

学 位 審 査 報 告 書

(ふ り が な) 氏 名	てしがわら りょうへい 勅使河原 良平
学位 (専攻分野)	博 士 (理 学)
学 位 記 番 号	理 博 第 号
学位授与の日付	平成 年 月 日
学位授与の要件	学 位 規 則 第 4 条 第 1 項 該 当
研 究 科 ・ 専 攻	理学研究科 物理学・宇宙物理学 専攻
(学位論文題目) 蒸発と液化を伴う流体における濡れ動力学の 理論的研究	
論 文 調 査 委 員	(主査) 小貫 明 教授 太田隆夫 教授 荒木武昭 准教授

理 学 研 究 科

京都大学	博士（理学）	氏名	勅使河原 良平
論文題目	蒸発と液化を伴う流体における濡れ動力学の理論的研究		
（論文内容の要旨） 気体と液体の状態を連続的に記述するvan der Waals の状態方程式は有名であるが、物理学の立場から非平衡現象として気液相転移を扱っている流体の研究は、日常的にも体験される現象にもかかわらず、殆どなされていない。勅使河原氏は、気液転移に際し界面において蒸発・気化の相転移が起こることを取り入れて、固体壁からの液滴蒸発、液膜の固体壁流動、疎水性壁での濡れ動力学について研究を行った。ちなみに濡れ動力学は、揮発しない液体で多く研究が行われているが、揮発液体での濡れ動力学は、まだよく解明されていない。 提出論文で扱った初めの例では、液滴を壁の上に置いた場合を考えている。周囲は同種の分子から構成される気体（蒸気）である。壁の温度を液体温度より少し変化させると、圧力p は液滴の外ではほぼ均一となる。そのため熱流下であっても、界面の温度は平衡での共存温度$T_{cx}(p)$ の付近にあることが重要である。そのため、熱せられた壁上もしくは冷やされた壁上有る接触線(contact line) の付近で、急激な温度分布の変化と大きな熱流が現れる。ここで熱流下での接触線付近での熱力学と動力学は、非常に特異である。勅使河原氏は、動的ファンデルワールス(Dynamic van der Waals) モデルを用いて[、軸対称系での一成分流体での液滴の蒸発をシミュレーションも遂行することにより研究した。低温の壁の上での完全濡れの条件では、液滴本体が徐々に広がる前に、液体と壁の引力相互作用のためミクロな厚さの先駆(precursor)薄膜が速い速度で広がる。勅使河原氏はこの薄膜表面で主に液化が起こり薄膜の拡大が引き起こされていること、薄膜先端のガス領域が潜熱のため高温化していることを見つけた。また僅かに高温の壁の上では、たとえ完全濡れ条件のもとで先駆薄膜ができてもしばらくすると蒸発が起こり薄膜は消失することが示された。壁から液滴を強く加熱すると先駆薄膜は殆ど形成されず液滴本体の蒸発が接触線近傍で激しく起こることも分かった。 提出論文で扱った2番目の例では、液体中に疎水性(hydrophobic)壁がある系における乾燥(predrying)転移についての理論を展開している。ここで壁付近では、流体は床によって撥ね付けられ、バルク液体の密度よりも小さい密度をとる。この撥ね			

