

審査の結果の要旨

論文提出者氏名 木村 達人

本論文は「固液接触と核生成の分子動力学」と題し、固液接触と相変化に伴う核生成現象に着目し、理論的・工学的に重要な固体壁面上での不均質核生成および白金表面上の水液滴挙動について、分子動力学法を用いて研究したものであり、論文は全4章よりなっている。

第1章は、「序論」であり、本研究と関連して、古典核生成理論、均質核生成の分子動力学法シミュレーションや固液接触に関する分子動力学法シミュレーションなどの従来の研究と研究の目的について述べている。

第2章は、「固体壁面上の核生成のシミュレーション」であり、Lennard-Jones ポテンシャルモデルで表現した気体状態のアルゴンと接する固体壁面を冷却することにより、アルゴンの液滴核が生成する現象、および2つの平行な壁面間に挟まれたアルゴン液体の圧力を減少させることによる気泡核生成現象の分子動力学法シミュレーションについて述べている。いずれの場合にも固体面の温度制御に Langevin 法を適用することによって、仮想的な等温壁面となる温度制御を実現している。液滴核生成については、マクロなシステムでの予想と一致して、壁面のぬれ性が大きいほど選択的に壁面上で液滴の核生成がおこり、壁面がぬれにくい場合は壁面から離れた部分での均質核生成がおこることを明らかにしている。また、液滴クラスターのサイズ分布とその時間進展に着目して、クラスターの自由エネルギーや核生成速度を古典核生成理論と比較している。この結果、分子動力学法による接触角と核生成の起こる部分での平均温度を用いることで、古典核生成理論と一致する結果を得ている。一方、気泡核生成に関しては、固体壁面の影響を受けた気泡核生成の分子動力学法シミュレーションが可能であることを示し、液体の過熱限界や古典核生成理論との比較を行っている。

第3章は、「白金表面上の水液滴のシミュレーション」であり、工学的に重要な水液滴による白金表面のぬれに関する分子動力学法シミュレーションについて述べている。水分子

のポテンシャルとして SPC/E ポテンシャル, 白金原子間は Langevin 法によって温度制御されたバネマスモデル, 水と白金のポテンシャルとしては Sphor-Heinzinger および Zhu-Philpott の 2 種類のポテンシャルを比較している. 白金表面上におかれた微小水液滴は, 白金原子に水分子が強く束縛されるために, Lennard-Jones 流体などと比較してぬれの拡がり速度が遅くなるとの知見を得ている. また, 白金上に水分子一層による吸着層が形成し, その上に一定の接触角をもつ水液滴が形成される現象を分子動力学法によって始めて実現している. さらに, 2 種類の水-白金間のポテンシャルと 3 種類の白金結晶面 (fcc(111), fcc(100), fcc(110)) に対しての計算を比較し, 水-白金間のポテンシャルの強さと白金結晶面の原子面密度によって水液滴第一層目の密度が決定され, この密度がバルクな水よりも高くなるため, この一層目の水分子と他の水分子との有効なポテンシャルが低下し, 水分子層と水液滴との間に一定の接触角が現れることを明らかとしている. すなわち, 一層目の水分子の密度が大きくなるほど接触角が大きくなる.

第 4 章は「結論」であり, 上記の研究結果をまとめたものである.

以上要するに, 本論文は分子動力学法シミュレーションにより核生成および固体面のぬれ性について重要な知見を与えており, 分子熱工学の発展に寄与するものと考えられる. よって本論文は博士 (工学) の学位請求論文として合格と認められる.