

研究成果報告書

研究テーマ (和文)	熱伝導メカニズムの分子論的解明および熱伝導スイッチング材料の設計		
研究テーマ (英文)	Molecular Mechanism for heat transfer of nanofluids		
研究期間	2019年 ~ 2021年	研究機関名 慶應義塾大学	
研究代表者	氏名	(漢字)	荒井 規允
		(カタカナ)	アライ ノリヨシ
		(英文)	Noriyoshi Arai
	所属機関・職名	慶應義塾大学理工学部・准教授	
共同研究者 (1名をこえる場合は、別紙追加用紙へ)	氏名	(漢字)	
		(カタカナ)	
		(英文)	
	所属機関・職名		

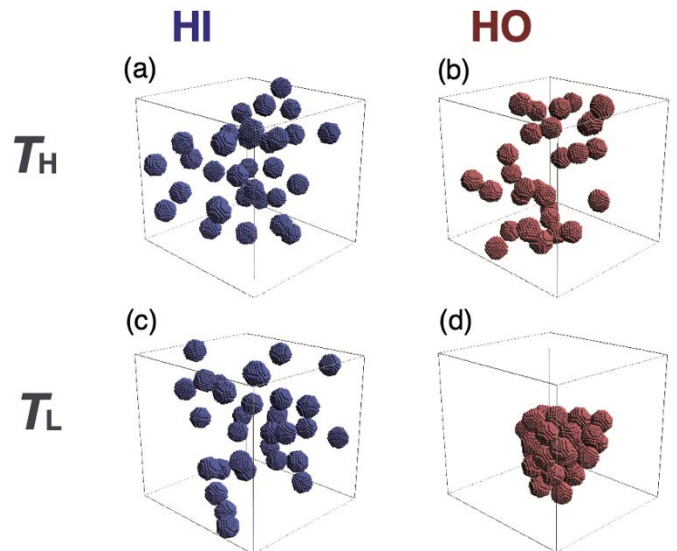
概要

ナノ流体は水や油にナノ粒子(NP)を添付した液体であり、ヒートポンプシステム、集積回路の冷却、高耐熱材料等の設計に利用される。ナノ流体の物性は添加する NP によって左右され、特に熱伝導率に関して様々な研究が進められている。しかし熱伝導率は NP 界面に形成されるナノレイヤー構造や界面熱抵抗、NP 同士の自己集合といった様々な現象が複合的に関わっているため、理解が進んでいない。特に自己集合の影響については、実験によって熱伝導率が向上するという報告だけでなく、反対に低下するという真逆の研究結果が報告されており、未だ熱伝導に対する自己集合の影響は解明されていない。そこで熱伝導メカニズムの分子論的解明の足がかりとして、分子シミュレーションによってナノ流体中の自己集合を再現し、ナノ粒子の自己集合構造と熱伝導率の関係を明らかにすることを目的とした。

水中において自己集合が起こる疎水性ナノ粒子(HO-NP)と分散する親水性ナノ粒子(HI-NP)の2種類を用意し、熱伝導率の比較を行った。自己集合による熱伝導の影響を考察するため、低温域と高温域の温度条件を用意した。つまり、HI-NPは温度によらず分散する一方で、HO-NPは高温条件で分散し、低温条件でのみ自己集合が観察される。NPの体積分率を変化させたときの熱伝導率の変化を計算したところ、HI-NPを添加した方がHO-NPを入れたときよりも高い熱伝導率が得られた。HO-NPにおいては高温時の分散状態では、体積分率が高くなるほど熱伝導率が減少するという結果が得られた。

この原因を調べるため、ナノ粒子表面における水分子に注目した。NPと水分子の動径分布関数を描いたところ、HI-NPに比べ、HO-NP子の周りには水粒子が存在していない。水との相互作用が弱くなるため、HI-NPの方が熱伝導率が高くなっていると予想される。さらにそれぞれの体積分率における、HO-NPの分散状態と自己集合状態での表面積比と熱伝導率の関係を比較した。その結果、自己集合により実効的な表面積が減少することで、熱伝導率が増加していると考えられる。

以上より、自己集合は熱伝導率の向上に寄与するが、そのためにHO-NPを加えると水粒子との距離が増加し熱伝導率が低下する効果もあるということがわかった。



流体中のナノ粒子の分散・自己集合挙動(水は非表示)

発表文献 (この研究を発表した雑誌・図書について記入してください。)						
雑誌	論文課題	Simulation study on the effects of the self-assembly of nanoparticles on thermal conductivity of nanofluids				
	著者名	S. Tanaka, N. Arai, and Y. Kobayashi	雑誌名	Chemical Physics Letters		
	ページ	139129 (5 ページ)	発行年	2 0 2 1	巻号	785
雑誌	論文課題					
	著者名		雑誌名			
	ページ	~	発行年		巻号	
雑誌	論文課題					
	著者名		雑誌名			
	ページ	~	発行年		巻号	
図書	書名					
	著者名					
	出版社		発行年		総ページ	
図書	書名					
	著者名					
	出版社		発行年		総ページ	

英文抄録 (100 語~200 語程度にまとめてください。)

The mechanisms underlying the thermal conductivity behavior of nanofluids have not been completely clarified thus far. This is due to the various competing factors and the lack of a molecular-level understanding of the heat transfer enhancement of nanofluids. In this study, energy-conserving dissipative particle dynamics simulations were conducted to investigate the effects of the self-assembly of nanoparticles on the nanoscale heat transfer properties. We demonstrated that considering the balance between the effects of the distance between the NPs and the solvent and the enhancement in thermal conductivity on adding nanoparticles is important for controlling the thermal conductivity of nanofluids.