

平成 22 年 5 月 1 日現在

研究種目： 若手研究(B)
 研究期間： 2008 ～ 2009
 課題番号： 20760111
 研究課題名（和文） 高クヌッセン数流れ境界条件の解析
 研究課題名（英文） Analysis on Boundary Condition in High Knudsen Number Flow

研究代表者
 山口 浩樹 (YAMAGUCHI HIROKI)
 名古屋大学・大学院工学研究科・講師
 研究者番号：50432240

研究成果の概要（和文）：高クヌッセン数流れの境界条件である気体分子と固体表面の相互作用について、重要となる統計量である適応係数の取得及び解析を試みた。エネルギー適応係数は中真空程度の環境で加熱された金属細線から気体への熱移動量から導出する手法により、簡便な実験系で白金に対する測定に成功した。次に、接線方向運動量適応係数を微小円管内流の質量流量から導出する手法により、熔融シリカ及び白金に対する測定を実施した。また、分子動力学法により適応係数の特性について解析を行った。

研究成果の概要（英文）：The gas-surface interaction is important as the boundary condition of the high Knudsen number flows. The accommodation coefficient, which represents the gas-surface interaction as a parameter, was measured and analyzed. Energy accommodation coefficient for platinum was obtained by measuring the heat flux from heated metal wire to gas under the medium vacuum condition using a simple experimental system. The tangential momentum accommodation coefficient for fused silica and platinum was deduced from the mass flow rate measurement through a microtube. The characteristics of the accommodation coefficient were analyzed by the molecular dynamics method.

交付決定額

(金額単位：円)

	直接経費	間接経費	合計
2008 年度	2,100,000	630,000	2,730,000
2009 年度	1,200,000	360,000	1,560,000
年度			
年度			
年度			
総計	3,300,000	990,000	4,290,000

研究分野：工学

科研費の分科・細目：機械工学・流体工学

キーワード：分子流体工学，高クヌッセン数流れ，境界条件

1. 研究開始当初の背景

熱流動解析において、近年特に重要となってきた無次元数として、分子同士の衝突が起こる平均的な距離である平均自由行程

と系の代表長さの比であるクヌッセン数があげられる。クヌッセン数は系の中を横断する際に分子同士の衝突がどれだけ起こるかを意味している。従来の流体力学で扱ってき

たのはクヌッセン数が小さい領域であり、クヌッセン数が大きくなる高クヌッセン数流れにおいては、分子同士の衝突が十分起きる前に境界へと達してしまうため、場の関数による連続体近似を用いた従来の流体力学による記述ができず、原子・分子の流れとして取り扱う必要が出てくる。クヌッセン数を考慮すべき熱流動場は現在、そして今後重要となる産業で数多く見られる。たとえば、半導体製造の真空プロセスや人工衛星などの宇宙環境は平均自由行程が長いために、また一方で MEMS/NEMS、マイクロ医療システムやマイクロ化学反応場 (μ -TAS) のような微細加工技術に基づくシステムはその系の小ささのために、高クヌッセン数流れとなる。

高クヌッセン数流れにおいては、分子同士の衝突に比べて分子と境界との相互作用が相対的に重要となり、境界条件が熱流動場に対して支配的となる。そのため、境界条件を理解することが、熱流動場全体の正確な把握につながる。多くの場合は固体が境界を形成しているため、特に気体分子 - 固体表面間の相互作用が重要と言える。但し、同じ“固体”といっても、従来の希薄気体流れで対象とされてきた金属だけではなく、マイクロ流れを中心に半導体であるシリコンやポリジメチルシロキサン (PDMS) などの高分子材料も高クヌッセン数流れ場に使われるようになってきている。これらの物質は特性も分子構造もそれぞれ全く異なるため、様々な固体表面に対する分子の相互作用の情報を得ることが不可欠である。また、熱流動場解析のためにモデル実験を行うことも多いが、モデル系で利用する物質が元の系と大きく異なる境界条件を生み出してしまう場合、モデル実験が実際の熱流動場を再現できているとは言えず、本来の目的を達成できない。そのためにも、物質の違いによる境界条件としての影響を明らかにすることは非常に大切である。

