



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_review.pdf, 審査の要旨



学位論文審査の要旨

博士の専攻分野の名称 博士 (工学) 氏名 田部 広風海

審査担当者 主 査 准教授 小林 一道
副 査 教 授 渡部 正夫
副 査 教 授 大島 伸行
副 査 教 授 村井 祐一

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)

液体の蒸発は、高温鉄鋼へのスプレー冷却や溶剤の乾燥など、工業の様々な場面で見られる現象である。ここで高温壁へ液滴が衝突する際、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ことが知られている。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。ここで、実験では、液滴内部の温度変化や液滴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、特に液滴浮遊現象の発生メカニズムは未だその詳細が明らかにされていない。

そこで本研究では、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生じる激しい蒸発が発端となり、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ことが明らかになった。また、固体壁の温度が十分な高温ではない状態、つまり衝突液滴から生じる蒸発量が少ない場合には、液滴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、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、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、主にナノスケール程度の計算系を対象とした解析となってしまう。冒頭で紹介したスプレー冷却等では、マクロスケールの液滴を対象としており、より現実に近い条件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解析が必要となる。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には、気液界面に対して液体の蒸発を表現する境界条件を課す必要がある。また、工業的に見られる液体の蒸発は、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。そのため、混合

気体中での液体の蒸発を表現する境界条件の構築が必要となる。

現在のところ、混合気体に接した液体の蒸発に伴う分子の非平衡性を正しく表現できる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。そこで本研究では、分子動力学法を使用して、混合気体中での液体の蒸発を表現する気体論境界条件に関する調査を行った。この気体論境界条件を構築することで、流体力学方程式系に対する境界条件の導出が可能となる。その結果、気液平衡状態と非平衡状態において、気体論境界条件中に含まれる蒸気分子の蒸発係数の値を算出し、非凝縮性気体分子が蒸発係数に与える影響を調査した。また、混合気体中での液体の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についても検証した。

これを要するに、本研究では主に液体の蒸発に関連した二つの研究を行った。一つ目の研究では、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、特に固体・液体・気体の三相接触線における液体の蒸発が、液滴浮遊メカニズムの要因の一つになることを数値的に詳細に示した結果となっており、学術的な価値が高いと言える。また二つ目の研究として、混合気体に接した液体の蒸発に関する分子動力学解析を行った。その結果、これまで明らかとされてこなかった混合気体に関する気体論境界条件を構築することに成功した。これら結果は、工学のみならず、物理化学、気象学といった様々な分野の基礎的知見として貢献するところ大なるものがある。よって、筆者は北海道大学博士(工学)の学位を授与される資格あるものと認める。