



HOKKAIDO UNIVERSITY

Title	Molecular Dynamics Analyses of Non-equilibrium Evaporation of Impacting Nanodroplet on Heated Wall and Liquid Film in Vapor-gas Binary Mixtures [an abstract of dissertation and a summary of dissertation review]
Author(s)	田部, 広風海
Degree Grantor	北海道大学
Degree Name	博士(工学)
Dissertation Number	甲第14873号
Issue Date	2022-03-24
Doc URL	https://hdl.handle.net/2115/85280
Rights(URL)	https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/
Type	doctoral thesis
File Information	Hirofumi_Tabe_abstract.pdf, 論文内容の要旨



学位論文内容の要旨

博士の専攻分野の名称 博士（工学） 氏名 田部 広風海

学位論文題名

Molecular Dynamics Analyses of Non-equilibrium Evaporation of Impacting Nanodroplet on Heated Wall and Liquid Film in Vapor-gas Binary Mixtures

(高温壁上での衝突ナノ液滴および混合気体中での液膜の非平衡蒸発に関する分子動力学解析)

本学位論文で対象としている液体の非平衡蒸発は、高温の鉄鋼へのスプレー冷却や燃料の燃焼、乾燥炉内での溶剤の乾燥など、工業的に様々な場面で見られる現象である。ここで、スプレー冷却などにおいて高温壁へ液滴が衝突する際、高温壁近傍で液滴の一部が瞬時に蒸発し液滴全体が浮遊するライデンフロスト効果と呼ばれる現象が生じる場合がある。この現象が生じることによって固液間の熱輸送が蒸気層によって遮られるため、スプレー冷却においては冷却効率の低下が問題となる。一方、ミスト状の溶液を高温の基板上で化学反応させることで機能薄膜を形成するミスト CVD 法では、ミスト状の微小液滴のライデンフロスト効果が発生することによって効率的なミストの輸送や均一な薄膜の形成が可能となることが報告されている。このように、ライデンフロスト効果の発生を抑制・促進することは工業的に重要な課題であるため、この現象の発生原理に関する正確な理解が求められている。しかし、実験では高温壁への衝突液滴内部での温度変化や液滴からの蒸発量を正確に計測することが困難であるため、ライデンフロスト効果の発生原理は未だ明らかにされていない。そこで、本学位論文では、実験では計測することが困難な上記の情報を容易に算出することが可能な数値計算、その中でも、液体の蒸発を解析するための特別な計算モデルや境界条件を必要としない分子動力学法を使用し、ライデンフロスト効果の発生メカニズムに関する調査を行った。その結果、液滴の高温壁面との接触部からの激しい蒸発が発端となって液滴内部で流動が生じ、その内部流動に起因した液滴端部での上向き速度によって液滴全体が浮遊する、すなわちライデンフロスト効果が発生するということが明らかになった。固体壁の温度が十分な高温ではなく液滴からの蒸発量が少ない場合には、内部流動およびライデンフロスト効果の発生は見られなかったため、液滴からの蒸発が液滴全体の運動に対して大きな影響を与えていることが示された。

以上のように分子動力学法を用いてライデンフロスト効果の発生メカニズムを調査したが、分子動力学法は計算負荷が非常に大きいためナノスケール程度の計算系を対象とした解析しか行うことができない。冒頭で紹介したスプレー冷却やミスト CVD 法ではマクロスケールの液滴の諸現象が生じているため、より現実に近い条件での解析を行うためにはより大きいスケールの液滴を対象とした数値解析を行う必要がある。マクロスケールの液滴を扱う解析手法としては流体力学解析が有用となるが、この手法を用いて液体の蒸発現象を解析する場合は、分子動力学法の場合とは異なり気液界面に対して液体の蒸発を表現する境界条件を設定する必要がある。分子動力学法を用いた調査によってライデンフロスト効果の発生には液滴からの蒸発が大きな影響を与えていることが明らかになったため、流体力学解析を用いた解析を行う際には液体の蒸発を正しく表現する境界条件を設定することが極めて重要であると考えた。特に、工業的に見られる衝突液滴（液体）の蒸発は、そのほとんどが混合気体中（例えば水蒸気と空気）で生じているため、混合気体中での液体の非平衡蒸発を表現する境界条件の設定が必要となる。しかし、現在そのような境界条件は存在しないため、その導出から行う必要がある。

