

卒業論文

分子動力学法による相界面熱抵抗の研究

通し番号 1-49 完

平成 11 年 2 月 5 日 提出

指導教官

庄司 正弘 教授

丸山 茂夫 助教授

70264 安井康二

第 1 章	序論	4
1.1	研究の背景	5
1.2	分子運動のシミュレーション	7
1.3	研究の目的	8
第 2 章	計算方法	9
2.1	分子間のポテンシャル	10
2.1.1	Lennard-Jones ポテンシャル	10
2.1.2	固体壁面分子間ポテンシャル	12
2.2	カットオフ	13
2.3	計算の手順	14
2.4	時間刻み	15
2.4.1	L-J ポテンシャル系	15
2.4.2	Harmonic ポテンシャル系	16
2.4.3	Multiple time step 法	16
2.5	周期境界条件	17
2.6	初期条件	19
2.6.1	初期速度	19
2.7	温度制御	20
2.7.1	スケーリングによる温度制御	20
2.7.2	Phantom 分子による温度制御	20
第 3 章	相変化を伴う系	22
3.1	計算条件	23
3.2	計算結果及び考察	25
第 4 章	固液系	30
4.1	はじめに	31
4.2	計算条件	32
4.3	計算結果及び考察	34
4.3.1	パラメータによる熱抵抗の変動	34
4.3.2	$\tau_S$ と $\tau_{Ar}$ との相関	37
4.3.3	$\tau_{AS}$ と $\tau_{Ar}$ との相関	41

第 5 章 結論.....45

謝辭

参考文献

## 第1章 序論

## 1.1 研究の背景

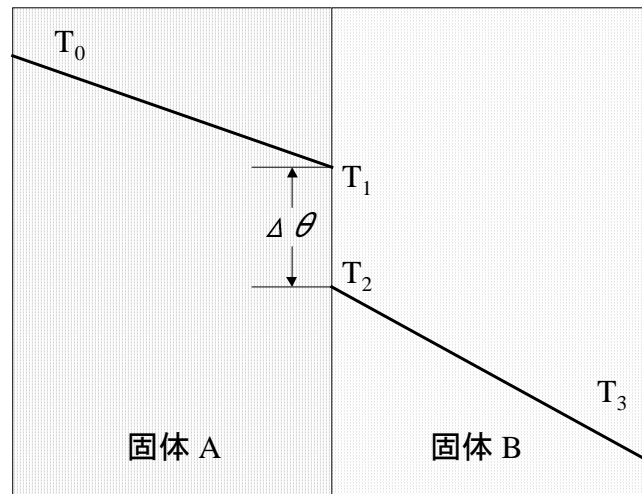


図 1-1 接触熱抵抗

マクロな系の伝熱工学において，相違なる固体表面間の接触熱抵抗はしばしば重要な問題として取り上げられる．互いに接触する固体内を熱が伝わる時，温度分布は一般に，図 1-1 のように接触面で不連続な温度ジャンプ  $\Delta$  [K]を生じる．接触面を単位面積，時間あたりに通過する熱量  $q$  [W/m<sup>2</sup>]に対し，次式で表される  $R$  を接触熱抵抗（contact resistance）という．

$$R = \frac{\Delta\theta}{q} \text{ [m}^2\cdot\text{K/W]} \quad (1.1)$$

接触面にこのような熱抵抗が生ずる原因は，実際の固体表面にはうねりと表面粗さが存在し，下図に示すように伝熱に寄与する真実接触面積が見かけの接触面積よりも小さいためである．

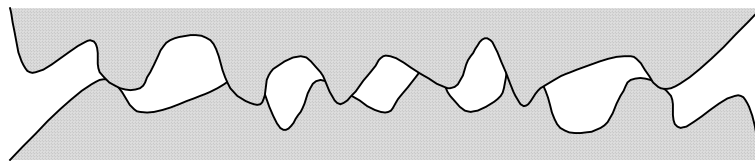


図 1-2 固体接触面

マクロな系において伝熱現象を取り扱う場合，固体表面間の接触熱抵抗が総括的な伝熱量を決定づけることが少なくないが，固体と液体の界面には特別にこのような接触熱抵抗を考慮することはない．ところが，系の大きさが小さくなり，熱伝導における熱抵抗が比較的小さくなっていくとわずかな熱抵抗でも極めて意味を持つようになってくる．後述の分子動力学法による固体，液体を通じた伝熱のシミュレーションによって，固液界面には固体間と同様，熱抵抗が存在する結果が得られた．熱抵抗の原因として，固体分子と液体分子の振動の不調和や分子間の相互作用など，いろいろな要因が考えられるため，支配要因を特定するのは非常に困難である．そのため，本研究では，分子をバネマス系と仮定したときの固有振動数の違いに焦点を絞った．図 1-3 のようなモデルを考える．

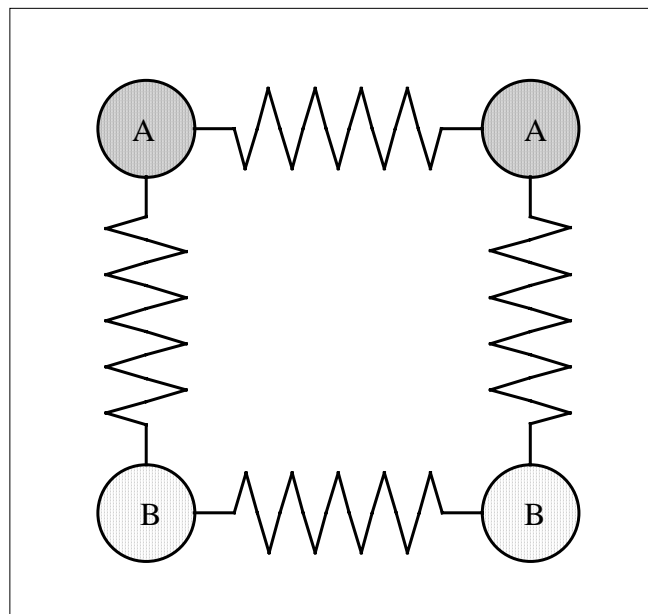


図 1-3 バネマスモデル

2つの物質間の熱伝導を単純に図 1-3 のようなモデルで置き換えられるとすればそれぞれの固有振動数のずれが熱抵抗をもたらしているのではないかと考えた．もしそうであるならば固有振動数をすべて合わせれば，熱抵抗はなくなる，もしくは小さくなるはずである．

## 1.2 分子運動のシミュレーション

近年，計算機の性能が飛躍的に向上したため，コンピュータを用いたシミュレーションは盛んに行われている．分子運動のシミュレーションもその一つで，特にそれまで実験できなかつたような分子レベルの現象に有効な研究方法として，その応用範囲は急速に広まっている．その代表的な手法を二つ述べる．

まず一つ目に，分子動力学法が挙げられる．分子動力学法は，分子の運動に対してニュートンの運動方程式をたて，数値的に解いて調べる手法である．

そして二つ目は，モンテカルロ法と呼ばれる手法である．モンテカルロ法は，計算機で発生させた乱数による確率過程に従って，分子の位置を次々と変えていく手法である．分子動力学法（MD）とモンテカルロ法（MC）は互いによく似ているが，相違点を簡潔にまとめると以下のようなになる．

- MC では時間に依存する量が求められないが，MD では求められる．
- MD では古典力学に則った現象しか計算できない．
- MC では温度一定の条件が，MD では内部エネルギー一定の条件が実現しやすい．
- MD はステップを重ねていくと誤差が蓄積されていくが，MC は試行をを繰り返すほど精度が良くなる．

以上のように，どちらの方法にも一長一短はあるが，それぞれに同じポテンシャルを用いて計算すると同様な結果が得られる．本研究では，時間の経過を追っていける分子動力学法を用いた．

### 1.3 研究の目的

分子動力学法により，固体壁面間に挟まれる液体の系をシミュレーションし，ミクロスケールにおける相界面熱抵抗について検討する．具体的には，気液系としてアルゴンを用い，固液相界面における熱抵抗を，分子の振動運動における固有振動数との相関関係により，整理，評価することを目的とした．



## 第2章 計算方法

## 2.1 分子間のポテンシャル

本研究ではアルゴン分子間，上壁面分子間，下壁面分子間，アルゴン-上下壁面分子間の合計 5 種類の分子間ポテンシャルを考慮する必要がある。

### 2.1.1 Lennard-Jones ポテンシャル

上に挙げた 5 種類の分子間ポテンシャルの内，壁面分子間ポテンシャル以外には，non-polar 分子のポテンシャルとして広く用いられている Lennard-Jones ポテンシャル（以後 L-J ポテンシャルと略す。）を用いる。L-J ポテンシャルは分子間距離  $r$  の一価関数として以下のように表せる。

$$\phi(r) = 4\varepsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \quad (2.1)$$

$\varepsilon$  はエネルギーのパラメータでありポテンシャルの谷の深さ， $\sigma$  は長さのパラメータであり見かけの分子径を表す。 $\varepsilon$ ， $\sigma$  の値は実験値から決定される。例として Ar 分子同士のポテンシャルのパラメータを挙げる。

$$\varepsilon_{\text{Ar}} = 1.67 \times 10^{-21} (\text{J}) \quad (2.2)$$

$$\sigma_{\text{Ar}} = 3.40 \times 10^{-10} (\text{m}) \quad (2.3)$$

L-J ポテンシャルの概形を図 2-1 に示す。

図 2.1 から  $r = \sqrt[6]{2}$  より近いと斥力，遠いと引力をうけることがわかる

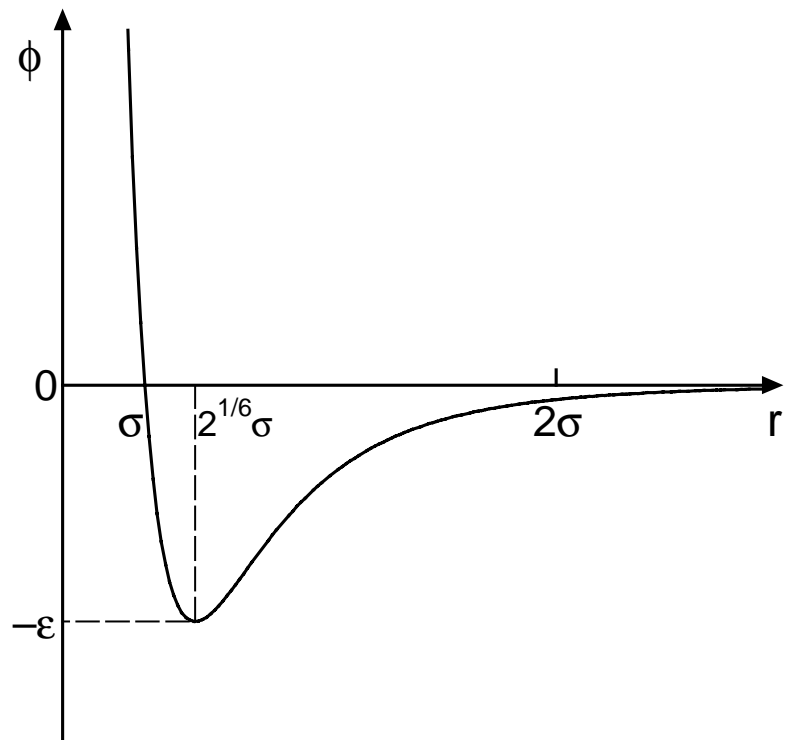


图 2-1 Lennard-Jones potential

## 2.1.2 固体壁面分子間ポテンシャル

固体壁面分子は、振動範囲が小さいため、バネマス系として近似することが出来る。最近接分子との相互作用のみを考慮したバネマス分子として表現できる。すなわち固体壁面分子間相互作用はバネ定数を  $k$ 、固体結晶における最近接分子間距離を  $\sigma_s$  として、

$$\phi(r) = \frac{1}{2}k(r - \sigma_s)^2 \quad (2.4)$$

という harmonic ポテンシャルで記述できる。なお本研究では、第 3 章の計算では壁面分子は白金を想定して、質量  $m_s = 3.24 \times 10^{-24}$  kg、 $k = 46.8$  N/m、 $\sigma_s = 2.77$  Å としている。第 4 章では下壁面分子は前述の値で固定し、上壁面分子は  $\sigma_s = 2.77$  Å は固定したが、その他は条件によって値を変化させている。