付けられる度合いは、バルクの熱力学的状態（密度・温度・圧力）や床の撥水性の強さによって決まる。実際に水の接触を嫌う固体表面は疎水性表面と呼ばれ自然界に満ち溢れている。ここで流体が撥ね付けられる結果、壁付近で比較的高密度でバルク液体より低密度の薄膜を形成する場合と、壁付近で比較的低い密度をとり厚い膜が形成される場合がある。驚くべきことにこの2状態は一次相転移として移り変わる。即ち、圧力や温度の微小変化に対し2状態の間に不連続的変化が起こりうる。この現象をpredrying転移と呼ぶ。勅使河原氏は圧力・温度相図の中でpredrying転移線を計算しその線がpredrying臨界点で終わることを見つけた。さらに勅使河原氏は、動的van der Waals モデルを用いて疎水性壁上の低密度膜のダイナミクスを調べている。流体は一成分流体とする。重力は考えていない。また温度はかなり臨界点に近い範囲である。この温度範囲では気体の密度は液体の密度の25 - 30% 程度であり、気体の平均自由行程はそれ程は長くない。平均自由行程が長いと、気液界面を連続的に記述する勅使河原氏のphase-field 手法を適用することに無理が出るのでこの選択がなされた。さらに今回のシミュレーションでは温度変化は小さく、界面を通る熱や流体の流束量は少ない。従い、温度 T や一般化化学ポテンシャル μ は、界面の内外で連続的に変化している。また、界面の厚さは計算メッシュサイズよりも長く、シミュレーションの系の大きさは数十ナノメートルと小さいが、粒子数は数百万に及んでいる。ここで上部壁の温度操作により系全体の減圧と加圧を行うことが可能で、勅使河原氏はこの操作をすることによりpredrying転移の動力学の研究を遂行した。不連続な膜厚変化そのものは時間的に突然起こり、その際にかんりの潜熱吸収もしくは放出が起こり周囲に複雑な対流が発生することが見いだされた。この物理過程は音波や熱流の関与する極めて複雑なものである。特に相転移直後の薄膜周囲の温度の不均一性は顕著であり、熱移送は音波によるもの熱伝導によるもの熱対流によるものに分けられる。これらの相転移の関与する流体現象は余りにも複雑で具体的に調べられた例がない。

(論文審査の結果の要旨)

本論文の扱う現象は本来工学において重要な研究対象であったが物理学においても重要課題として研究すべき対象である。近年の計算機能力の格段の進歩のため工学と物理学にまたがる計算機科学が様々の側面から発展しつつあるので、このような事情はますます明確になりつつある。複雑な対象に対しては他の物理系との関連をおさえながら統一的に理解することが重要であるが、ここでは動的ファンデルワールスモデルによる現象理論的なアプローチが大変有効である。そして複雑な動的効果は計算機シミュレーションをもってして初めて発見されることが多い。本論文はまさにこの精神と手法のもとに築かれた仕事でもある。以下により具体的に成果を列挙する。

本論文は大きく二つの研究にわけられる。まず一つは気化と蒸発を取り入れた濡れ動力学がある。動的ファンデルワールスモデルに基づく解析により極めて豊かな流体現象を世界で初めて見つけている。特に潜熱効果は流体物理学において積年の課題であるが挑戦的に取り組んだ例は殆どない。また勅使河原氏の計算手法は画期的なものである。即ち、移動する界面に熱流が通り抜ける場合に高い非線形性のため非物理的な流動場の発生が従来の計算機実験では不可避であって2流体計算機分野では有名な困難であった。勅使河原氏は巧妙な工夫を発案し、非物理的速度場の消去に成功した。次に二つめは、predrying 転移の提唱と計算機による解析である。この様な現象は水と疎水性表面の相互作用の問題でありそこに相転移の概念を導入したのは重要な業績である。物理化学分野ではいまだ predrying の概念は殆ど知られておらず系統的解析は勅使河原氏の仕事が初めてである。圧力変化後の低密度膜の時間発展と潜熱による流体現象は今まで未知の興味ある現象である。

かくして本論文は気液相転移する流体という応用上も極めて重要な物理系に対し、統計物理学原理から出発した体系的理論を構築している。数学的にも数値解析的にも高度な手法を使いながら、興味ある結果を得ている。また新たな流体計算手法の発案もこの分野にとって貴重である。このような観点から、本申請論文は総合的に学位論文として優れた内容をもつものとして、博士(理学)の学位論文として価値あるものと認める。なお、本論文に報告された研究業績を中心に平成23年12月28日に論文内容に関する口頭試問を行った結果、合格と判断した。