流体力学解析のための境界条件を導出する手法としては、気体分子（蒸気分子）群の速度分布関数の時空間発展を算出する分子気体力学解析が有用となる。この時、気液界面近傍での蒸発分子・凝縮分子のふるまいは、分子の蒸発確率・凝縮確率を表す蒸発係数・凝縮係数などから構成される気体

論境界条件によって与えられる。気液界面に対して適切な気体論境界条件を設定した分子気体力学解析を行うことで、界面近傍の非平衡領域における分子の微視的な情報を蒸発確率や速度分布関数といった統計的性質で表すことができ、速度分布関数の時空間発展を計算していくことによって液体の蒸発を巨視的な質量流束として算出できる。そのため、混合気体中での液体の非平衡蒸発を表現する流体力学解析のための境界条件は、混合気体中において非平衡蒸発する蒸気分子のふるまいを正しく記述する気体論境界条件を設定した分子気体力学解析を行うことによって導出できる。そして、そのような気体論境界条件は分子スケールの数値計算手法によってのみ構築することが可能となるため、本研究では分子動力学法を使用して混合気体中での非平衡蒸発を表す気体論境界条件に関する調査を行った。以下では、全7章で構成されている本学位論文の概要を説明する。

第1章の序論では本研究の背景や目的を述べ、第2章では本研究で使用する分子動力学法の概要を説明する。また、主な議論の対象としている気体論境界条件についても説明する。

第3章では、分子動力学法を使用して、高温壁面に衝突するナノ液滴のライデンフロスト効果の発生メカニズムの解明を行った。また、高温壁の濡れ性とその発生メカニズムに与える影響も調査した。

次に、上述した通り、混合気体中での液体の非平衡蒸発を正確に表現する流体力学解析のための境界条件の導出に向けた気体論境界条件に関する調査を行った。

第4章では、先行研究で使用されている気体論境界条件の構築方法に関して、その妥当性の検証を行った。気体論境界条件を構築する際、気液界面を移動する分子の動きを蒸発・凝縮・反射に分類する必要がある。先行研究では分子の位置情報のみでその分類を行っていたが、この分類方法に関する詳細な議論は行われていない。そこで、本計算では分子が気液界面に滞在する時間を算出し、従来の手法で合理的な分子の分類が行われているのかを位置と時間の2つの側面から議論した。また、凝縮分子の分子速度と凝縮確率に関する調査も行った。

第5章では、混合気体中での非平衡蒸発を表す気体論境界条件に関する調査を行った。分子動力学法を用いて蒸気分子(凝縮性)と気体分子(非凝縮性)の二成分混合系を作成し、液膜からの非平衡蒸発が生じる非平衡系とすることで気体論境界条件の構築に必要な蒸発係数や凝縮係数を算出した。特に、本計算では気相領域内の蒸気分子数や気体分子間の衝突回数を自由に調整することができる疑似的な熱浴を設定することによって、定常的な非平衡蒸発が生じる計算系を多様な条件下で作成することが可能となっている。平衡状態と非平衡状態とで算出された蒸発係数・凝縮係数を比較することによって、これらの係数が非平衡の度合いに依存するのかを調査した。また、非凝縮性気体分子が蒸発係数・凝縮係数に与える影響も調査し、最終的に混合気体中での非平衡蒸発を表す気体論境界条件がどのような式で与えられるのかを検証した。

第6章では、瞬間的に加熱された気液界面からの蒸発を表す気体論境界条件に関する議論を行った。気液界面の瞬間的な加熱は、高温壁への衝突液滴が壁面に接触した直後の温度上昇に対応している。加熱する領域の厚さや温度、非凝縮性気体分子が蒸気分子の蒸発に与える影響を調査し、気液界面が瞬間的に加熱された直後の蒸発を表す気体論境界条件の構築を行った。

第7章では各章の結果を総括し、本学位論文で得られた結果が当該分野の今後の研究にどのように寄与・貢献できるかを説明する。