## 2.2 カットオフ

Lennard-Jones ポテンシャルは分子間距離の 6 乗に反比例する。また一般に等方的な系では 1 つの分子に対して距離  $r \rightarrow r+dr$  の球殻の内部に存在する分子の数は  $r$  の 2 乗に比例する。そのため Lennard-Jones ポテンシャルによる力の和は距離の増加にともなって収束する。そこで実際の計算では Lennard-Jones ポテンシャルに関して、あるカットオフ距離  $r_c$  で計算をうち切り、計算負荷を軽減した。しかし単純にうち切るのみでは  $r_c$  の位置でポテンシャルが不連続となり、エネルギー保存が成り立たなくなる。そこで  $r_c$  の位置で値が 0 となるようにシフトさせたポテンシャルがしばしば用いられる。

$$\phi_S(r) = 4\epsilon \left[ \left\{ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right\} - \left\{ \left( \frac{\sigma}{r_c} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r_c} \right)^6 \right\} \right] \quad (2.5)$$

しかしこのポテンシャルでは、 $r_c$  の位置で力が不連続となってしまう。そこで、 $r_c$  の位置で微分の値も 0 となるようなポテンシャル

$$\phi_{SF}(r) = 4\epsilon \left[ \left\{ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right\} + \left\{ 6 \left( \frac{\sigma}{r_c} \right)^{12} - 3 \left( \frac{\sigma}{r_c} \right)^6 \right\} \left( \frac{r}{r_c} \right)^2 - \left\{ 7 \left( \frac{\sigma}{r_c} \right)^{12} - 4 \left( \frac{\sigma}{r_c} \right)^6 \right\} \right] \quad (2.6)$$

$$\frac{d\phi_{SF}(r)}{dr} = -24\epsilon \left[ \left\{ 2 \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right\} \frac{1}{r} + \left\{ 2 \left( \frac{\sigma}{r_c} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r_c} \right)^6 \right\} \frac{r}{r_c^2} \right] \quad (2.7)$$

を使用した。本研究では、現実的に計算時間との兼ね合いで妥協できる値として  $r_c = 3.5\sigma$  を採用した。

## 2.3 計算の手順

分子動力学法では、各分子の挙動を Newton の運動方程式に従う質点の運動として扱う。このとき分子  $i$  に関するある時刻  $t$  における運動方程式は、分子  $i$  に働く力を  $F_i(t)$ 、質量を  $m_i$ 、位置ベクトルを  $r_i(t)$  とすると、

$$F_i(t) = m_i \frac{d^2}{dt^2} r_i(t) \quad (2.8)$$

となる。分子動力学法では、この運動方程式を数値積分し、 $r_i(t)$  を計算する。数値積分の方法としては、計算時間、精度の兼ね合いを考えて、蛙飛び法を用いる。実際の計算の順を追ってみる。分子  $i$  の全ポテンシャルエネルギーを  $\phi_i$  とすると、

$$F_i(t) = -\frac{\partial \phi_i}{\partial r_i} \quad (2.9)$$

により、 $F_i(t)$  が求まる。これにより速度が

$$v_i \left( t + \frac{\Delta t}{2} \right) = v_i \left( t - \frac{\Delta t}{2} \right) + \frac{\Delta t F_i(t)}{m_i} \quad (2.10)$$

と求まり、最後に  $\Delta t$  後の分子  $i$  の位置ベクトルが

$$r_i(t + \Delta t) = r_i(t) + \Delta t v_i \left( t + \frac{\Delta t}{2} \right) \quad (2.11)$$

と求まる。これを繰り返していけば、分子  $i$  の軌跡がわかる。

## 2.4 時間刻み

### 2.4.1 L-J ポテンシャル系

L-J ポテンシャルなど二分子間の距離  $r$  に対してポテンシャルが  $r/\sigma$  の関数で表される場合、運動方程式を無次元化することで時間刻み  $\Delta t$  についての基準が得られる。一般にポテンシャルが  $\varepsilon \cdot \Phi(r/\sigma)$  で表される場合、一次元の運動方程式は

$$-\varepsilon \frac{\partial \Phi(r/\sigma)}{\partial r} = m \frac{d^2 r}{dt^2} \quad (2.12)$$

となる。ここで無次元距離  $r' = r/\sigma$ 、無次元時間  $t' = t/\tau$  を用いると

$$-\frac{\partial \Phi(r')}{\partial r'} = \frac{m\sigma^2}{\varepsilon\tau^2} \frac{d^2 r'}{dt'^2} \quad (2.13)$$

となる。ここで両辺の微分項を 1 としてオーダーを比較すると

$$\frac{m\sigma^2}{\varepsilon\tau^2} = 1 \quad (2.14)$$

となるので

$$\tau = \sqrt{\frac{m\sigma^2}{\varepsilon}} \quad (2.15)$$

として時間スケール  $\tau$  が求まる。この  $\tau$  は  $r' = 1$  となるのに要する時間のオーダーであるので、時間刻み  $\Delta t$  は  $\tau$  に対して差分誤差が出ない程度のオーダーに設定する必要がある。本研究で用いたパラメータでは  $\tau = 2.1 \times 10^{-12}$  である。従って  $\Delta t = 1.0 \times 10^{-14}$  (s) とした。

## 2.4.2 Harmonic ポテンシャル系

Harmonic ポテンシャルの極小点での二階微分の値が , Lennard-Jones ポテンシャルのそれと一致するとすると ,

$$k = \left( \frac{d^2 \phi_{L-J}(r)}{dr^2} \right)_{r=\sqrt[6]{2}\sigma_s} = \frac{72\varepsilon_s}{\sqrt[3]{2}\sigma_s^2} \quad (2.16)$$

となる . これと(2.17)式より ,

$$\tau_s = \sqrt{\frac{72m_s}{\sqrt[3]{2}k}} \quad (2.17)$$

となり , 本研究のパラメータを代入すると ,  $\tau_s = 6.3 \times 10^{-13}$  s である . 従って  $\Delta t_s = 5.0 \times 10^{-15}$  s とする .

## 2.4.3 Multiple time step 法

前述の時間刻みの考察によると Lennard-Jones 系であるアルゴン分子の時間刻みは , Harmonic 系である固体壁面分子の時間刻みの 2 倍であり , 固体壁面分子の時間刻みでアルゴン分子の作用を計算するのは , 計算時間上好ましくない . そこでアルゴン分子の作用と固体壁面分子の作用を異なる時間刻みで計算する以下のような差分展開を行った .

$$\mathbf{v}_s \left( t - \frac{\Delta t_s}{2} \right) = \mathbf{v}_s \left( t - \frac{\Delta t_s}{2} \right) + \Delta t_{AR} \frac{\mathbf{F}_{S,AR}(t)}{m_s} \quad (2.18)$$

$$\mathbf{v}_{AR} \left( t + \frac{\Delta t_{AR}}{2} \right) = \mathbf{v}_{AR} \left( t - \frac{\Delta t_{AR}}{2} \right) + \Delta t_{AR} \frac{\mathbf{F}_{AR}(t) + \mathbf{F}_{AR,S}(t)}{m_{AR}} \quad (2.19)$$

$$\mathbf{x}_{AR}(t + \Delta t_{AR}) = \mathbf{x}_{AR}(t) + \Delta t_{AR} \mathbf{v}_{AR} \left( t + \frac{\Delta t_{AR}}{2} \right) \quad (2.20)$$

$$\begin{array}{l} \text{2steps} \\ \left[ \begin{array}{l} \mathbf{v}_s \left( t + \frac{\Delta t_s}{2} \right) = \mathbf{v}_s \left( t - \frac{\Delta t_s}{2} \right) + \Delta t_s \frac{\mathbf{F}_s(t)}{m_s} \\ \mathbf{x}_s(t + \Delta t_s) = \mathbf{x}_s(t) + \Delta t_s \mathbf{v}_s \left( t + \frac{\Delta t_s}{2} \right) \end{array} \right. \end{array} \quad (2.21)$$

$$\text{但し } \Delta t_{AR} = 2\Delta t_s \quad (2.22)$$



## 2.5 周期境界条件

物質の諸性質を考えると、通常のマクロな性質を持つ物質には $10^{23}$ 個程度の分子が含まれることになるが、計算機でこれらすべてを取り扱うのは実現的でない。そこで、一部の分子を取り出してきて立方体の計算領域（基本セル）の中に配置するが、ここで境界条件を設定する必要がある。一般に物質は表面付近と内部とでは異なる性質を示すため、表面の影響のない内部の状態（バルク状態）をシミュレートしようとする。表面の影響を無視できる程度の多数の分子を用いたマクロな系を構成し、その内部に関して性質を調べなければならない。しかし周期境界条件を用いれば表面の影響のない内部の状態をマクロな系に比べて圧倒的に少ない分子数で表現できる。

周期境界条件では、基本セルの周りすべてに基本セルと全く同じ運動をするイメージセルを配置する。（図 2-2 は、二次元平面内の場合を表す）

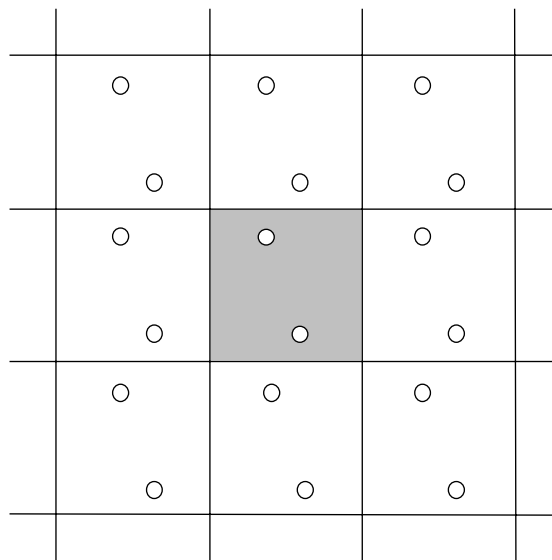


図 2-2 基本セルとイメージセル

基本セル内から飛び出した分子は反対側の壁から同じ速度で入ってくる。また、基本セル内の分子には基本セル内だけではなくイメージセルの分子からの力の寄与も加え合わせる。このような境界条件を課すと計算領域が無限に並ぶことになり、これによって表面の存在しないバルクの状態が再現できたといえる。

実際の計算においては、計算時間の短縮、空間等方性の実現のため、分子  $i$  に加わる

力を計算する際，分子間距離  $r$  がカットオフ距離  $r_c$  より離れた分子  $j$  からの力の寄与は無視する。(図 2-3)

