

称号及び氏名	博士（工学） 保岡 悠
学位授与の日付	2016年3月31日
論文名	「マイクロ・ナノ間隙流路における壁面近傍流動に関する研究」
論文審査委員	主査 須賀 一彦 教授 副査 高比良 裕之 教授 副査 瀬川 大資 教授

論文要旨

マイクロ・ナノスケールの流れは MEMS/NEMS(Micro/Nano Electromechanical Systems), や μ TAS といったマイクロ流体デバイス内で見られる. またカーボン・ナノチューブ(CNT)で作られた水質浄化や溶質分離のための膜内部でも流動はマイクロ・ナノスケールである. こういったマイクロ・ナノスケールの気体流れでは分子の平均自由行程 λ と代表長さ H の比(λ/H)であるクヌッセン数 (Knudsen number: Kn) が大きくなり, 流動はスリップ領域や遷移領域に類別される. そのような領域では連続体の Navier-Stokes 方程式を満たさない流れとなる. また壁面近傍ではクヌッセン層(Knudsen layer) が現れ, 壁面と流体の界面で速度の滑りや温度ジャンプが生じるなど, 通常のセンチメートル・オーダーの流れとは異なる流動現象が一般に知られている. しかしながら, 同じ Kn であっても H が極めて小さいマイクロ・ナノスケールの流れやモデルに関する知見は分子スケールの効果を含めて未知のことが多く, マイクロ・ナノ流体デバイスの設計, また性能の向上には流動現象やモデルの知見を積み重ねることが重要である.

マイクロ・ナノスケール流れは実験が容易ではなく, 数値解析が特に有効となる. 数値解析手法としてはボルツマン方程式(Boltzmann Equation: BE)を解くものや格子ボルツマン法(Lattice Boltzmann Method: LBM), 分子動力学 (Molecular Dynamics: MD) 法等が用いられる. 数値解析手法のうち, BE は有限差分法やモンテカルロ直接法 (Direct Simulation Monte Carlo: DSMC) などを用いて解を得る. BE を解くには計算コストが非常に大きく, BE の中の衝突項の取り扱いが難しいという問題点がある. LBM は連続体流れの解析手法として確立されたが, 近年ではいくつかの改良により LBM でもマイクロ・ナノスケールの流れを解析する事例が増えてきている. LBM は他の手法に比べて計算アルゴリズムの簡単さや並列性, 計算コストといった利点がある. さらに障害物のある流れに対しても適用することが容易であるため, 工学的な観点から考えて, LBM はマイクロ流れの解析に有望な手法であると考えられる. 一方で MD 法は分子間にポテンシャルを与えることで分子間力を与え,

分子の運動方程式を解くことにより各分子の挙動を計算する手法である。MD 法は分子間のポテンシャルから分子間力を計算するため、分子数が多くなるにつれて計算コストが莫大になる。そのため現在のコンピュータでは非常に狭い、ナノスケール流れの解析しかできないが、分子スケールの流動を再現することができ、他の手法では考慮できないような分子構造の影響を議論することができる。そのため、本研究ではマイクロスケールの解析に対しての LBM モデルの知見を、MD 法を用いた種々の分子スケールの流動解析からナノスケール流動に関する知見をそれぞれ蓄積することを目指した。

本論文は全 6 章で構成されており、概要は以下のとおりである。

第 1 章は序論であり、まずマイクロ・ナノスケールの流れに関する研究背景と解析に用いられる手法について示し、その後、本研究を行うに当たって解析手法として LBM, MD 法を採用した理由を述べている。そして LBM と MD に関する既往の研究について記述している。最後に本研究の目的について述べている。

第 2 章では本研究で用いた LBM と MD 法の計算手法について述べている。まず LBM における速度場と温度場の時間発展方程式について示し、マイクロスケール流れに対応させるための緩和時間の取り扱いについて述べている。また、LBM における巨視的変数の求め方と正規化処理について示し、さらにマイクロスケール流れに対応した境界条件について説明する。次に MD 法における数値積分手法について述べ、ポテンシャルのモデルについて説明している。また系の温度制御法や剛体に対する運動方程式の取り扱い、Kn, 流体の圧力、粘性係数といった値の計算方法について述べている。

第 3 章では LBM に組み込まれる滑り速度モデルについて述べ、3 次元の複雑流動場における滑り速度モデルの影響及び境界条件の補間手法について検討している。結果として正規化処理を行うと速度分布において滑り速度モデル間の差異がないことを確認している。また速度分布は壁面近傍でわずかに振動しており、境界条件の補間手法を用いても振動した速度分布に大きな改善は見られず、単純な線形補間を用いただけでは有効ではなく、さらに検討が必要であることを指摘している。そして工学的には複雑なマイクロ流動場では 1 次滑り速度モデルと連結した Diffusive-bounce back 境界条件が精度、コスト、安定性を含めて最も効果的であると結論付けている。温度場では、既存の Diffuse-scattering 境界条件では Fourier 流れにおける温度ジャンプの過剰評価が見られたため、壁温境界条件と組み合わせた新境界条件を導出している。また 2 次元角柱周り流れにおいて速度場同様、正規化処理を行わない場合に不連続な温度分布が確認されたため正規化処理を行い、不連続分布の改善を行った結果、新境界条件により、Fourier 流れにおいて温度ジャンプの予測を改善できることを報告している。また正規化処理により、角柱周り流れにおける不連続な温度分布も改善され、よい一致が得られることを確認している。

