有用となると考えられる。

<引用文献>

- [1]Z.Jiang, M.Shibahara, Proceedings of The 8th Asian Symposium on Computational Heat Transfer and Fluid Flow(ASCHT), 2021, ASCHT2021-298.
- [2]K.Fujiwara, M.Daimo, Y.Ueki, T.Ohara, M.Shibahara, International Journal of Heat and Mass Transfer, 144, 2019, 118695.
- [3]A.Fuji, K.Fujiwara, Y.Ueki, M.Shibahara, Journal of Thermal Science and Technology, 15, 2020, 1-11.
- [4]M.Shibahara, A.Fujii, Proceedings of The 8th Asian Symposium on Computational Heat Transfer and Fluid Flow(ASCHT), 2021, ASCHT2021-146.
- [5]S.Uchida, K.Fujiwara, M.Shibahara, Journal of Physical Chemistry B, 125, 2021, 9601-9609.
- [6]Y.Ueki, Y.Tsutsumi, M.Shibahara, Proceedings of Second Asian Conference on Thermal Sciences, 2021, ACTS-1068.
- [7]磯部, 植木, 芝原, 熱工学コンファレンス 2021, I121.
- [8]芝原, 西岡, 柏木, 第 59 回日本伝熱シンポジウム講演論文集, 2022, H122.
- [9]Y.Ueki, T.Oyabu, M.Shibahara, International Communications in Heat and Mass Transfer, 117, 2020, 104807.
- [10] 志賀, 植木, 芝原, 日本機械学会関西支部第 97 期定時総会講演会, 2022, 2P307.
- [11] 中村, 植木, 芝原, 日本機械学会関西支部第 97 期定時総会講演会, 2022, 30403.
- [12] B. Ramos-Alvarado, S. Kumar, G. P. Peterson, Journal of Physical Chemistry Letters, 7, 17, 2016.

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計7件（うち査読付論文 7件/うち国際共著 0件/うちオープンアクセス 1件）

1. 著者名 Fujii Akito, Fujiwara Kunio, Ueki Yoshitaka, Shibahara Masahiko	4. 巻 15
2. 論文標題 Molecular dynamics simulation on effects of nanostructure on interfacial thermal resistance during condensation	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Journal of Thermal Science and Technology	6. 最初と最後の頁 1-11
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1299/jtst.2020jtst0010	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスとしている（また、その予定である）	国際共著 -
1. 著者名 Uchida Shota, Fujiwara Kunio, Shibahara Masahiko	4. 巻 24
2. 論文標題 Molecular Dynamics Study of Interactions between the Water/ice Interface and a Nanoparticle in the Vicinity of a Solid Surface	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 Nanoscale and Microscale Thermophysical Engineering	6. 最初と最後の頁 53 ~ 65
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1080/15567265.2020.1765912	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Ueki Yoshitaka, Oyabu Tomoya, Shibahara Masahiko	4. 巻 117
2. 論文標題 Experimental study of influence of nanoparticles adhesion and sedimentation layer on solid-liquid interfacial thermal resistance	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 International Communications in Heat and Mass Transfer	6. 最初と最後の頁 104807 ~ 104807
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1016/j.icheatmasstransfer.2020.104807	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -
1. 著者名 Fujiwara K., Daimo M., Ueki Y., Ohara T., Shibahara M.	4. 巻 144
2. 論文標題 Thermal conductivity of nanofluids: A comparison of EMD and NEMD calculations	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 International Journal of Heat and Mass Transfer	6. 最初と最後の頁 118695 ~ 118695
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2019.118695	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 K. Fujiwara, M. Shibahara	4. 巻 114
2. 論文標題 Detection of heat flux at single-atom scale in a liquid-solid interfacial region based on classical molecular dynamics	5. 発行年 2019年
3. 雑誌名 Applied Physics Letters	6. 最初と最後の頁 011601 ~ 011601
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1063/1.5062589	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Uchida Shota, Fujiwara Kunio, Shibahara Masahiko	4. 巻 125
2. 論文標題 Structure of the Water Molecule Layer between Ice and Amorphous/Crystalline Surfaces Based on Molecular Dynamics Simulations	5. 発行年 2021年
3. 雑誌名 The Journal of Physical Chemistry B	6. 最初と最後の頁 9601 ~ 9609
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1021/acs.jpcc.1c03763	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