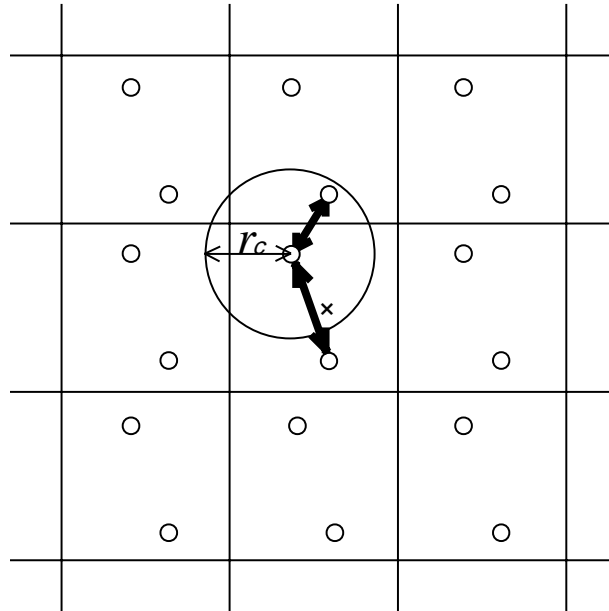


図 2-3 力の計算

ここまでの周期境界条件の一般的な内容である．これに対し，本研究では鉛直方向には周期境界を設けず，上下面は壁面とした．

## 2.6 初期条件

分子動力学法の計算を行う際，初期条件として分子の位置と速度を与える．この初期条件は目的とする系の状態に合わせて適切に設定をする必要がある．

### 2.6.1 初期速度

本研究に用いた全ての分子の初期速度  $v_0$  の大きさは，初期温度  $T_0$  から求められる運動エネルギーをそれぞれの分子に等しく分配することで，

$$v_0 = \sqrt{\frac{3k_b T_0}{m}} \quad (2.23)$$

として求めた． $k_b$  はボルツマン定数， $m$  は分子の質量である．それぞれの方向成分は， $v_0$  の大きさを一定に保ったまま乱数を用いて決定した．

## 2.7 温度制御

### 2.7.1 スケーリングによる温度制御

分子動力学法の計算では、系は力学系として保存されている。よって、内部エネルギーが一定の系において、数値計算の誤差がなければ系の全体のエネルギーは一定に保たれる。従って、系の全運動エネルギーの平均として計算される温度は、全ポテンシャルエネルギーの変動に影響される。初期配置で分子はポテンシャルエネルギーが低い状態におかれているため、計算開始直後にポテンシャルが急激に高くなる。もし温度制御を行わなければ、系の全エネルギーは一定なので運動エネルギーは急激に下がり、温度も目標値から大きく離れてしまう。そこで、設定温度を  $T_0$ 、温度を  $T$  とすると、各分子の速度を

$$v' = v \sqrt{\frac{T}{T_0}} \quad (2.24)$$

と  $v$  から  $v'$  へ補正することで、設定温度を保つようにする。この補正を行っている間は系の全体エネルギーは保存されない。

### 2.7.2 Phantom 分子による温度制御

上記のスケーリングによる温度制御では、分子の速度に直接手を加えることになり、正確な熱の伝達を表現することは出来ない。そのため、固体壁面分子の外側に Phantom 分子を配置し、Phantom 分子に力を加えることによって一定温度に保たれた熱浴を擬似的に実現した。模式図を下に示す。壁面分子と Phantom 分子はバネ、固定分子と Phantom 分子はバネとダンパで結ばれており、垂直方向バネ定数、水平方向バネ定数、減衰定数は図 2-4 の通りである。本研究で用いている白金のパラメータは、

$$= 5.18 \times 10^{-12} \text{ kg/s}$$

$$k = 46.8 \text{ N/m}$$

である。

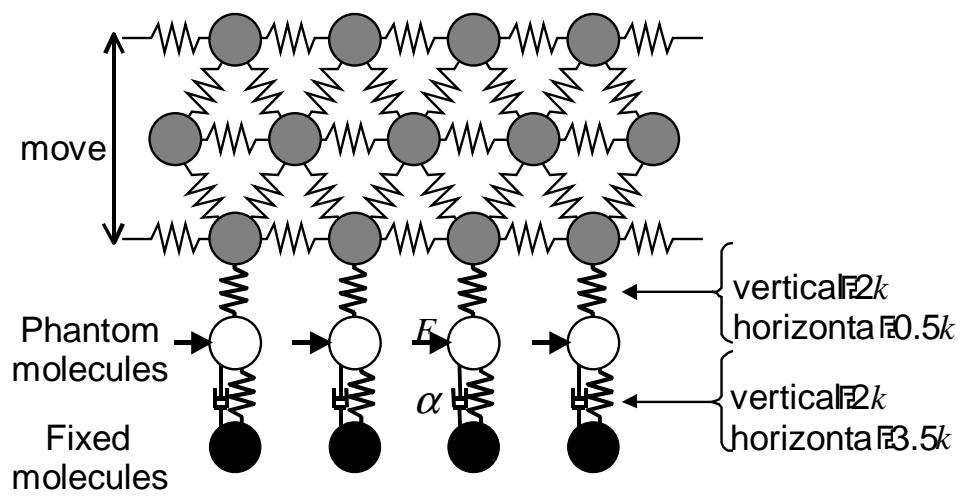


図 2-4 Phantom による温度制御

### 第3章 相変化を伴う系

ここでは、上下に固体壁面を配置し、その内側に液体、中央に蒸気を置いた系を考える(図 3-2). 中央の蒸気相を考えることにより自然に発達する気液界面をつくり、飽和蒸気、飽和液体の状態での測定を目指した.

考慮すべきパラメータはたくさんあるが、ここでは壁面分子とアルゴン分子間の L-J ポテンシャルのパラメータ  $\epsilon_{int}$  を  $0.527 \times 10^{-21}(\text{J})$  から  $1.169 \times 10^{-21}(\text{J})$  まで変化させ、熱抵抗の大きさを評価した.

### 3.1 計算条件

表 3-1 計算条件

計算領域	$55.4 \times 52.8 \times 213.6 (\text{\AA}^3)$
初期温度	110 (K)
上壁面温度	100 (K)
下壁面温度	120 (K)

上記の領域にアルゴン分子を上下に 2048 個ずつ fcc 構造で配置し、系全体を初期温度 110(K) で 500(ps) 温度制御を行った後、phantom 分子の温度制御(110K) で平衡状態に至るまで 1000(ps) 計算した. その後、下壁面を 120(K)、上壁面を 100(K) に phantom 分子によって温度制御を行い、4000(ps) 計算した. 図 3-1 に系の模式図をあらわす.

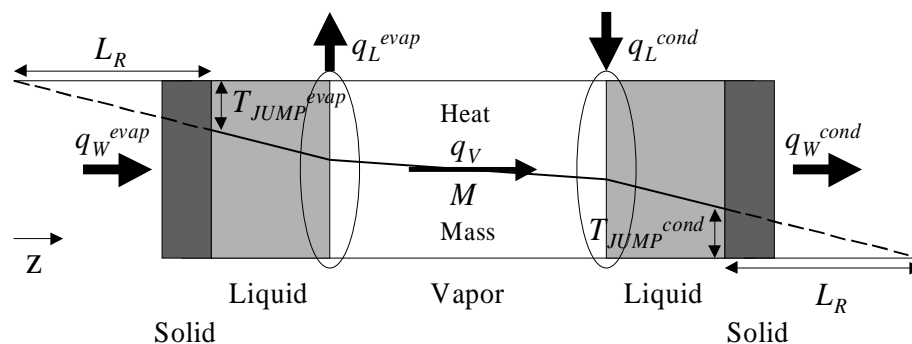


図 3-1 系の熱の流れ

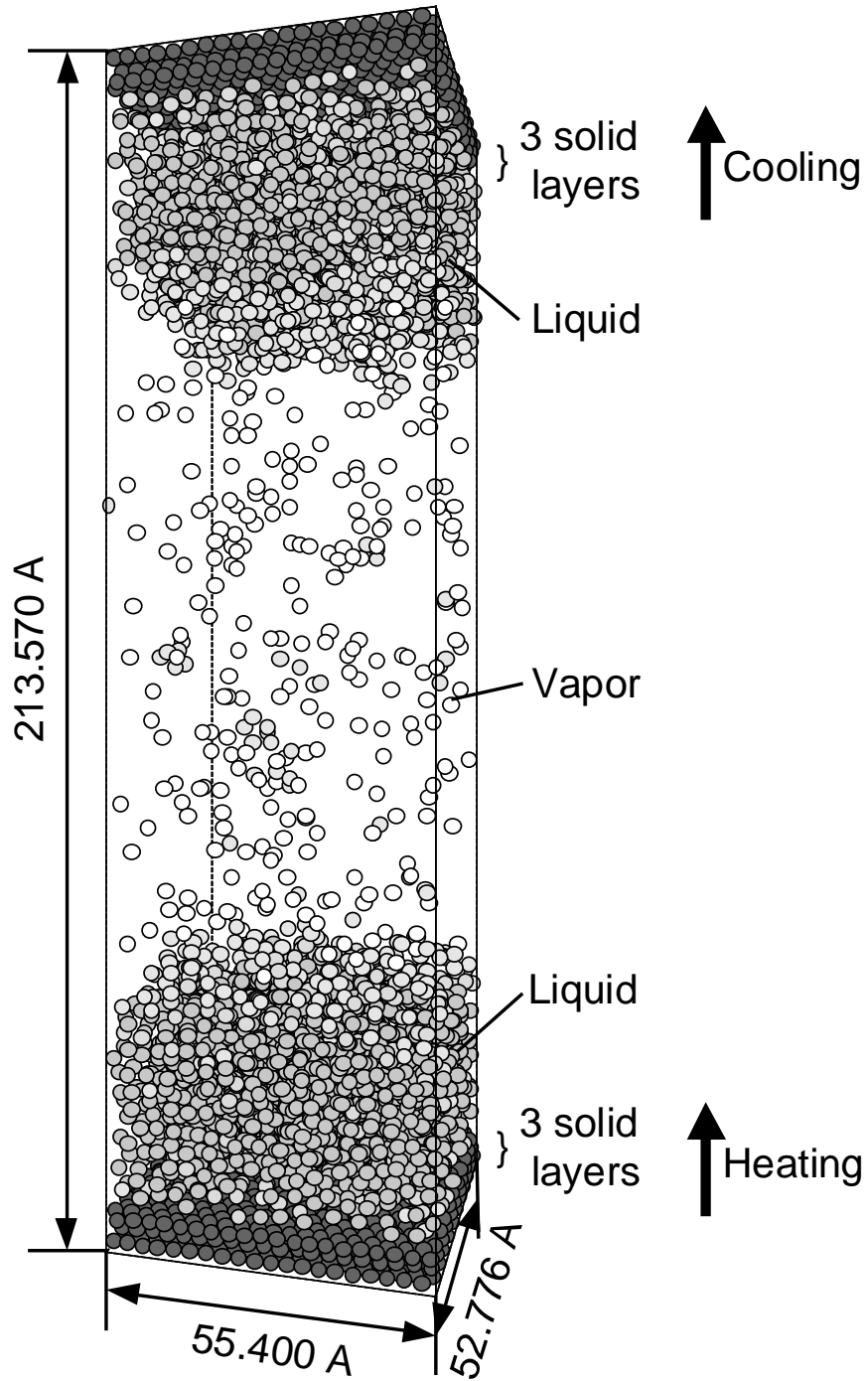


図 3-2 計算モデル



## 3.2 計算結果及び考察

$\epsilon_{int} = 0.688 \times 10^{-21}$  (J)における蒸発(evap.)、凝縮(cond.)側の壁面(S)、液体(L)、気体(V)の各温度  $T$  と分子数  $N$ 、及び中央の気体部分で計測した熱流束  $q_v$  の時間変化を図 3-3 に示す。1000ps で上下壁面に温度差を付けると、熱流速が徐々に増加し、およそ 2000ps で一定に落ち着く。蒸気分子数は  $N_v$  は終始ほぼ一定で、蒸発側液体分子数  $N_v^{evap}$ 、凝縮側液体分子数  $N_L^{cond}$  を確認すると、ちょうど  $N_v^{evap}$  の減少分が  $N_L^{cond}$  の増加分になっているのがわかる。 $N_v^{evap}$  と  $N_L^{cond}$  の変化はほぼ扇形であり、およそ 2000ps 以降では一定の時間割合で蒸発と凝縮が起こっていると考えられる。気体の平均温度は分子数が少ないため、大きなばらつきが生じているが、ほぼ一定値を保っている。固体面の平均温度と液体温度もおよそ 2000ps 以降では一定値に落ち着き、定常状態となっていることがわかる。そこで、2000ps 以降 5000ps までのデータを解析に用いることにした。