熱流動場の境界条件としては、気体分子が散乱前後でどのように速度を変化させるかという運動量変化が流体力学的に、気体分子が固体表面と交換するエネルギー交換量が熱力学的に重要である。前者は運動量適応係数、後者はエネルギー適応係数というマクロな物理量で表すことができる。従来、高クヌッセン数流れは希薄気体流れや表面反応を対象とした化学プロセスを中心としてきたために、現在の知見はほぼ工学表面か理想的な清浄表面といった極限的な条件における情報に限られているが、現実の境界条件とは大きく異なっている。境界条件を的確に設定できるようにしなければ、高クヌッセン数流れの解析、予測、開発において重大な支障をきたすことは明らかである。

2. 研究の目的

本研究では、高クヌッセン数流れの境界条件となる気体分子と固体表面の相互作用について、熱流動場に与える影響を明らかにすることを目的とする。特に熱流動場解析の境界条件として必要となる物理量の導出と、物質間の関係性の解明を中心に研究を行う。

高クヌッセン数流れは原子・分子の流れとして考える必要があるものの、熱流動場全体に対する境界条件の影響という観点では、一分子の挙動より統計的な量が重要となる。そのため、エネルギー適応係数、運動量適応係数などの統計的な物理量の取得を目指す。これまで、金属の工学表面及び理想的な清浄表面に関する境界条件モデルが大部分であり、固体でも非金属の半導体、高分子材料などの境界条件については極限的な仮説抜きには設定することができなかった。そこで、精度よりも境界条件の“種類”に着目して、様々な物質に対する物理量の取得を行い、さらに素材間の関係性について検討する。得られた適応係数を熱流動場解析に導入することにより、精度の良く熱流動場を再現することができるようになると思われる。

3. 研究の方法

高クヌッセン数流れの境界条件となる気体分子と固体表面の相互作用について、適応係数を取得し、物質間の関係性や熱流動場に与える影響を明らかにする。

まず、適応係数の実験的取得を行う。エネルギー適応係数に関しては温度を一定に制御した試料表面からの伝熱特性を測定から導出する。運動量適応係数に関しては、流路を作成しその流動抵抗を基に算出する。これらは直接計測できる値ではなく、理論解析を併用することで初めて算出できる。そこで、非常に単純な系、前者は球状容器、後者は直線流路を用いて実験を行う。さらに、気体分子同士の衝突がほとんど起きない自由分子流に近い条件を設定し、理論解析が簡単となるようにする。但し、実験系の構築の観点からは自由分子流に近い条件は高真空を必要とし、困難となる可能性があるため、理論解析を低真空状態まで拡張することによって実験系を簡便にすることを試みる。また、実験に関しては、実験値として具体的な数値を取得すること、物質の種類が多さ及び速報性に重点を置き、測定を実施する。

次に、数値解析を実施する。分子動力学法などを利用し、理想的な条件下において、精度良く運動量適応係数、エネルギー適応係数などを求める。実験結果と比較検討することにより、詳細過程の検証を行うとともに、特定の入射条件下での散乱過程との関連性について比較する。

4. 研究成果

本研究では、高クヌッセン数流れの境界条件となる気体分子と固体表面の相互作用について熱流動場に与える影響を明らかにするため、重要となる統計的な量である適応係数の取得及び解析を試みた。

まず、エネルギー適応係数の取得実験を行った。自由分子流領域となる高クヌッセン数流れを利用し、金属細線のジュール加熱を利用して気体分子へのエネルギー移動量を求める Low-Pressure 法を採用し、遷移流領域まで拡張した解析手法を適用した。その結果、高真空と必要とせず、中~低真空領域での測定となったために、非常に簡便な実験系での測定が可能となり、白金表面において窒素、酸素、アルゴンに対するエネルギー適応係数を広い表面温度範囲に対して取得することに成功した。そして、既に報告のある酸素、アルゴンに対しては、既存の結果とも良い一致を示すことを確認した。次に、同様の実験手法を非金属材料に対しても適用可能にするため、セラミックヒータを用いて間接的に加熱する新しい手法の提案を行い、検証を開始した。

