ナノスリット内の液体の蒸発に関する分子動力学的研究

構造特性と濡れ性が与える影響

Molecular Dynamics Study of Evaporation in Nanoslits

Influence of Slit Geometry and Wettability

○正 植木 祥高 (阪大)

村島 秀明 (阪大)

正 芝原 正彦 (阪大)

Yoshitaka Ueki, Hideaki Murashima and Masahiko Shibahara

Osaka University, 2-1 Yamadaoka, Suita, Osaka 565-0871, Japan

Key Words: Molecular Dynamics Simulations, Evaporation, Nanoslits

1. はじめに

気液相変化は熱輸送効率が高く、幅広く産業機器に用いられている。気液相変化における熱伝達の更なる促進を目的に、微細加工技術により作製したナノ構造面を伝熱面に利用することを目指した研究が現在までに多く報告されている⁽¹⁾。本研究においては蒸発現象に着目し、ナノ構造面のなかでも固気液三相接触線が一定となるナノスリット構造を対象として分子スケールの基礎的な蒸発特性を調査するとともに、ナノスリットの濡れ性、幅や高さといった構造特性が蒸発に与える影響について評価した。

2. 分子動力学シミュレーション

Fig. 1 に示した計算体系を採用した。計算モデルのサイズは y 方向 7.85 nm, z 方向にはスリット構造上部から 20.0 nm とし、スリット壁面と底面の厚さは 1.08 nm とした。 x, y 方向には周期境界条件を課し、 z 方向上面には後述する本計算時には蒸発処理を課して計算を行った。流体分子として Ar, ナノスリット構造として Pt をそれぞれ用い、同種の粒子間には 12-6 Lennard-Jones (LJ)ポテンシャルを用いた。異種原子・分子間については LJ ポテンシャルに分子間相互作用パラメータ α を乗じた分子間ポテンシャルを用いた。

α の値をナノスリットの左右の側壁面でそれぞれ変化させることにより Ar 流体の Pt 壁面に対する濡れ性を変化させた。計算開始から 0.4 ns 間に Ar 流体を 90 K に温度制御を行った。その後、Langevin 法により Pt 固体壁面の温度制御を課しながら 3.6 ns 間緩和計算を行い熱平衡状態のデータ取得を行った後に、6.0 ns 蒸発を誘起する本計算を行った。

本研究では詳細な蒸発挙動を分析するため、気液界面付近について凝縮、蒸発、反射、今回新たに定義した滞留の 4 種の挙動に分類して調査を行った。Ar 分子が気液界面に入射してから 20 ps 以内に液相から離脱した場合を反射と定義した。特に反射の中でも 2 回以上反射を行った場合には滞留と定義した。

3. 主たる結果と結論

親水性スリット壁面の場合には壁面付近での Ar 分子の移動量が増加し、スリット壁面に沿って蒸発する分子が増加することがわかった。加えて、親水性壁面は液体の温度低下を低減するため蒸発に寄与する。壁面の濡れ性が左右で異なる場合には、流体分子が比較的親水性の壁面側に偏り、気液界面の位置が上昇する。このときスリット幅が広い場合には気液界面とスリット出口が接近し易い傾向が見られた。気液界面とスリット出口が十分に接近した場合、気液界面近傍での滞留量が低下する。スリットが高くなることによって気液界面を離脱してからスリット域を離脱するまでに他の Ar 分子や固体壁面と相互作用を引き起こしやすくなり、結果として蒸発量が低下する。特に、壁面に沿って蒸発する分子離脱経路ではその影響が大きく表れる。本研究は、上述のとおりナノスリットの蒸発現象における分子論的描像を明らかにした。

参考文献

(1) Cho, J. H. et al., Nature Reviews Materials, 2 (2016), 16092.

Fig. 1. Computation model; (left) Overview; (right) Side view.