1. 著者名 Y. Ueki, Y. Tsutsumi, M. Shibahara	4. 巻 -
2. 論文標題 Molecular Dynamics Study of Instantaneous Interfacial Thermal Resistance of Droplets on Flat Crystalline Surface during Cooling and Ice Formation	5. 発行年 2022年
3. 雑誌名 International Journal of Heat and Mass Transfer	6. 最初と最後の頁 -
掲載論文のDOI (デジタルオブジェクト識別子) 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2022.123004	査読の有無 有
オープンアクセス オープンアクセスではない、又はオープンアクセスが困難	国際共著 -

〔学会発表〕 計34件 (うち招待講演 1件 / うち国際学会 13件)

1. 発表者名 藤井彰人, 藤原邦夫, 植木祥高, 芝原正彦
2. 発表標題 凝縮時のエネルギー輸送におけるナノ構造の影響に関する分子動力学的研究
3. 学会等名 第57回日本伝熱シンポジウム, D322
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 山本幸宏, 藤原邦夫, 植木祥高, 小原拓, 芝原正彦
2. 発表標題 ナノ粒子懸濁液のエネルギー輸送機構に関する分子動力学的研究
3. 学会等名 第57回日本伝熱シンポジウム, K1419
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 堤祐太, 植木祥高, 藤原邦夫, 松本亮介, 芝原正彦
2. 発表標題 様々な濡れ性の固体表面における水滴の冷却および結晶化についての分子動力学的研究
3. 学会等名 日本機械学会熱工学コンファレンス2020, G122
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 K. Fujiwara, T. Miyamoto, S. Uchida, and M. Shibahara
2. 発表標題 Molecular dynamics study on particle pushing and engulfment by a solidification front
3. 学会等名 Proceedings of The 31th International Symposium on Transport Phenomena (ISTP31), Hawaii, USA, October 2020,82.
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 A. Fujii, M. Shibahara, K. Fujiwara, and Y. Ueki
2. 発表標題 Molecular dynamics simulation on effects of nanostructure on interfacial thermal resistance during condensation
3. 学会等名 The 7th Asian Symposium on Computational Heat Transfer and Fluid Flow(ASCHT), A313 (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 M. Shibahara, K. Matsui, K. Fujiwara, and Y. Ueki
2. 発表標題 Molecular dynamics study on time resolved interfacial thermal resistance of nanostructured surface during condensation
3. 学会等名 The 2nd Pacific Rim Thermal Engineering Conference (PRTEC), PRTEC-24241 (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 大茂昌史, 藤原邦夫, 植木祥高, 小原拓, 芝原正彦
2. 発表標題 ナノ粒子が液体のエネルギー輸送機構に与える影響に関する分子動力学的研究
3. 学会等名 第56回日本伝熱シンポジウム, D324
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 山本幸宏, 藤原邦夫, 植木祥高, 小原拓, 芝原正彦
2. 発表標題 ナノ粒子懸濁液のエネルギー輸送機構に関する分子動力学的研究
3. 学会等名 日本機械学会熱工学コンファレンス2019, H212
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 Y. Ueki, T. Oyabu, M. Shibahara
2. 発表標題 Thermal resistance of nanoparticle layer deposited solid-liquid interface
3. 学会等名 The 16th International Heat Transfer Conference (IHTC-16), IHTC16-022135 (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 K. Matsui, K. Fujiwara, Y. Ueki, M. Shibahara
2. 発表標題 Molecular dynamics study on effects of structure on nucleation of water droplets
3. 学会等名 The 16th International Heat Transfer Conference (IHTC-16), IHTC16-23792 (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 M. Shibahara, M. Daimo
2. 発表標題 Molecular dynamics study on influences of nanoparticles on energy transport in liquid
3. 学会等名 The 9th Taiwan-Japan Workshop on Mechanical and Aerospace Engineering (国際学会)
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 大茂昌史, 藤原邦夫, 植木祥高, 芝原正彦, 小原拓
2. 発表標題 ナノ粒子による液体の熱伝導率変化に関する分子動力学的研究
3. 学会等名 第55回日本伝熱シンポジウム, P1420
4. 発表年 2018年

