

熱輸送のスペクトル学的理解と機能的制御
2019 年度採択研究者

2020 年度 年次報告書

藤原 邦夫

大阪大学 大学院工学研究科
助教

単原子スケール非平衡熱輸送場の分子動力学解析

§ 1. 研究成果の概要

本研究では、界面内の単原子スケールの局所空間において分子動力学を用いて熱流の空間分布を検出することで、界面熱輸送現象の新たな描像・原理を解明することを目的とする。そして、単原子スケールで検出された熱流のスペクトル特性に基づき、界面熱輸送を制御する新たな方法論を創出することを目指す。

本年度は、単原子スケール非平衡熱輸送場の解析技術の構築(3次元)を主に基礎モデル(Lennard-Jones系)を用いて実施した。局所的な物理量である応力とエネルギー流束に関して、面で平均する手法と体積で平均する手法で解析技術を構築し比較検討することで妥当性の検証を行った。結果として、熱流束場の3次元構造を算出する妥当な解析手法を構築することができた。固液界面領域内の熱流束場の3次元構造を詳細に明らかにし、固体原子と流体分子の相互作用が強い場合には特に指向性の強い熱流束を単原子スケールの空間分布として検出することに成功した。界面熱輸送を単原子スケールから操作する指針となる結果が得られていると考えられ、スペクトルの観点からさらに熱流特性の調査を行う予定である。一方で単原子スケールの熱流束の検出に要する計算負荷も明らかとなり、今後の応用展開に向けて考慮すべき点を把握することができた。

別の解析として固体表面構造を通過する熱流束の特性を調査し、吸着原子を含む様々な表面構造を有する固液界面において、巨視的な熱流束と単原子あたりの熱流束やそのスペクトルの相関関係を把握することができた。また、高精度計算機システムの構築も行い、おおよその作業を完了している。