

令和 3 年 4 月 27 日現在

機関番号：14401

研究種目：若手研究

研究期間：2019～2020

課題番号：19K14908

研究課題名(和文)濡れが不均一な狭隘微細構造により制限を受ける気液相変化現象の解明と高熱輸送化

研究課題名(英文) Gas-Liquid Phase Change Phenomena in Heterogeneous Wettability Nanoscale Structure for High Heat Flux Transport

研究代表者

植木 祥高 (Ueki, Yoshitaka)

大阪大学・工学研究科・助教

研究者番号：50731957

交付決定額(研究期間全体)：(直接経費) 3,300,000円

研究成果の概要(和文)：表面に周期的なナノ構造を付与した伝熱面における蒸発現象について古典分子動力学法による数値解析と、実証実験を組み合わせることで実施することにより、体系的な理解の獲得を図った。微細狭隘構造であるナノスリット系を対象とした分子動力学解析を行った。その結果、構造特性や濡れ性が蒸発量や流体分子の蒸発経路に与える影響を明らかにした。また、実証実験においては電子線リソグラフィーを活用した約100 nmの表面周期構造を伝熱面に付与し蒸発に与える寄与を評価した。Wenzel状態におかれた液滴が微細構造から物理ピンニングを受け、固気液三相接触線の長さの減少が抑制されるため、蒸発量が促進される実験結果を得た。

研究成果の学術的意義や社会的意義

蒸発はヒートパイプやヒートポンプといった幅広く工業機器において重要な物理現象であり、その促進や制御には大きなニーズが存在する。近年の微細加工技術の進展によりナノスケールの表面構造を作製することが実現しているが、ナノ構造が蒸発をどのように、どの程度変化させることが可能であるのか、集成した物理的理解が得られているとは言い難い。分子動力学解析と実験実証の双方からナノスケール表面周期構造が蒸発に与える影響について包括的な理解を獲得した。

研究成果の概要(英文)：In the present study, the classical molecular dynamics simulations and experimental evaluations were performed to comprehensively understand the evaporation on the periodic nanostructured surfaces.

In the molecular dynamics study, the nanoslit systems were employed. It clarified how and how much the surface characteristics and wettability influenced the evaporation amount and the molecules trajectory during the evaporation. In the experimental study, the periodic rectangular nanopillars of approximately 100 nm were fabricated on the heat transfer surface by means of electron beam lithography. With the nanopillars, the evaporation was enhanced because the droplet was physical pinned to the solid surface, and the decrease in the length in the solid-gas-liquid contact line was mitigated.

研究分野：熱工学

キーワード：蒸発 微細構造 分子動力学 固気液界面 相変化

1. 研究開始当初の背景

蒸発はヒートパイプやヒートポンプといった幅広く工業機器において重要な物理現象であり、その促進や制御には大きなニーズが存在する。機器の伝熱は、主として固体壁を介した作動流体への熱の輸送を伴うため、伝熱面の表面の性状が大きく作用する。蒸発現象に着目すれば、固気液三相接触線からの蒸発量が支配的であり、伝熱面表面の物理化学特性を変化させることで蒸発の促進を得る試みが多くなされている。伝熱面表面の物理化学特性の変化には、化学的特性を変えることにより濡れ性を変化させることに加え、表面に微細構造を施すことにより実現することも可能である。近年の微細加工技術の進展によりナノスケールの表面構造を作製することが実現しているが、ナノ構造が蒸発をどのように、どの程度変化させることが可能であるのか、集成した物理的理解が得られているとは言い難い。

2. 研究の目的

上記の研究背景を踏まえ、本研究にて表面に周期的なナノ構造を付与した伝熱面における蒸発現象について古典分子動力学法による分子熱流体解析と、実証実験を組み合わせることで実施することにより、体系的な理解の獲得を図る。

3. 研究の方法

(1) ナノスケールの微細狭隙構造であるナノスリット系と、周期的にナノスケールの四角柱を配置したナノピラー系を対象として、古典分子動力学解析を行った。

(2) 実証実験においては電子線リソグラフィーを活用した数百ナノメートルの表面周期構造をSi伝熱面に付与して、蒸発に与える寄与を評価した。

4. 研究成果

(1) 古典分子動力学解析により得られた結果から、各種構造特性や濡れ性が蒸発量や流体分子の蒸発経路に与える影響を明らかとした。また、伝熱面の濡れ性が空間的非均一性を有する場合（図1を参照）、蒸発過程での流体分子の挙動に影響を与えることを明らかにし、蒸発促進に寄与する条件が存在することを示した。これは、伝熱面における濡れ性が空間的に非均一となることにより、気液界面形状が変化し、その結果、蒸発時の分子の離脱経路や液相圧力、温度に変化が生じることにより、全体としての蒸発が促されているといった物理機構を明らかとした。それに加え、固体壁面と接触する気液界面における流体分子の挙動は、従来の分子軌跡分類である蒸発、凝縮、反射の他に、特異な挙動が存在するのを見出した。それは固体壁面近傍において、気液界面を短時間に複数回往復する分子軌跡であり、壁面からの分子間相互作用により気液界面に滞留する挙動であると考え、新たに気液界面の分子軌跡分類として「滞留(Retention)」を提唱した（引用文献①）。また、固気液三相接触線領域からの熱輸送の方向成分の寄与は、非等方的であるといった数値解析結果が得られており、伝熱面近傍における蒸発挙動の分子論的な描像が明らかにした。