1. 発表者名 山本幸宏, 藤原邦夫, 植木祥高, 芝原正彦
2. 発表標題 ナノ粒子多孔質層の熱輸送機構に関する分子動力学的研究
3. 学会等名 日本機械学会 関西学生会2018年度学生員卒業研究発表講演会, 3A23
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 表面構造を付与したナノ材料の固液界面熱抵抗に関する分子動力的研究
2. 発表標題 木曾 絢太, 植木 祥高, 藤原 邦夫, 芝原 正彦
3. 学会等名 日本機械学会 関西学生会2018年度学生員卒業研究発表講演会, 2A25
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 固液界面における熱輸送機構と熱流スペクトルの関係性に関する分子動力学解析
2. 発表標題 坂本 遼介, 藤原 邦夫, 植木 祥高, 芝原 正彦
3. 学会等名 日本機械学会 関西学生会2018年度学生員卒業研究発表講演会, 3P14
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 芝原 正彦, 西岡 拓水, 柏木 良太
2. 発表標題 固液界面における核生成時の高時空間分解した物理量の描像に関する分子動力的研究
3. 学会等名 第59回日本伝熱シンポジウム講演論文集, (2022), H122
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Masahiko Shibahara, Akito Fujii
2. 発表標題 Molecular Dynamics Study on Influences of Nanostructure on Local Interfacial Thermal Resistance during Condensation
3. 学会等名 The 8th Asian Symposium on Computational Heat Transfer and Fluid Flow (ASCHT), Qingdao, China, September 2021, ASCHT2021-146 (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Zhiwen Jiang, Masahiko Shibahara
2. 発表標題 Molecular Dynamics Study on Influences of Water Models on Thermal Resistance at the Solid-Water Interface
3. 学会等名 Proceedings of The 8th Asian Symposium on Computational Heat Transfer and Fluid Flow (ASCHT), Qingdao, China, September 2021, ASCHT2021-298 (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Yoshitaka Ueki, Yuta Tsutsumi, Masahiko Shibahara
2. 発表標題 Molecular dynamics study of droplets on flat surface during cooling and ice formation
3. 学会等名 Proceedings of Second Asian Conference on Thermal Sciences, Fukuoka, Japan, October 2021, ACTS-1068 (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 芝原正彦, 山本幸宏, 藤原邦夫, 植木祥高, 小原拓
2. 発表標題 ナノ粒子を含む液体のエネルギー輸送機構に関する分子動力学的研究
3. 学会等名 第58回日本伝熱シンポジウム講演論文集, (2021) J121
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 芝原正彦, 藤井彰人
2. 発表標題 凝縮時のエネルギー輸送におけるナノ構造の影響に関する分子動力学的研究
3. 学会等名 日本機械学会2021年度年次大会, (2021), J052-03
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 芝原正彦
2. 発表標題 相変化を含む界面熱輸送に微細構造が与える影響に関する分子動力学的研究
3. 学会等名 第10回潜熱工学シンポジウム, (2021), K03 (招待講演)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 西岡拓水, 芝原正彦
2. 発表標題 MD法を用いた固液界面における核生成に対する高時空間分解解析
3. 学会等名 日本機械学会関西支部第97期定時総会講演会, (2022), 30403
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 柏木良太, 植木祥高, 芝原正彦
2. 発表標題 冷却面における氷核生成時の高時空間分解した物理量に関する分子動力学的研究
3. 学会等名 日本機械学会関西支部第97期定時総会講演会, (2022), 2P208
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 中村海斗, 植木祥高, 芝原正彦
2. 発表標題 周期ナノ構造が濡れ性や凝縮熱伝達率に与える影響に関する実験的研究
3. 学会等名 日本機械学会関西支部第97期定時総会講演会, (2022), 30402
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 Yoshitaka Ueki, Hideaki Murashima, Masahiko Shibahara
2. 発表標題 Molecular Dynamics Study of Evaporation in Nanoslit
3. 学会等名 3rd International Conference of Microfluidics, Nanofluidics and Lab-on-a-Chip (ICMFLOC 2021) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Yoshitaka Ueki, Satoshi Matsuo, Masahiko Shibahara
2. 発表標題 MOLECULAR DYNAMIC STUDY OF LOCAL INTERFACIAL THERMAL RESISTANCE OF SOLID-LIQUID AND SOLID-SOLID INTERFACES: WATER AND NANOTEXTURED SURFACE
3. 学会等名 Proceedings of International Symposium on Advances in Computational Heat Transfer (CHT-20) (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 磯部佑磨, 植木祥高, 芝原正彦
2. 発表標題 ナノスケールの蒸発過程における熱輸送に関する分子動力学的研究
3. 学会等名 日本機械学会熱工学コンファレンス(2021)I121
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 志賀颯, 植木祥高, 芝原正彦
2. 発表標題 微細周期構造表面における液滴の蒸発に関する実験的研究
3. 学会等名 日本機械学会関西支部 第97期定時総会講演会 (2022) 2P307
4. 発表年 2022年