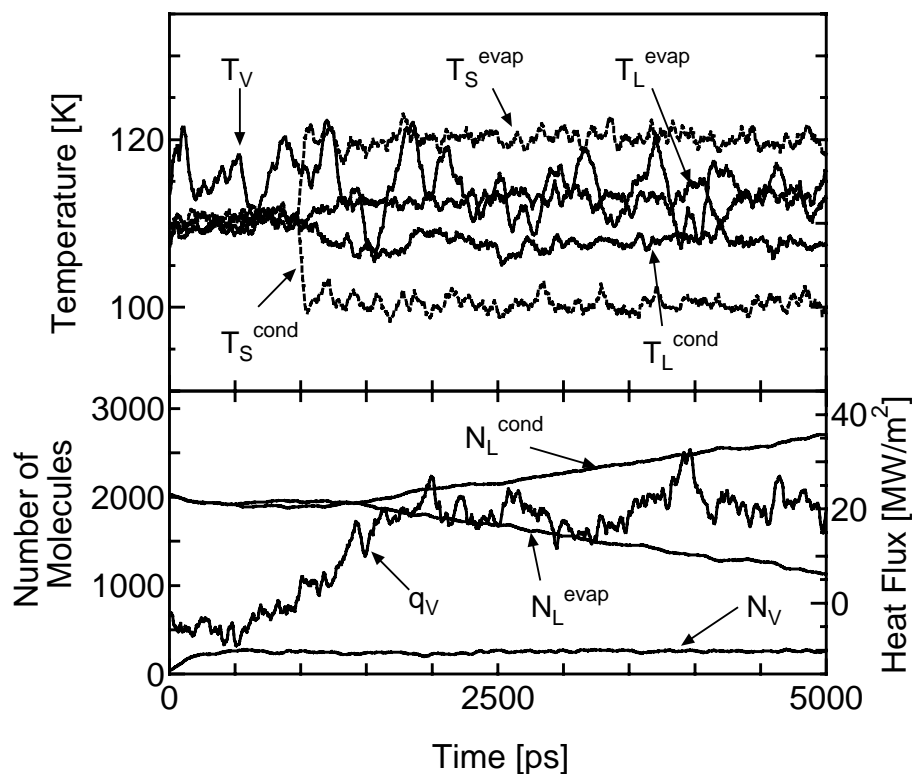


図 3-3 温度，分子数，熱流束の変化

図 3-4 は、ちょうど 2000ps の時点から 0 とし、ここから phantom 分子に入力したエネルギーの累積値を示したグラフである。エネルギーは一定速度で増加しており、その傾きが壁面での熱流束  $q_w$  となる。

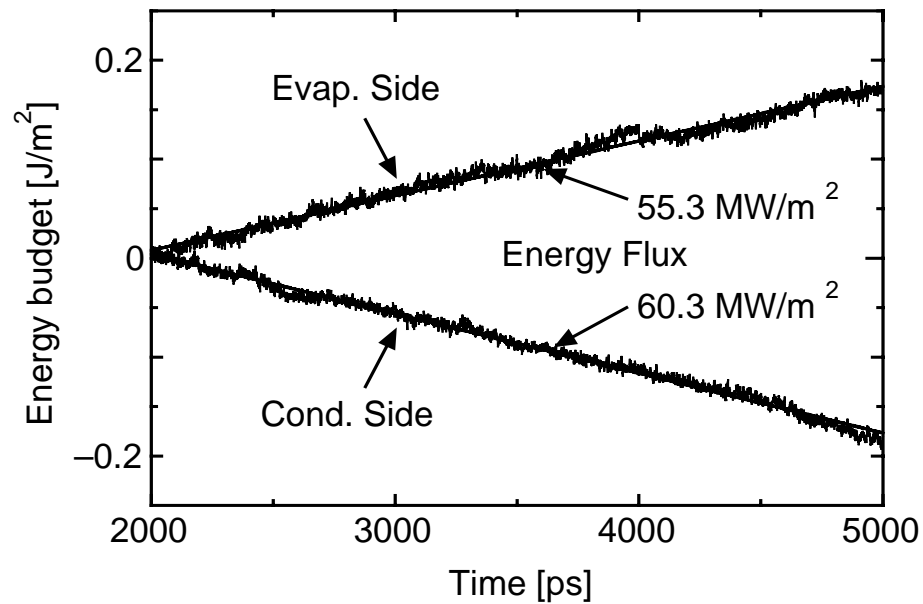


図 3-4 エネルギーの累積値

2000ps から 5000ps までの平均数密度分布、温度分布、および  $z$  方向速度成分を図 3-5 に示す。なお数密度分布に関しては、2000ps、3500ps、5000ps における 100ps 間の短時間平均も同時に示す。

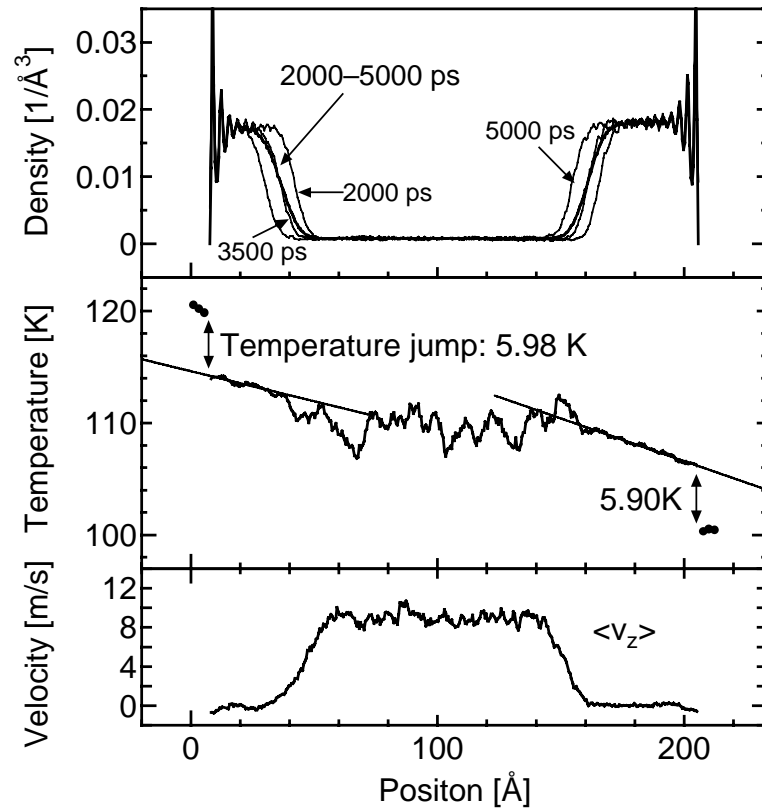


図 3-5 数密度，温度分布，速度分布

100ps という比較的短い時間においての平均数密度分布は 2000ps から 5000ps までの数密度分布よりわずかに急峻ではあるが，時間平均によってもそれほど変化していないことがわかる．温度分布については，気相液相は実線で，固体壁面の各層の温度は点であらわしてある．このグラフから，壁面と液体の境界で大きな温度ジャンプがあることが明らかである．この温度ジャンプ  $T_{jump}$  と，Fig\_で求めた熱流束  $q_w$  から固液界面における熱抵抗  $R_T$  を求めた．この操作を  $_{int}=0.527 \times 10^{-21}(\text{J}) \sim 1.169 \times 10^{-21}(\text{J})$  で行い，表にまとめたものが表 3-2 である．

表 3-2 パラメータと諸量

Label	$\varepsilon_{INT}$ ( $\times 10^{-21}$ J)	$q_w$ (MW/m <sup>2</sup> )	$T_{JUMP}$ (K)	$R_T$ (m <sup>2</sup> ·K/W)	$\lambda_L$ (W/m·K)	$L_R$ (nm)	$dN_L/dt$ (1/ns)	$q_L$ (MW/m <sup>2</sup> )	$q_v$ (MW/m <sup>2</sup> )	M (kg/m <sup>2</sup> ·s)	
E2	evap.	0.527	34.0	8.45	$0.249 \times 10^{-6}$	0.072	18.0	-119	37.9	10.7	254
	cond.		31.3	6.32	$0.202 \times 10^{-6}$	0.065	13.0	119	37.6		
E3	evap.	0.688	55.3	5.98	$0.108 \times 10^{-6}$	0.103	11.1	-214	68.0	20.3	489
	cond.		60.3	5.90	$0.098 \times 10^{-6}$	0.079	7.7	208	66.1		
E4	evap.	0.848	65.3	5.76	$0.088 \times 10^{-6}$	0.091	8.0	-248	78.6	19.2	541
	cond.		64.8	4.91	$0.076 \times 10^{-6}$	0.086	6.5	249	78.9		
E5	evap.	1.009	72.3	4.62	$0.064 \times 10^{-6}$	0.052	3.3	-273	86.7	24.9	569
	cond.		74.1	4.32	$0.058 \times 10^{-6}$	0.072	4.2	268	85.0		
E6	evap.	1.169	89.7	4.87	$0.054 \times 10^{-6}$	0.100	5.4	330	104.8	28.5	725
	cond.		90.5	3.67	$0.041 \times 10^{-6}$	0.097	3.9	321	102.0		

$\varepsilon_{int}$  を大きくしていくに従って  $R_T$  が小さくなっているのがわかる。  $\varepsilon_{int}$  が大きくすると固体壁面分子とアルゴン分子の間のポテンシャルが強くなるので、この結果から分子間力が大きくなると熱抵抗が小さくなるということが実測できたと言える。

また、液体部分の温度勾配と熱流束  $q_w$  から熱伝導率  $\lambda_L$  が求まるが、各計算でかなりばらつきがある（表 3-2 参照）。本研究は熱伝導率を測定することを意図して系を設定していないので、ここでは平均をとって 0.082 (W/mK) を熱伝導率の値とした。ちなみに実際のアルゴンの熱物性値としての熱伝導率は 110K の飽和液で 0.097 (W/mK) である。この計算で求めた熱伝導率を用いて、固液界面の熱抵抗に関して、液体の熱抵抗と比較したときの等価液体厚さ  $L_R = \lambda_L R_T$  を定義して直感的な長さとして表現した（表 3-2 参照）。

気体部分の温度分布に関しては、平均分子数が少ないためかなりのばらつきが生じている。より長時間の平均を行わないとその構造は明らかに出来ない。本研究は固液界面に着目しているので、気体部分の言及は避けておく。

