

審査の結果の要旨

氏名 津田 伸一

キャビテーションをはじめとする気液の相変化現象において、その最初の時系列素過程にあたる気泡核の生成 - 成長過程は、熱流体工学の分野において残されてきた大きな未解決問題の一つである。また、近年のナノ・バイオテクノロジーの進展にともない、微小空間内における熱流体輸送を促進するための新しい観点や技術が必要になってきているが、気液の相変化や微小気泡の利用はその一つとして注目されてきている。このような中、気泡核の生成 - 成長機構やそのサイズ分布状態を分子レベルから明らかにしていく必要性が高まってきている。そこで、本論文では液体中における気泡核の生成 - 成長機構やそのサイズ分布状態を、分子スケールから解明することを目的としている。

第 1 章は「緒論」であり、研究の背景、従来の研究の経緯、および本論文の目的と構成を述べている。

第 2 章は「数値実験法」であり、研究手法として採用している分子動力学法の概要と気泡核の生成 - 成長過程の再現方法、および主な解析方法を述べている。

第 3 章は「単一気泡核の生成過程の解析」である。ここでは Lennard-Jones 液体を対象として、減圧下での気泡核生成において重要な役割を果たす不凝縮ガスの影響を、その分子特性との関係において解明している。まず、分子動力学シミュレーションにもとづいて核生成頻度を計算し、不凝縮ガスの分子間力が弱い場合には、その分子径の違いに応じて生じる圧力差に対して、圧力の上昇にも関わらず核生成頻度が上昇するという、通常の変化とは定性的に異なる現象（逆転現象）が起こることを見出している。ここで、この逆転現象は分子径の違いによって生じる濃度ゆらぎの違いに起因することを分子論的観点から説明している。また、逆転現象が起こる場合には低温度高負圧領域における熱力学的状態点が分子径の違いを受けやすくなることに注目し、この影響を反映した無次元過熱度という指標を導入している。そのうえで、この逆転現象が無次元過熱度の上昇にともなう核生成頻度の上昇という、熱力学的に整合性のある（通常の変化とも定性的に合致する）現象として記述できることを示している。

第 4 章は「複数気泡核の成長過程の解析」である。ここでは、大規模分子動力学シミュレーションによって複数の気泡核が相互に影響を及ぼしあう系での粗大化過程を再現した上で、その粗大化機構を反映する物理量の（時間のべき乗による）スケーリング指数を導出している。解析対象は、不純物の混入がない一成分系アルゴンと、10%のモル分率でヘリウムに相当する不凝縮ガスが混入している二成分系アルゴンである。まず、一成分系では、個々の気泡核の成長がある程度進んだ時点でより小さな気泡核は収縮 - 崩壊に至る一方、

より大きな気泡核は成長を続けるという競合的な粗大化が起こるのに対して、二成分系では、合体による粗大化が頻繁に起こることを示している。また、このように粗大化の形態が異なる理由を、分子論的観点と熱力学的観点から考察している。続いて、平均気泡核半径の時間変化に対するスケーリング指数（成長速度指数）は双方の系において $1/2$ になる一方で、成長速度指数の内訳である気泡核の総半径と総気泡核数に対する 2 つのスケーリング指数は双方の系で大きく異なることを導いている。このことから、この 2 つのスケーリング指数が粗大化機構を反映する注目すべきパラメータとなることを結論づけている。

第 5 章は「サイズ分布関数の漸近挙動解析」である。まず、第 4 章で注目したスケーリング指数を介して気泡核のサイズ分布の時間発展則、ひいては気泡核分布の多重スケール構造を明らかにするための指針を述べている。そのうえで、気泡核のサイズ分布の時間発展則を導くために必要となる、気泡核半径の時間変化の定式化を試み、マクロな気泡半径の時間変化を記述する Rayleigh-Plesset 方程式を用いることの有効性と問題点を議論している。

第 6 章は「結論」であり、本論文で得られた主な知見をまとめている。

第 3 章では不凝縮ガスが核生成過程に及ぼす分子レベルでの影響を、分子論的観点に熱力学的観点も加えて統合的に明らかにしており、その学術的成果は非常に大きい。また、第 4 章ではほとんど分かっていなかったメゾスケール領域における気泡核の粗大化過程の一部を明らかにしている点が評価される。第 5 章は発展的な内容であり、気泡核半径の時間変化の定式化には成功していないが、気泡核分布の多重スケール構造を明らかにするうえで必要な課題と指針を明示している点は評価される。このように、本論文はいくつかの先駆的な解析結果とそれに基づく物理的描像、および今後の進むべき方向性を示しており、該当分野における工学的寄与は非常に大きい。

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。