1. 発表者名 内田翔太, 藤原邦夫, 芝原正彦
2. 発表標題 SiO ₂ アモルファス/結晶の壁面近傍における水の凝固状態に関する分子動力学的研究
3. 学会等名 第58回日本伝熱シンポジウム講演論文集, (2021)J221
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 内田翔太, 藤原邦夫, 芝原正彦
2. 発表標題 シリカ壁面近傍の水の凝固状態と冷却温度の関係に関する分子動力学的研究
3. 学会等名 第12回マイクロ・ナノ工学シンポジウム, 09P2-MN1-6, 2021
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Shota Uchida, Kunio Fujiwara, Masahiko Shibahara
2. 発表標題 Molecular dynamics study on interaction between wall surface and solidification interface of water molecules
3. 学会等名 Proceedings of International Symposium on Advances in Computational Heat Transfer (CHT), CHT-21-219, Rio de Janeiro, Brazil, August 2021 (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Xingyu Zhang, Kunio Fujiwara, Masahiko Shibahara
2. 発表標題 Interfacial Thermal Resistance Calculation by Molecular Dynamics Simulation under Equilibrium Condition
3. 学会等名 Proceedings of The 8th Asian Symposium on Computational Heat Transfer and Fluid Flow (ASCHT), ASCHT2021-296, Qingdao, China, September 2021 (国際学会)
4. 発表年 2021年

1. 発表者名 Shota Uchida, Kunio Fujiwara, Masahiko Shibahara
2. 発表標題 Effects of temperature on H2O molecules' layer between ice and silica surface using molecular dynamics simulation
3. 学会等名 Proceedings of Second Asian Conference on Thermal Sciences, ACTS-1142, Fukuoka, Japan, October 2021 (国際学会)
4. 発表年 2021年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

<p>大阪大学大学院 工学研究科 機械工学専攻 マイクロ熱工学領域ホームページ http://mte.mech.eng.osaka-u.ac.jp/</p>
--

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究分担者	植木 祥高 (Ueki Yoshitaka) (50731957)	大阪大学・工学研究科・助教 (14401)	
研究分担者	藤原 邦夫 (Fujiwara Kunio) (60800852)	大阪大学・工学研究科・助教 (14401)	

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計0件

8 . 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関
---------	---------