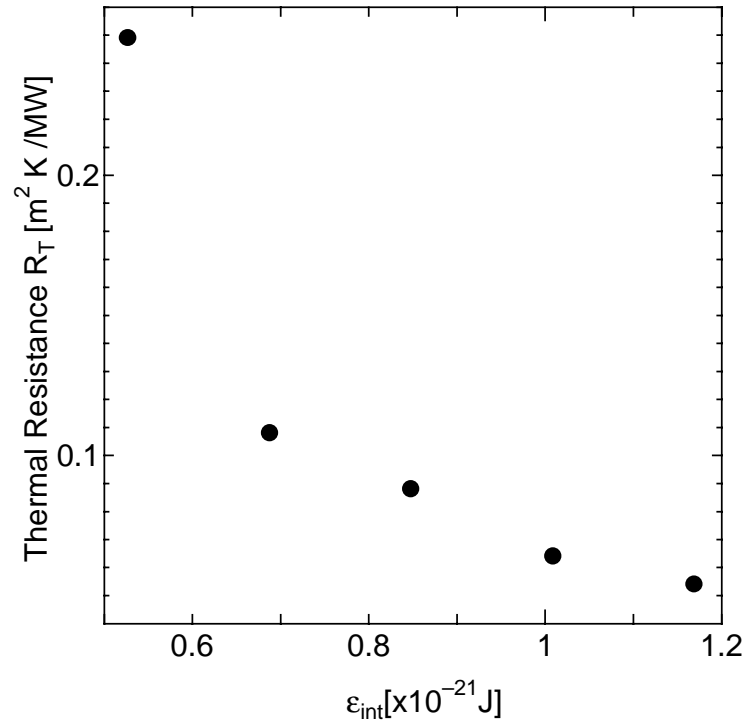


図 3-6 熱抵抗

図 3-6 は  $\epsilon_{int}$  と  $R_T$  の関係をグラフで表したものである。  $\epsilon_{int}$  大きくしていくと  $R_T$  は指数関数的に小さくなっていくことがわかる。しかし、この曲線は見方によっては二次曲線とみなすこともできる。この場合、  $\epsilon_{int}$  を大きくすればするほど  $R_T$  が小さくなるわけではなく、ある  $\epsilon_{int}$  に対して  $R_T$  は極小値をとると考えられる。極小値をとると仮定すると、温度ジャンプ及び熱抵抗は分子間ポテンシャルの強さのみならず、何か他の要素にも起因していることになる。次章では  $\epsilon_{int}$  以外の要素に焦点を当てることを目的とし、パラメータを変化させやすくなるように系を小さくし、気体部分を除いた固液系での計算、解析を試みた。

## 第4章 固液系

## 4.1 はじめに

第3章では分子間ポテンシャルの大きさによって熱抵抗が変化することが実測できたが、本章では、分子の振動運動をバネマス系の振動運動にみたてた場合の分子の固有振動数の違いが分子間ポテンシャル以外に熱抵抗の原因となっているのではないかとの観点に立ち、解析を進めていくことにした。分子の振動運動は完全なバネマス系とは異なるので、実際の固有振動数を求めるのは困難である。ここでは、2.4「時間刻み」で示した時間スケール  $\tau$  に注目する。アルゴンと固体壁面、それぞれパラメータに応ずる  $\tau$  をもっている。アルゴン分子の質量を  $m_{AR}$ 、固体壁面分子の質量を  $m_S$ 、バネ定数を  $k$ 、L-J ポテンシャルのパラメータとして、アルゴン分子は  $\epsilon_{AR}$ 、 $\sigma_{AR}$ 、壁面分子は  $\epsilon_S$ 、 $\sigma_S$  とすると、それぞれ  $\tau_{AR}$ 、 $\tau_S$  は次のようにあらわされる。

$$\tau_{AR} = \sqrt{\frac{m_{AR}\sigma_{AR}^2}{\epsilon_{AR}}} \quad (4.1)$$

$$\tau_S = \sqrt{\frac{72m_S}{\sqrt[3]{2k}}} \quad (4.2)$$

また、アルゴン分子と壁面分子の間の  $\tau_{AS}$  は、これらの換算質量を

$$m_{AS} = \frac{2m_{AR} \cdot m_S}{m_{AR} + m_S} \quad (4.3)$$

とあらわすと、L-J ポテンシャルのパラメータ  $\epsilon_{AS}$ 、 $\sigma_{AS}$  を用いて

$$\tau_{AS} = \sqrt{\frac{m_{AS}\sigma_{AS}^2}{\epsilon_{AS}}} \quad (4.4)$$

とあらわせる。これらを整理すると、

$$\tau_S = \sqrt{\frac{72m_S\epsilon_{AR}}{\sqrt[3]{2km_{AR}\sigma_{AR}^2}}} \cdot \tau_{AR} \quad (4.5)$$

$$\tau_{AS} = \sqrt{\frac{m_{AS}\epsilon_{AR}\sigma_{AS}^2}{m_{AR}\epsilon_{AS}\sigma_{AR}^2}} \cdot \tau_{AR} = \sqrt{\frac{2m_S\epsilon_{AR}\sigma_{AS}^2}{(m_{AR} + m_S)\epsilon_{AS}\sigma_{AR}^2}} \cdot \tau_{AR} \quad (4.6)$$

となる。これら 3 つの  $\tau$  が等しくなるともっとも熱抵抗が小さくなると予想して計算を進めた。

## 4.2 計算条件

この計算では，下壁面分子とアルゴン分子のパラメータを固定し，上壁面分子のパラメータと，アルゴン分子と上壁面分子間の L-J ポテンシャルのパラメータを変化させて影響をしらべる．アルゴン分子間，アルゴン-固体壁面分子間には L-J ポテンシャル，固体壁面分子間には Harmonic ポテンシャルを用いているので，別々にまとめると以下のようなになる．

### L-J ポテンシャル系

表 4-1 L-J ポテンシャル系

	$\sigma$ (Å)	$\epsilon$ ( $\times 10^{-21}$ J)	$m$ ( $\times 10^{-3}$ kg/mol)
アルゴン	3.40	1.67	39.948
アルゴン-上壁面	*	*	*
アルゴン-下壁面	3.085	0.688	66.317

### Harmonic ポテンシャル系

表 4-2 Harmonic ポテンシャル系

	$r_0$ (Å)	$k$ (N m)	$m$ ( $\times 10^{-3}$ kg/mol)
上壁面	2.77	*	*
下壁面	2.77	46.8	195.09

$r_0$  は固体壁面分子の分子間距離である．\*のパラメータを 4.1 で示した  $\tau$  に合わせて変化した．

表 4-3 計算条件

計算領域	27.7×28.8×41.6 (Å <sup>3</sup> )
初期温度	110K
上壁面温度	100K
下壁面温度	120K

上記の領域に壁面分子を 1 層 120 個で 3 層ずつ上下に，アルゴン分子を中央に 400 個 fcc 構造で配置し，系全体を初期温度 110(K)で 100(ps)温度制御を行った後，下壁面を 120(K)，上壁面を 100(K)に phantom 分子によって温度制御を行い，4000(ps)計算した．



この系ではアルゴンは相変化せず，液体のみで存在するので初期温度制御を行えば系は定常状態に至る．

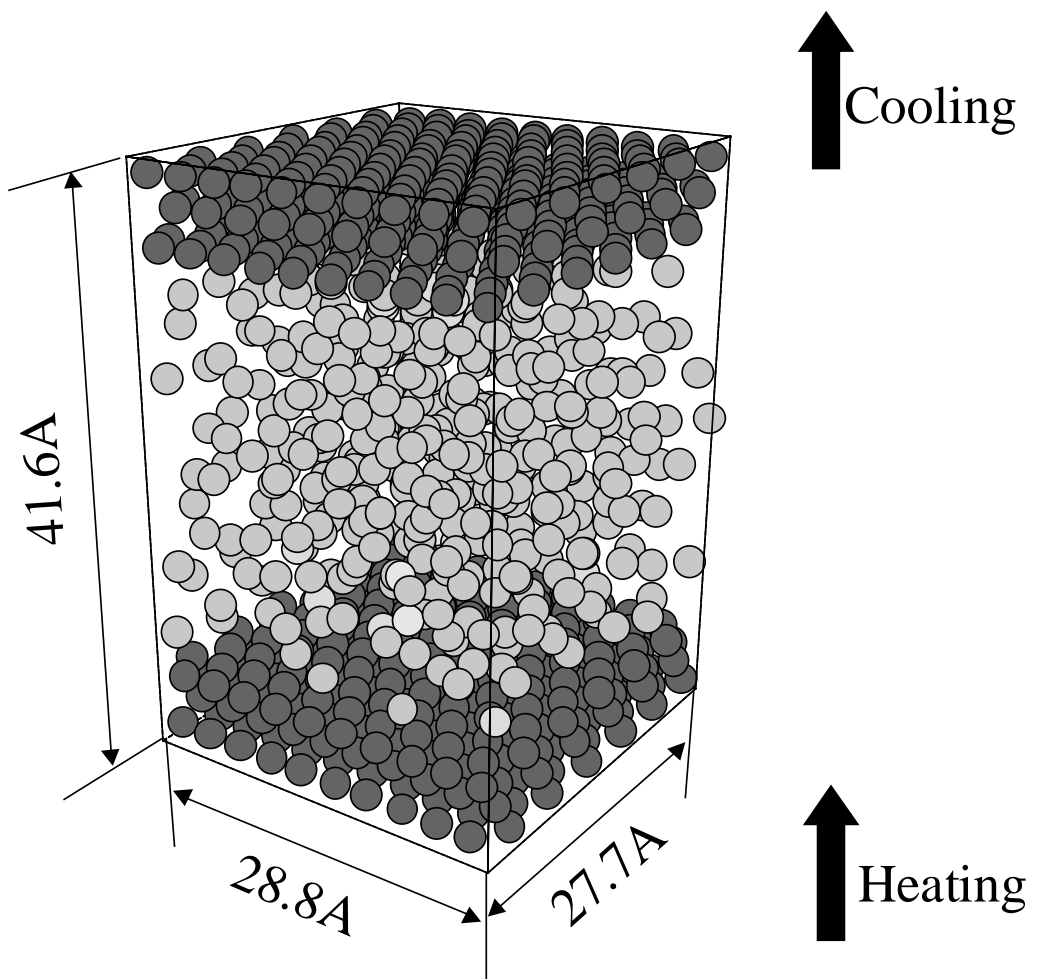


図 4-1 計算系

### 4.3 計算結果及び考察

下壁面分子はプラチナを仮定しているのので，下壁面分子の $\tau$ を $\tau_{Pt}$ とする．上下壁面分子，アルゴン分子，アルゴン-下壁面分子間のパラメータを 4.1 の各式に代入して $\tau$ の関係を求めると以下のようなになる．上壁面分子は第3章では下壁面と同じプラチナを仮定しているのので，とりあえず上下壁面は同じパラメータを代入した．

$$\tau_{Ar} = 2.143 \times 10^{-12} \text{ (s)} \quad (4.7)$$

$$\tau_{Pt} = \tau_S = 6.290 \times 10^{-13} \text{ (s)} \quad (4.8)$$

$$\tau_{AS} = 3.903 \times 10^{-12} \text{ (s)} \quad (4.9)$$

$$\tau_{Pt} = \tau_S = 0.29\tau_{Ar} \quad (4.10)$$

$$\tau_{AS} = 1.82\tau_{Ar} \quad (4.11)$$

#### 4.3.1 パラメータによる熱抵抗の変動

時間スケール $\tau$  は(4.5)，(4.6)式より以下のように求まる．

$$\tau_S = \sqrt{\frac{72m_S \epsilon_{AR}}{3\sqrt{2}km_{AR}\sigma_{AR}^2}} \cdot \tau_{AR}$$

$$\tau_{AS} = \sqrt{\frac{2m_S \epsilon_{AR} \sigma_{AS}^2}{(m_{AR} + m_S)\epsilon_{AS}\sigma_{AR}^2}} \cdot \tau_{AR}$$

一口に  $\tau$  をあわせると言ってもパラメータが多いため，同じ  $\tau$  でも変化させるパラメータによって結果が異なる場合も考えられる．ここでは， $k$ ， $m_S$ ， $\sigma_{AS}$ ， $\epsilon_{AS}$ ，を下の表のようにすることによって， $\tau_S = \tau_{Ar}$ ， $\tau_{AS} = 2.0\tau_{Ar}$  を満たす3つの系によって計算を行い，比較してみた．これ以外のパラメータは本文に同じである．