(2) 本研究の実験結果から、接触角を予測する物理モデルである修正Wenzel式が本研究のナノスケールまで適用可能であることを示し、蒸発促進に寄与する構造特性を明らかにした。また、実証実験においては電子線リソグラフィーを活用したおよそ100ナノメートルの表面周期構造を伝熱面に付与して蒸発に与える寄与を評価した。それに加え、赤外線温度計測を行うことで温度場、液滴形状、そして蒸発量との相関を調査した。その結果、表面周期構造を伝熱面に付与した際に、Wenzel状態におかれた液滴が微細構造から物理ピンングを受け、固気液三相接触線の長さの減少が抑制されるため、蒸発量が促進される実験結果を得た（引用文献②）。以上の結果から、ナノスケール表面周期構造が蒸発に与える影響について包括的な理解を獲得した。

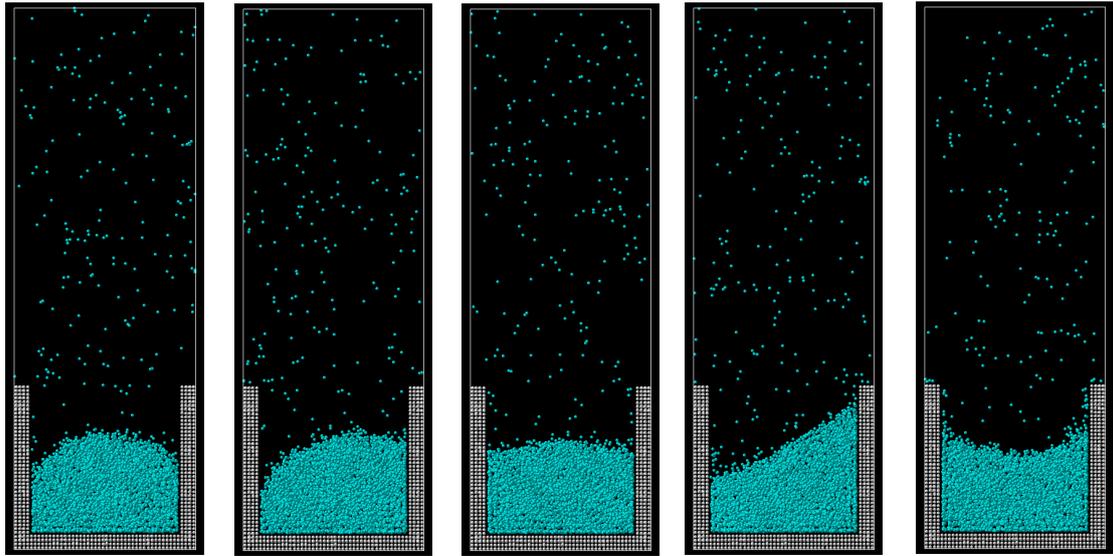


図1. 古典分子動力学の解析例：ナノスリットからの液体蒸発；左右壁面の濡れ性を変化させることにより，濡れ性が空間的に非均一な微細狭隘構造の蒸発現象を調査した．

<引用文献>

① Yoshitaka Ueki, Hideaki Murashima, Masahiko Shibahara, “Molecular dynamic study of evaporation in nanoslit: Influence of slit geometry and wettability”, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, **163**, 120463 (2020).

<https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2020.120463>

② 志賀颯，植木祥高，藤原邦夫，芝原正彦，「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」，日本機械学会関西学生会 2020 年度学生員卒業研究発表講演会予稿集（2021）.

5. 主な発表論文等

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

1. 著者名 Ueki Yoshitaka, Murashima Hideaki, Shibahara Masahiko	4. 巻 163
2. 論文標題 Molecular dynamic study of evaporation in nanoslit: Influence of slit geometry and wettability	5. 発行年 2020年
3. 雑誌名 International Journal of Heat and Mass Transfer	6. 最初と最後の頁 120463 ~ 120463
掲載論文のDOI（デジタルオブジェクト識別子） 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2020.120463	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6件（うち招待講演 0件/うち国際学会 1件）

1. 発表者名 H. Murashima, Y. Ueki, M. Shibahara
2. 発表標題 Molecular dynamics study of evaporation in nanoslits
3. 学会等名 7th Asian Symposium on Computational Heat Transfer and Fluid Flow (ASCHT 2019) (国際学会)
4. 発表年 2019年

1. 発表者名 磯部佑磨, 植木祥高, 藤原邦夫, 芝原正彦
2. 発表標題 表面微細周期構造が蒸発に与える影響
3. 学会等名 日本機械学会関西支部・関西学生会2019年度学生員卒業研究講演会
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 植木祥高, 村島秀明, 芝原正彦
2. 発表標題 ナノスリット内の液体の蒸発に関する分子動力学的研究：構造特性と濡れ性が与える影響
3. 学会等名 日本機械学会熱工学カンファレンス
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 植木祥高, 村島秀明, 芝原正彦
2. 発表標題 ナノスリット内の液体の蒸発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
4. 発表年 2020年

1. 発表者名 志賀颯, 植木祥高, 藤原邦夫, 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 日本機械学会関西学生会2020年度学生員卒業研究発表講演会
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 伝熱面における微細構造が蒸発に与える影響に関する分子動力学的研究
3. 学会等名 日本機械学会関西支部定時総会講演会
4. 発表年 2021年

〔図書〕 計0件

〔産業財産権〕

〔その他〕

<p>【受賞】 磯部佑磨, 植木祥高, 芝原正彦, 「伝熱面における微細構造が蒸発に与える影響に関する分子動力学的研究」, 日本機械学会関西支部定時総会講演会メカペー ション学生研究発表セッション・ベストポスター賞受賞, 2021年3月.</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
--	---------------------------	-----------------------	----

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
---------	---------