次に、運動量適応係数に関して、高クヌッセン数流れとなるマイクロ円管内流れを利用した測定を実施した。流れが滑り流領域となるように平均クヌッセン数を用いて条件設定を行い、通過する質量流量を Constant Volume 法によって測定した。得られた質量流量に対し二次まで考慮した速度滑り条件を適用した解析を行い、平均クヌッセン数との関係から接線方向運動量適応係数を導出した。固体表面として溶融シリカと白金、試料気体としてアルゴン、窒素、酸素を用いて測定を行い、溶融シリカに対する結果は既存の結果と一致することを確認した。また、使用したマイクロ円管の幾何学的条件による影響が小さいことを示した。一方、白金に関しては現在までほとんど報告がなされていない。さらにエネルギー適応係数の取得も行っていることから気体分子と固体表面の相互作用の総合的な解明へとつながることが期待され、非常に貴重な情報の取得に成功したと言える。また、直接シミュレーションモンテカルロ(DSMC)法を用いたマイクロ円管内の数値解析により、円管内に温度分布がある場合の質量流量の変化を求めた。その結果を利用して法線方向の速度成分に関する適応係数の取得実験系の設計を実施した。

また、分子動力学法を用いて、金属表面に対する散乱形態の解析を解析した。そして、平均的な統計量である適応係数と分子線散乱実験のような入射条件が厳密に指定された場合の散乱形態との間の関係性について解析を行い、定性的な予測がある程度可能なことを示した。

5. 主な発表論文等

(研究代表者、研究分担者及び連携研究者には下線)

[雑誌論文] (計3件)

- ① Discussion on Measurement Mechanism of Pressure-Sensitive Paints, H.Yamaguchi, Y.Matsuda, H.Mori, T.Niim, *Sensors and Actuators B: Chemical* **142**, 224-229 (2009). 査読有
- ② 高クヌッセン数流れへの適用を通じた感圧塗料の測定原理についての一考察, 山口浩樹, 松田佑, 森英男, 新美智秀, 日本機械学会論文集 B 編 **75(752)**, 730-735 (2009). 査読有
- ③ Si(100)極薄酸化表面の熱分解過程, 杵淵郁也, 山口浩樹, 崎山幸紀, 高木周, 松本洋一郎, *表面科学* **29**, 537-542 (2008). 査読有

[学会発表] (計7件)

- ① H. Yamaguchi, 他4名, Experimental Measurement of Energy Accommodation Coefficient by Low-Pressure Method, ASME 2009 2nd Micro/Nanoscale Heat & Mass Transfer International Conference, 2009年12月18-22日, 上海, 中国
- ② 青木雄大, 山口浩樹, 他3名, 金属表面に対するエネルギー適応係数の測定に関する研究, 日本機械学会2009年度年次大会, 2009年9月14日-17日, 盛岡大学, 岩手
- ③ H. Yamaguchi, 他3名, Experimental Measurement of Energy Accommodation Coefficient for Metal Surface by Low-Pressure Method, 7th World Conference on Experimental Heat Transfer, Fluid Mechanics and Thermodynamics, 2009年6月28日-7月3日, クラクフ, ポーランド
- ④ H. Yamaguchi, 他2名, Molecular Dynamics Study on Rare Gas Scattering from Graphite, 7th JSME-KSME Thermal & Fluids Engineering Conference, 2008年10月13-16日, Sapporo, Japan
- ⑤ 山口浩樹, 他3名, 高クヌッセン数流れに対する感圧塗料の適用について, 日本流体力学会年会2008, 2008年9月4-7日, 神戸大学, 兵庫
- ⑥ 山口浩樹, 他3名, Ar-Pt(111)系を用いた分子線散乱実験及び適応係数測定の分子動力学解析, 日本機械学会2008年度年次大会, 2008年8月3-7日, 横浜国立大学, 神奈川

- ⑦ H. Yamaguchi, 他 2 名, Molecular Dynamics Study of Rare Gas-Graphite (0001) Surface Scattering, 26th International Symposium on Rarefied Gas Dynamics, 2008 年 7 月 21-25 日, Kyoto, Japan

6. 研究組織

(1) 研究代表者

山口 浩樹 (YAMAGUCHI HIROKI)

名古屋大学・大学院工学研究科・講師

研究者番号 : 50432240