表 4-4 パラメータ設定

	$k$ (N/m)	$m_S$ ( $\times 10^{-3}$ kg/mol)	$\sigma_{AS}$ (Å)	$\epsilon_{AS}$ ( $\times 10^{-21}$ J)
1	46.8	2264	3.085	0.688
2	4.03	195.09	3.357	0.688
3	4.03	195.09	3.085	0.581

下図は 2000ps から 5000ps までの平均数密度分布と温度分布である。

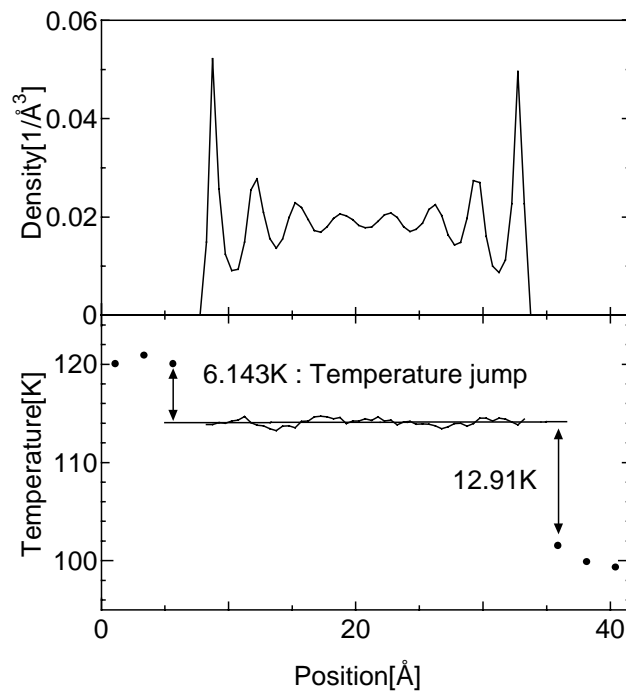


図 4-2 系 1

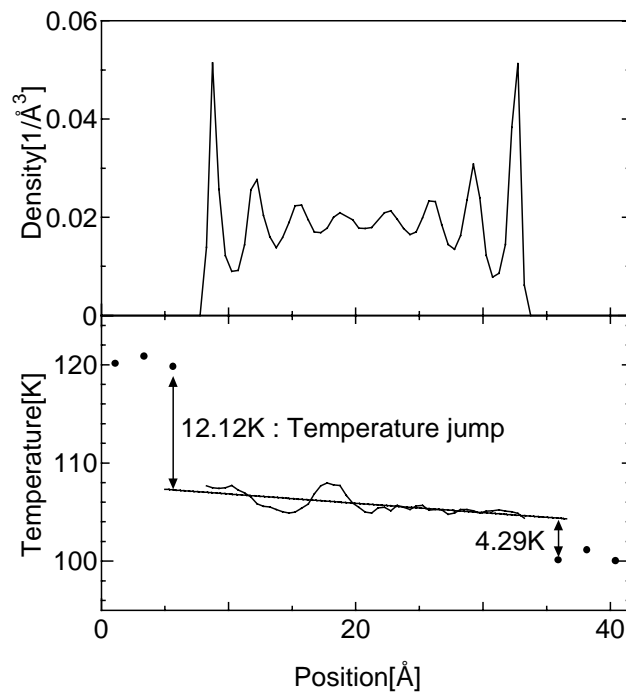


図 4-3 系 2

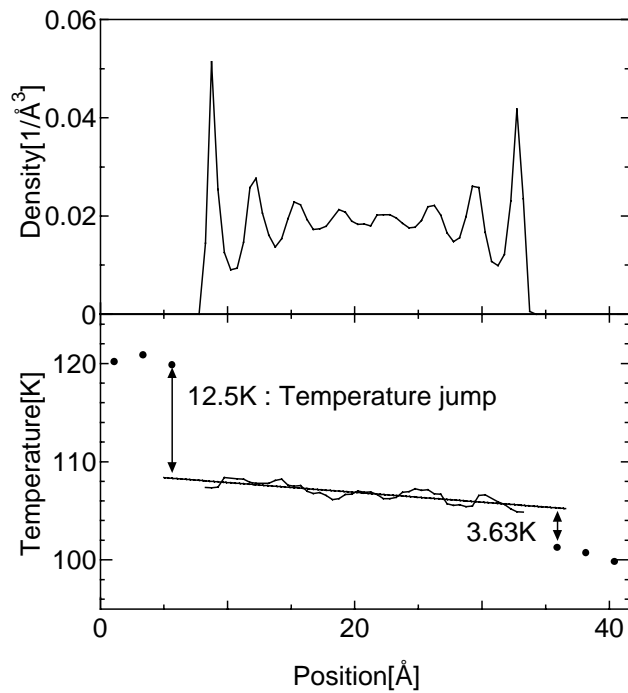


図 4-4 系 3

この3つの系について、温度ジャンプ、熱流束、熱抵抗、等価厚さを表にまとめてみる。方法は本文に示したとおりである。

表 4-5 系と諸量

	$T_{jump}$ (K)		$q_w$ (MW/m <sup>2</sup> )		$R_T$ (m <sup>2</sup> /MW)		$L_R$ (Å)	
	上壁面	下壁面	上壁面	下壁面	上壁面	下壁面	上壁面	下壁面
1	12.91	6.14	61.9	63.5	0.209	0.097	—	—
2	4.29	12.12	140.3	140.4	0.031	0.086	45.1	127.4
3	3.63	12.45	123.4	122.7	0.029	0.101	36.3	124.7

1の系は、熱抵抗がかなり大きくなっている。温度分布のグラフを見ても、アルゴン液体の温度勾配が正の傾きを示している。これは、上壁面分子の質量がアルゴンに比べてかなり大きいので、熱のやりとりが行えていないのではないかとと思われる。これに対して $\epsilon$ 、 $\sigma$ を変えた系どうしは熱抵抗、熱抵抗等価厚さともに似た値となっている。この結果だけから判断すると、 $\tau$ が等しければ $\epsilon$ 、 $\sigma$ どちらを変えても同じ結果が得られると言えるかも知れないが、 $\sigma$ は分子半径を表すパラメータであるので、

好き勝手に変化させてしまうと結晶構造の崩壊を招いてしまう恐れなどがあり，取り扱いには十分な注意が必要である．

### 4.3.2 $\tau_S$ と $\tau_{Ar}$ との相関

まずここでは下図のように  $\tau_S$  と  $\tau_{Ar}$  をだんだん近づけていった．

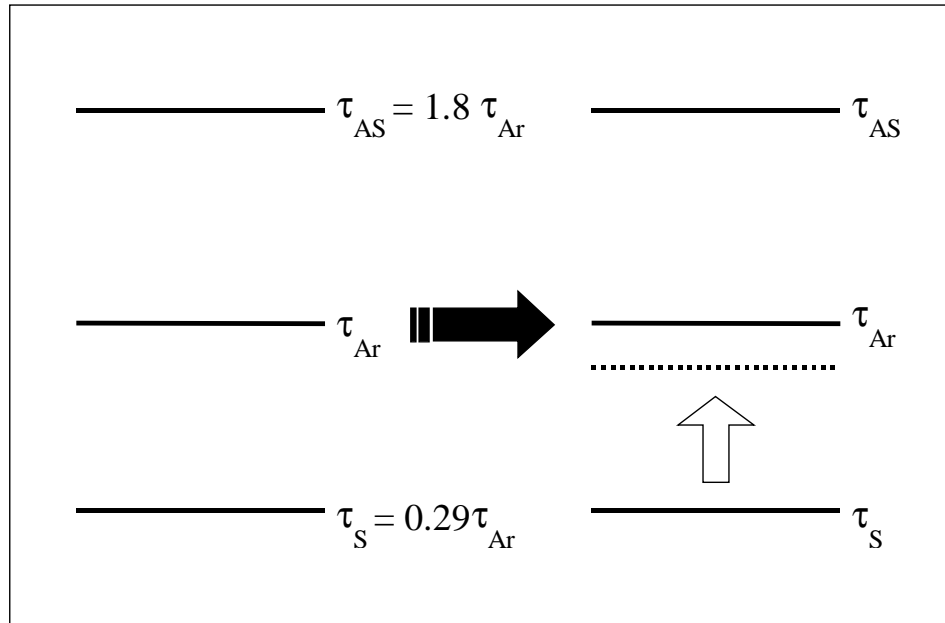


図 4-5 パラメータ設定の概略

壁面分子の  $\tau$  は  $\tau_S = \sqrt{\frac{72m_S \epsilon_{AR}}{3\sqrt{2}km_{AR}\sigma_{AR}^2}} \cdot \tau_{AR}$  で表されるので，バネ定数  $k$  を小さくし

ていけば  $\tau_S$  は  $\tau_{Ar}$  に近づいていく．そこで，上壁面分子のバネ定数のみを小さくしていくことで  $\tau_S$  を  $\tau_S = 0.29\tau_{Ar}$ ， $\tau_S = 0.5\tau_{Ar}$ ， $\tau_S = \tau_{Ar}$  と変化させた．

表 4-6  $\tau$  と  $k$

$\tau$	$k$ (N m)
$\tau_S = 0.29\tau_{Ar}$	46.8
$\tau_S = 0.5\tau_{Ar}$	16.1
$\tau_S = \tau_{Ar}$	4.03

$\tau$  と  $k$  の関係は表 4-6 のようになる．

図 4-6 は、上下壁面分子、アルゴン分子の平均温度の 5000ps までの時間変化である。アルゴン分子の平均温度は分子数が少ないために少々ばらついてはいるが、2000ps 以降は上下壁面とともにほぼ一定値を保っていると考え、2000ps 以降のデータを解析に用いた。

