

審査の結果の要旨

氏名 川口 暢

本論文は冷却機器に用いる冷却液の熱伝導率向上を目的として研究がおこなわれているナノ流体をターゲットとし、ナノ流体の熱伝導率向上に向けた、保護膜分子の設計指針を明らかにするために、保護膜を含む固液界面での熱輸送のメカニズムを明らかにすることを目的としている。

固液界面熱抵抗は値が非常に小さいため、通常の工業製品においてはほとんど無視されてきた。しかし、ナノ流体のように固液界面面積の割合が非常に大きい系では影響が無視できず、ナノ流体の熱伝導率向上には固液界面熱抵抗の低減が必須となっている。

これまで、固液界面熱抵抗に影響を及ぼす要因については相互作用力の強さや局所密度などが議論されてきたが、要因同士の関係など統一的なメカニズムは明らかになっておらず、固液界面熱抵抗低減の指針は明かでない。本論文では、ナノ流体における固液界面熱抵抗低減の指針を得るため、分子動力学法を用いて界面熱輸送を基本要素に分析し、メカニズム解明に取り組んでいる。

本論文は「自己組織化単分子膜が固液界面熱輸送特性に与える影響」と題し、全 5 章から構成されている。

第 1 章は「諸論」であり、研究の背景、ナノ流体における界面構造や界面熱抵抗の影響および従来の固液界面熱輸送の研究例を挙げ、さらに固液界面熱輸送のメカニズムを明らかにするための具体的な取り組み内容が述べられており、本研究の位置付けが示されている。

第 2 章は「計算方法」であり、本論文を通じて用いている分子動力学法の基礎、シミュレーションモデルで用いた手法および界面熱輸送特性を明らかにするための計算手法が述べられている。

第 3 章は「自己組織化単分子膜が界面熱コンダクタンスに与える影響の定量評価」として、固体に金、液体にトルエンを用い、自己組織化単分子膜 (Self-Assembled Monolayer, SAM) としてドデカンチオールを修飾した界面 (SAM model) と修飾しない界面 (Bare model) における界面熱コンダクタンスを定量評価し、SAM により界面熱コンダクタンスが向上する可能性を見出している。また、SAM-トルエン間は、その相互作用が弱い分子間力にもかかわらず、局所界面熱コンダクタンスが高いことおよびこの界面における熱輸送のメカニズムを明らかにすることで熱コンダクタンスの高い SAM 分子設計の新たな知見が得られる可能性を示している。

第 4 章は「SAM-トルエン界面熱輸送のメカニズム解明」であり、界面熱コンダクタンス向上に向けた SAM 分子設計指針導出に向け、第 3 章で着目した SAM-トルエン界面における熱輸送のメカニズムを解明している。SAM-トルエン界面では熱輸送に寄与する相互作用の数が多いことおよびそれぞれの相互作用が輸送する熱量が多いことが界面熱コンダクタンス向上に寄与していることを明らかにしている。さらに、これらの熱輸送特性の要因として、SAM 末端の水素原子が金原子と比較して原子の質量が小さいことにより速度が速いこと、固体側の原子の数密度が高いことおよび固体表面への液体分子の吸着性が高いことを挙げている。

第 5 章は「結論」であり、第 3 章、第 4 章で示された、SAM が界面熱コンダクタンス向上に寄与する可能性および界面熱コンダクタンスが向上する SAM 分子の組成および構造の特徴についての知見がまとめられている。

固液界面熱輸送に関する従来の研究では、熱輸送に寄与する要因間の関係は明確になっておらず、界面熱コンダクタンスを向上する SAM 分子の設計指針を得ることはできなかった。本論文では第 4 章において界面熱輸送特性を明らかにする手法を構築し、その結果明らかになった特性を原子レベルの挙動から説明することにより界面熱コンダクタンス向上のメカニズムを明らかにしているところは評価できる。

第 3 章で得られた SAM により界面熱コンダクタンスが向上する可能性および第 4 章で示されたメカニズムはナノ流体の熱伝導率向上に寄与するものであり、工学的な価値が認められる。

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。