第 4 章ではナノチャネル内部の流動を MD 法を用いて解析し、壁面近傍の流動特性と、壁面結晶構造、表面分子構造の影響について議論を行っている。ダイヤモンドチャネル内の気体アルゴンの流れを解析し、壁面近傍での単原子分子の流動特性について調べた結果、気体分子の統計的な速度分布には壁面最近傍点で速度分布が高くなる鉤状の分布が得られることを指摘している。これはチャネル中心のコア領域の流体分子が時折、壁面近くの吸着分子層を通り過ぎて速い速度で壁面原子と衝突することで、壁面の原子とわずかに深く衝突するために起こると結論付けている。また、二原子分子である酸素分子の流動でもジャンプ・アップ比は小さくなるが壁面近傍でアルゴン分子の流れと同様に鉤状の速度分布が得られることを指摘している。さらに流れに対する温度の影響について調べ、高温のケースでは壁面の振動が増え、それが摩擦につながるために速度分布は小さくなるが、このケースでも鉤状の分布が得られることを確認している。次に調べた壁面分子構造の違いによる流動特性では、気体流れにおいても速度分布は壁面の分子構造レベルの粗さの影響を受けることが分かり、また壁面近傍で密度のピークが一層でき、その結果、速度分布の曲率は壁面近傍で大きくなる現象が見られることを確認している。さらに、壁面原子間の結合距離の影響を調べ、速度分

布は結合距離の変化による表面の粗さと引力の増加による壁面への吸着の両方が影響していることが確認された。ダイヤモンド構造とグラファイト構造では壁面の密度が大きい場合、表面の粗さよりも吸着の効果が流れに支配的な影響を及ぼすことが示されている。また、グラファイト構造のチャンネル流れに対して、アルゴン分子と炭素原子の LJ ポテンシャルを用いた流体-壁面相互作用で流れを計算した結果、この構造では壁面での吸着が抑えられると同時に表面が滑らかであるため、高い速度分布が得られることを確認している。

第 5 章では MD 法によりアームチェア型の(6,6)-(160,160) の CNT 内の液体アルゴンの流動を調べ、高速輸送のメカニズムについて議論している。MD 法で得られた速度分布のプロットは一般にばらつきがあるため、滑り長さを求めるためには分布をフィッティングする必要があり、本論文では密度分布を考慮した運動量式を積分することで速度分布のフィッティングを行う手法を新たに提案している。この方法により妥当な速度分布が得られることを示し、得られた滑り長さや流量増幅比に関する議論により、CNT の直径増加に伴い、流動は三段階の遷移プロセスを経てバルク的特性に変化していくことを示している。これらは流体分子が CNT 内で管径に対応して規則正しく並んだクラスター構造を形成することがあり、これが CNT の直径に対応して構造遷移を起こしているためであると結論付けている。第一構造遷移は(8,8)で起こり、この時、流体分子は単鎖構造から単層構造に遷移するが、第二、第三構造遷移はそれぞれ(10,10)、(15,15)と(17,17)の間で起こり、層の数が増える起点となる分子の数密度分布が CNT の中心軸にピークを持つ時に起きることを指摘している。これに対応して滑り長さや流量増幅比は急な減少を示すのである。

第 6 章は結論であり、これまでに得られた結果をまとめ総括している。

審査結果の要旨

本論文は、マイクロ細孔内熱流動に関する工学的計算手法の確立と新手法の提案、およびナノ細孔内流動に関し、数値解析を用い詳細な流動の物理特性を解明したものであり、以下の成果を得ている。

- (1) 相似則が成立する範囲のマイクロ熱流動現象に対し、格子ボルツマン法を適用する際の新しい熱的壁面条件を導出し、複雑流動場でその有効性を検証した。
- (2) 分子動力学法を用いて、気体の壁面境界流動現象を分子スケールで解析し、これまでに知られていなかった、壁面での鉤状すべり速度分布を発見し、その物理を説明した。
- (3) 分子動力学法を用いて、壁面を構成する材料の結晶構造が気体流動に及ぼす効果を詳細に議論し、壁面分子の密度や吸着効果と流動特性の関係を明らかにした。
- (4) カーボンナノチューブ内の液体流動機構を分子動力学法で解析し、流体分子とナノチューブ径との関係で、断面内に配置される分子の幾何的状态の変化によって、流動が大きく影響を受けることを確認し、液体分子の単鎖構造から単層構造に移る際と単層から二重層構造に移る際、二重層から三重層構造に移る際の三段階に顕著な流量変化があることを発見した。

以上の研究成果は、マイクロ熱流動の工学的数値解析の精度や応用範囲を広げたばかりでなく、ナノ流体物理の基本的理解を広げており、機械工学分野の発展に対する貢献度を高く評価できる。また、申請者が自立して研究活動を行うのに必要な能力と学識を有することを証したものである。