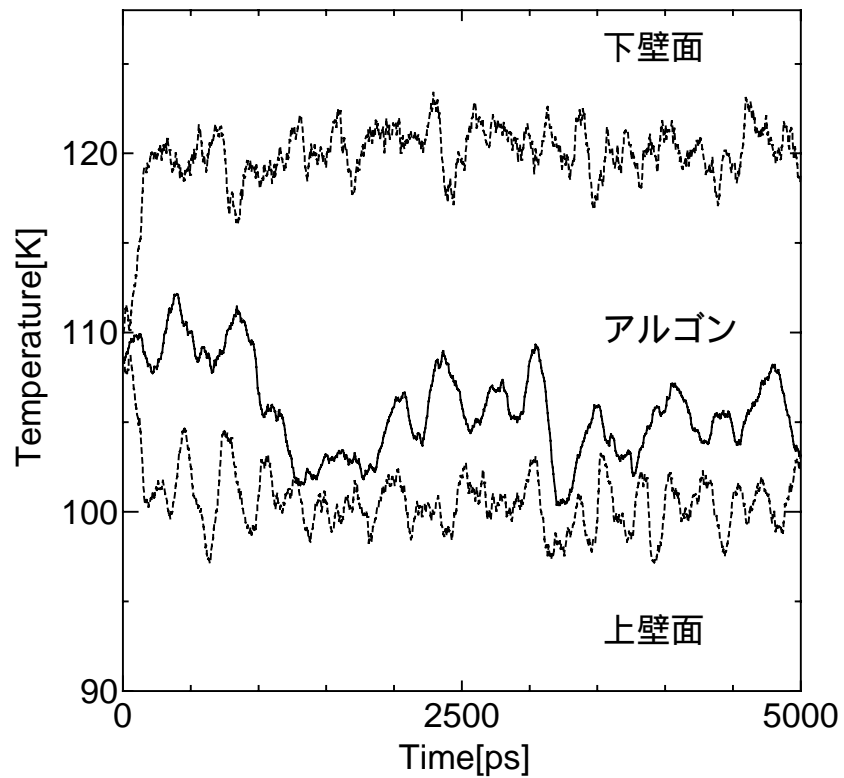


図 4-6 温度変化

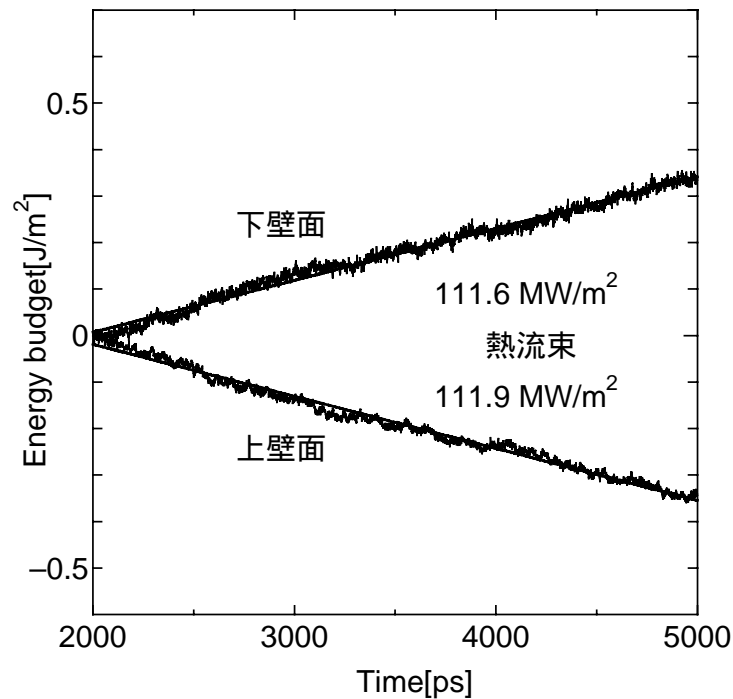


図 4-7 エネルギーの累積値

図 4-7 は 2000ps 以降 phantom に入力したエネルギーの累積値を示す．2000ps の値を 0 としてある．一定速度でエネルギーは増加，減少している．この傾きが上下壁面での熱流束となる．

図 4-8 に 2000ps から 5000ps までの平均数密度分布，温度分布を示す．温度分布のグラフはアルゴン液体を実線で，固体壁面の各層の温度を点で表している．このグラフから固体壁面と液体の界面での温度ジャンプを測定し，熱抵抗を求めた．液体の温度分布は多少ばらつきはあるものの，ほぼ一定の温度勾配を保っている．温度ジャンプを測定する際，液体の温度勾配にあった直線をフィットさせ，その直線と固体壁面の温度差をとった．温度ジャンプ  $T_{jump}$ ，熱流束  $q_w$ ，熱抵抗  $R_T$ ，上壁面の熱抵抗等価厚さ  $L_R$  を上記の 3 つの  $\tau$  について上下壁面と液体との界面について求めたものをまとめたのが表 4-7 である．熱抵抗等価厚さ  $L_R$  は，界面熱抵抗をアルゴンの熱伝導と比較したときの直感的な長さである．

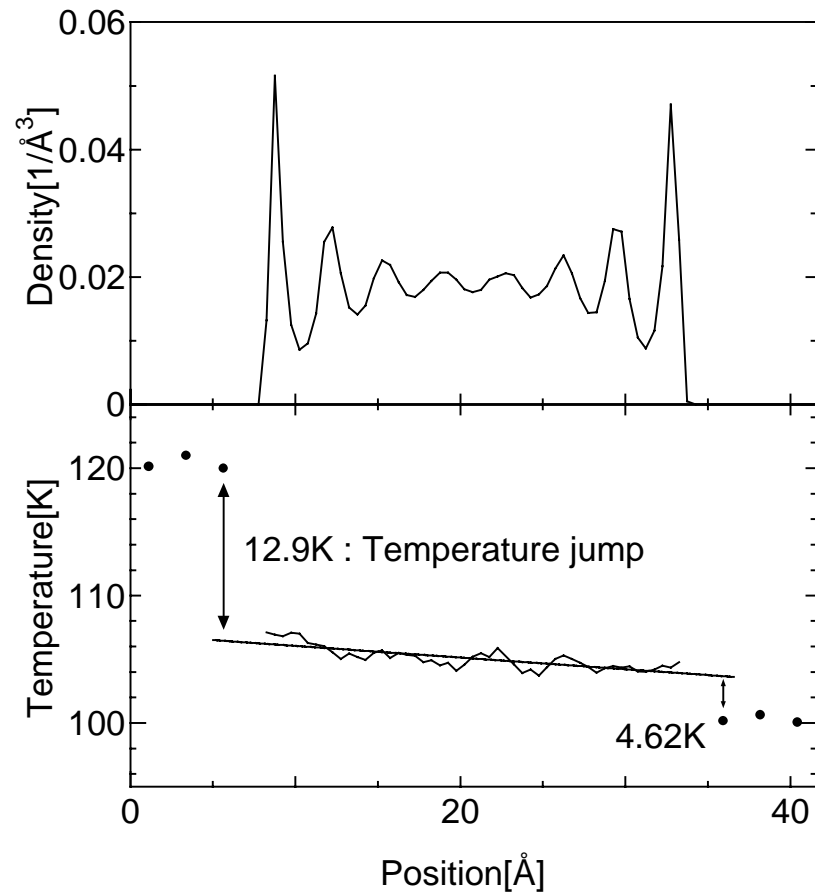


図 4-8 数密度，温度分布

表 4-7  $\tau_s$  と諸量

$\tau_s$	$k$ (N/m)		$T_{jump}$ (K)		$q_w$ (MW/m <sup>2</sup> )		$R_T$ (m <sup>2</sup> /MW)		$L_R$ (Å)	
	上壁面	下壁面	上壁面	下壁面	上壁面	下壁面	上壁面	下壁面	上壁面	下壁面
$\tau_s = 0.29\tau_{Ar}$	46.8	46.8	8.13	7.50	95.0	93.9	0.086	0.080	69.2	63.8
$\tau_s = 0.5\tau_{Ar}$	16.1	46.8	5.38	11.01	111.8	111.1	0.048	0.099	36.1	73.8
$\tau_s = \tau_{Ar}$	4.03	46.8	4.62	12.87	111.9	111.5	0.041	0.115	50.4	140.5



$\tau_s$  を  $\tau_{Ar}$  に近づけていくにつれ、熱抵抗は小さくなっていくことがわかる。下壁面側の熱抵抗は逆の傾向を示しているが、これは上壁面側の熱抵抗の低下に伴う、相対的なものと考えられる。そこで、下壁面側と上壁面側の熱抵抗の比をとってみると、同じように  $\tau_s$  を  $\tau_{Ar}$  に近づけていくにつれてその比は小さくなっていく。したがって  $\tau_s$  と  $\tau_{Ar}$  の関係については予想どおりの結果になったといえる。今回は熱伝導率との関係は考慮していないが、熱伝導率との関係も今後整理する必要がある。

### 4.3.3 $\tau_{AS}$ と $\tau_{Ar}$ との相関

これまでの計算で  $\tau_s$  を  $\tau_{Ar}$  に近づけていくことで熱抵抗は減少していくことがわかった。そこで、今回は  $\tau_s = \tau_{Ar}$  で固定したまま、 $\tau_{AS} = \tau_{Ar}$ 、 $\tau_{AS} = 3.0\tau_{Ar}$ 、 $\tau_{AS} = 0.7\tau_{Ar}$  となるように  $\varepsilon_{AS}$  を変化させた。 $\tau_s$  と同じことが  $\tau_{AS}$  にも言えるとすれば、 $\tau_{AS}$  を  $\tau_{Ar}$  に近づけていくにつれて熱抵抗は小さくなるはずである。さらに、 $\tau_{AS} = \tau_s = \tau_{Ar}$  の点が熱抵抗の極小値をとるならば、 $\tau_{AS} = 0.7\tau_{Ar}$  の熱抵抗の値は  $\tau_{AS} = \tau_{Ar}$  のときよりも大きくなると考えられる。

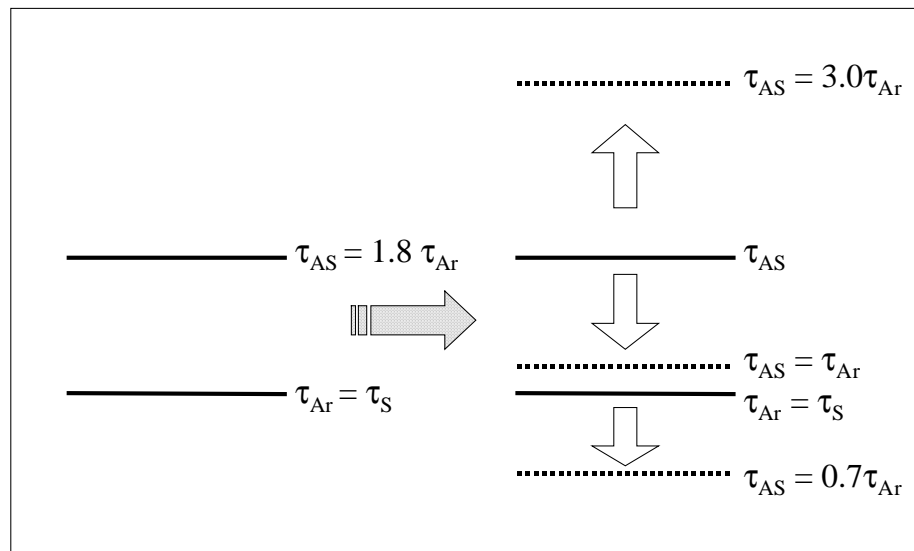


図 4-9 パラメータ設定の概略

$$\tau_{AS} = \sqrt{\frac{2m_S \varepsilon_{AR} \sigma_{AS}^2}{(m_{AR} + m_S) \varepsilon_{AS} \sigma_{AR}^2}} \cdot \tau_{Ar}$$

であるから  $\varepsilon_{AS}$  のみを変化させれば上記のように  $\tau_{AS}$

を合わせることができる．表 4-8 に  $\tau$  と  $\epsilon_{AS}$  の関係をまとめる．

表 4-8  $\tau$  と  $\epsilon_{AS}$

$\tau$	$\epsilon_{AS}(\times 10^{-21}\text{J})$
$\tau_{AS} = 3.0\tau_{Ar}$	0.254
$\tau_{AS} = 1.8\tau_{Ar}$	0.688
$\tau_{AS} = \tau_{Ar}$	2.282
$\tau_{AS} = 0.7\tau_{Ar}$	4.564

$\tau_{AS} = 1.8\tau_{Ar}$  は 4.3.1 に示してある．計算条件，解析に用いた時間など，その他の条件はすべて 4.3.1 の計算と同じなので説明は省く．

図 4-10 に  $\tau_{AS} = \tau_{Ar}$  の条件での 2000ps から 5000ps までのアルゴンの平均数密度分布と固体壁面，アルゴンの温度分布を示す．このグラフから 4.3.1 と同じ手法で諸量を測定した．

