

# 流体科学研究所 博士前期課程学生海外発表促進プログラム 報告書

報告日：平成 25 年 10 月 18 日

申請者氏名・所属・学年

羽田 城司 分子熱流動研究分野 工学研究科 博士前期課程 2 年

指導教員名

小原 拓 教授

国際会議名

The 4th International Symposium on Micro and Nano Technology (ISMNT-4)

出張先と日程

Shanghai International Convention Center, Shanghai, China from Oct. 7 to 12, 2013

発表タイトルと著者

Joji Haneda, Gota Kikugawa and Taku Ohara, “Molecular Dynamics Mechanism of Thermal Energy Transport in Liquid Methane Reproduced by All-Atom and United-Atom Models”



## 1. 研究発表の内容

バルクあるいは界面など heterogeneous な液体分子系における熱輸送特性を決定する因子を原理的に明らかにすることは、必要な特性をもつ液体を構成するためにはどのような分子が必要かという問いに解を与え、これらの材料の設計につながる。本研究では最も単純なアルカンであるメタン飽和液からなるバルク流体に対して、AA モデルを用いて温度勾配下の熱伝導を再現する非平衡分子動力学シミュレーションを行い、AA モデルが再現する液体中の熱伝導現象について、熱流束を構成する分子動力学メカニズムを解析し先行研究で明らかになっている UA モデルの結果と比較検討することにより、C-H 間の古典力学的運動自由度が熱伝導率に与える影響とその妥当性を検討したものである。

## 2. 今回の出張・発表で学んだこと

日中韓を中心にナノスケール熱工学の主な研究者が参集する ISMNT-4 に参加し、液体メタンにおける熱エネルギー輸送の分子動力学的機構に関する研究発表を行い参加者と議論すると共に、ナノスケール熱流体工学において用いられる分子動力学シミュレーションの手法を中心に情報収集を行った。国際会議の経験を積んで研究の方向性を見定める事ができ、今後の研究推進に極めて有益であった。また、英語でのコミュニケーション能力向上が今後の課題として明確になった。

## 3. 本プログラムへの提案・感想

本プログラムによる支援は、独立した予算を持たない博士前期課程学生の国際会議発表の機会を広げるものである。英語で自らの研究を全世界へ発信することは研究者に当たり前に求められる能力であり、本プログラムによって実現される海外発表及び国外の研究者との英語での議論は、それらの経験が全くもしくは殆ど無い博士前期課程学生にとって、非常に貴重な経験であり実績にもなる。今後も本プログラムによる支援が継続され多くの学生に海外発表の機会が保障されることを望む。

## 4. 指導教員所見

マイクロ・ナノスケール熱現象の分野で第一線の研究者が多数参加したレベルの高い国際会議であったが、大きな会場での初めての英語による口頭発表であったにもかかわらず、落ち着いてきちんとした発表を行うことができ、座長からも重要な研究であるとの講評をいただいた。国際的な研究者になるための第一歩を理想的な形で踏み出すことができ、本人も得るところが大きかったようである。ご支援に感謝致します。

## 5. 発表時の写真など

