

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

2021 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

本年度は主に、①単原子スケール非平衡輸送場の特性の解明(Lennard-Jones 系)、②界面付着原子が界面熱輸送に及ぼす影響に関する解析(Si-H₂O 系)、③沸騰熱伝達に関する解析、を行った。

まず①では、液体と固体界面において、十分に時間平均した状態で応力場と熱流束場の3次元的な構造(単原子スケールの空間分解能)を調査した結果、単原子スケールにおける応力と熱流束の関係性として線形性が成り立つことが分かった。また、単原子スケールの熱流の特性をさらに解明するために、単一の相互作用(原子・分子間力)と場の輸送量を接続する新しい方法論を構築した。そして、単一の相互作用に基づく応力に着目することで、場の熱輸送状態をさらに詳細に理解することが可能であることを示した¹⁾。この方法論は原子スケールの場の輸送量を論じる際に有用な手段となりえると考えている。

次に②では、ステップ・クラスター・吸着原子等の単原子スケールの表面構造が Si-H₂O 界面の熱輸送に及ぼす影響を詳細に調査した。空間平均された巨視的な熱流と、単原子スケールの表面構造局所における熱流の関係性をスペクトル的な観点から明らかにした。

最後に③では、本研究で構築した解析技術の応用として、沸騰核生成時における応力・熱流場の把握を行った。さらに計算モデル・精度を向上させて次年度も継続予定である。

【代表的な原著論文情報】

- 1) K. Fujiwara and M. Shibahara, Thermal transport mechanism at a solid-liquid interface based on the heat flux detected at a subatomic spatial resolution, Phys. Rev. E, Vol. 105, No. 3, 034803, 2022.