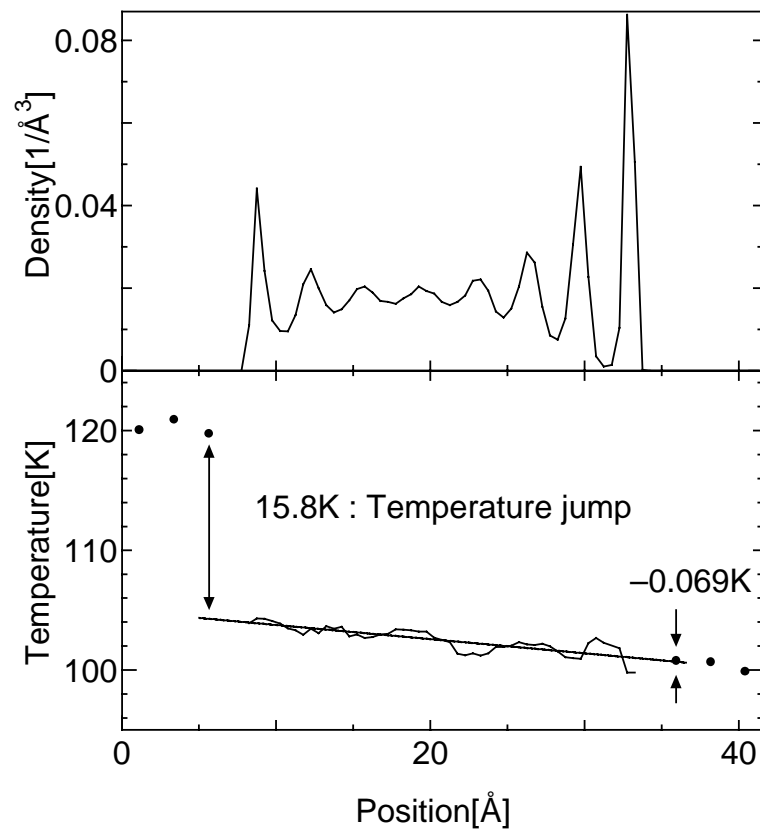


図 4-10 数密度，温度分布

温度分布を見ると，上壁面第1層の温度よりアルゴンの温度の方が低くなっているが，アルゴンと上壁面間の温度ジャンプはかなり小さくなっていることがわかる．ただ，数密度分布を見ればわかるように上壁面との界面に位置するアルゴン分子がほとんど固体状になってしまっている．これは $\epsilon_{AS}$ を大きくしたため，アルゴン分子と上壁面分子間のポテンシャルが強くなった影響と考えられる．これではアルゴンと上壁面第1層の界面は固液界面ではなくなってしまうと言えるが，固体状のアルゴン層の下のアルゴンは液体であるので，熱抵抗を評価する上で特別問題はない．

図4-11は $\tau_{AS} = 0.7\tau_{Ar}$ の条件での2000psから5000psまでのアルゴンの平均数密度分布と固体壁面，アルゴンの温度分布である．

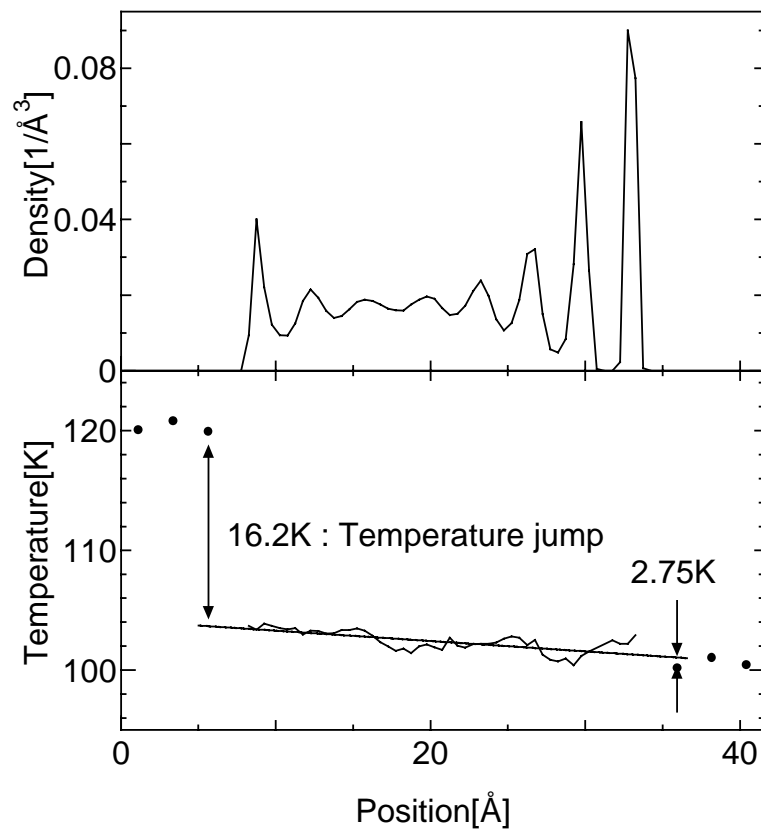


図 4-11 数密度，温度分布

温度分布を見ると，温度ジャンプは $\tau_{AS} = \tau_{Ar}$ の時よりも大きくなっている．この条件の下でも， $\tau_{AS} = \tau_{Ar}$ の時と同様上壁面と接するアルゴンが固体状になっている．しかし温度ジャンプが大きくなることが確認できたので，熱抵抗を評価する上では問題ないと考えている．

表 4-9 に各  $\tau$  に対する，温度ジャンプ  $T_{jump}$ ，熱抵抗  $R_T$ ，熱流束  $q_w$ ，熱抵抗等価厚さ  $L_R$  をまとめた．

表 4-9  $\tau_{AS}$  と諸量

$\tau_{AS}$	$\varepsilon_{AS}$ ( $\times 10^{-21} \text{J}$ )		$T_{jump}$ (K)		$q_w$ (MW/m <sup>2</sup> )		$R_T$ (m <sup>2</sup> /MW)		$L_R$ (Å)	
	上壁面	下壁面	上壁面	下壁面	上壁面	下壁面	上壁面	下壁面	上壁面	下壁面
$\tau_{AS} = 3.0\tau_{Ar}$	0.254	0.688	7.90	10.23	96.8	97.21	0.082	0.105	176.1	228.1
$\tau_{AS} = 1.8\tau_{Ar}$	0.688	0.688	4.62	12.87	111.9	111.5	0.041	0.115	50.4	140.5
$\tau_{AS} = \tau_{Ar}$	2.282	0.688	-0.069	15.81	105.4	105.6	0.00065	0.150	0.426	97.6
$\tau_{AS} = 0.7\tau_{Ar}$	4.564	0.688	2.75	16.22	103.4	104.6	0.027	0.155	31.90	187.9

この表から， $\tau_{AS}$  が  $\tau_{Ar}$  に近ければ近いほど熱抵抗が小さくなることが明らかである．下壁面のパラメータは一切変えてないが，熱抵抗が  $\varepsilon$  の増加に伴って大きくなっているが，これは上壁面の熱抵抗との相対的なものであるので上下壁面の熱抵抗の比をとれば傾向がはっきり見えるであろう．また， $\tau_{AS}$  を  $\tau_{Ar}$  から遠ざけた時，熱抵抗が大きくなっていくことから，おそらく  $\tau_{AS} = \tau_{Ar}$  を満たす点が熱抵抗の極小値をとるのであろう．

$\tau_{AS}$  と  $\tau_s$  の熱抵抗に及ぼす影響を見てみると， $\tau_{AS}$  を  $\tau_{Ar}$  に近づけていった方が， $\tau_s$  を  $\tau_{Ar}$  に近づけるよりも熱抵抗の減少幅は格段に大きい．これは，固体とアルゴン間で熱のやりとりが行われる時，アルゴン分子と壁面分子間のポテンシャルを介してそれぞれに熱が伝わるわけであるから，アルゴン分子と壁面分子間のポテンシャルの強さに直接関わる  $\varepsilon_{AS}$  の影響が大きいと理解できる．

## 第5章 結論

分子動力学シミュレーションにより，分子レベルでの熱伝導現象の解析を行ってきた．検証すべきパラメータは数多くあり，それらが複雑に結びついているため，厳密にどのパラメータがどこに影響しているかを調べ上げるのは容易ではない．本研究のテーマである  $\tau$  は 3 つであるが，さらにそれらを構成するパラメータ 1 つ 1 つ検証していかなければ熱抵抗との関係を体系づけることはできないが，それには多くの時間を要する．短時間ではあったが少なくとも本研究によって以下のことが確認出来た．

- 分子スケールの平滑な異種界面間においても接触熱抵抗が存在する．
- 物質による振動の時間スケール  $\tau$  の違いは熱抵抗の要因の 1 つである．
- 分子間ポテンシャルの大きさと熱抵抗の大きさは反比例するわけではなく，振動の時間スケールの  $\tau$  のずれが熱抵抗の原因となっている．
- 界面を介する異なる 2 つの分子が存在する場合，各同一分子間のポテンシャルの大きさよりも，異なる 2 分子間のポテンシャルの大きさが熱伝導に著しい影響を及ぼす．

## 謝辞

今回この卒業論文を作成するにあたって、僕を支えてくれた多くの方々に対し、感謝の気持ちを述べたいと思います。

まず、丸山先生。無知な僕が何をすればいいかわからなくなり、路頭に迷っているとき、的確な課題とご指導を僕に与えてくれ、研究の方向性を僕に示していただきました。本当にありがとうございました。助手の井上満さん。時折研究室に見えては僕に発破をかけ、研究心を煽ってくださいました。そして山口先輩。僕は山口先輩あつての丸山研究室だと考えています。山口先輩はまるで「兄貴」のように頼りがいがあり、山口先輩は常に真剣に僕の疑問に答えてくれ、どんな質問でも瞬時に完璧なまでのアドバイスを与えてくれました。山口先輩には今後ずっと頼り続けるでしょう。僕は最後の最後まで「山さん」におんぶにだっこでした。そして僕の直属の上司、木村さん。多くは語らない人ですが、それとはうらはらにその脳にはマニアックとも言えるほどの膨大な MD 知識とコンピュータ知識を有し、研究、パソコン操作、何でも木村さんに聞けば何とかなるという希望の下、僕は研究を続けることが出来ました。本当に感謝しています。助手の河野さん。時には太っ腹なところもあり、実験班の先導を切って実験に励む姿はとても刺激になりました。留学生の崔さん。朝早くから夜遅くまで研究に励む後ろ姿には、研究に対する僕の考え方に少なからず影響を与えてくれました。そして吉田先輩。そのちゃきちゃきとした行動は揺るがない意志のあらわれで、信念を持って実験をするその姿はとても刺激になりました。そして渋谷先輩、井上修先輩。彼らのおかげで研究室での生活を快適に、何不自由なく送ることが出来ました。そして4年生の井上君。木村さんに勝るとも劣らないコンピュータ知識のおかげで、机が隣同士だった僕は、彼をまるでコンピュータの生き字引のように頼りながら研究を進めて来ました。彼がいなかったらまだ研究は終わってなかったでしょう。そして金君。常にたわいもない話でお互いに盛り上げてばかりでしたが、彼のおかげで研究室の雰囲気は明るいものになりました。庄司先生を初めとする庄司研究室のみなさんには研究以外のことなどでお世話になりました。

重ねてお礼を申し上げます。

## 参考文献

- [1] 分子熱流体，小竹 進，丸善
- [2] Maruyama, S. et al., *Microscale Thermophysical Engineering*, 2-1(1998), 49.
- [3] Blömer, J. and Beylich, A. E., *Proc. of International Symp. on Rarefied Gas Dynamics*, (1996),392
- [4] 伝熱工学資料，日本機械学会
- [5] 伝熱概論，甲藤 好郎，養賢堂
- [6] 分子動力学法とモンテカルロ法，大澤，片岡，講談社
- [7] 分子シミュレーション入門，岡田，大澤，海文堂
- [8] 分子動力学法による固体面上の気泡核生成，木村



以上 .

通し番号 1-49 完

卒業論文

平成 11 年 2 月 5 日 提出

70264 安井康二