

分野横断プロジェクト	
課題番号	J12B01
課題分野	次世代反応流体科学
研究期間	2012.4～2013.3
継続年数	3年目

[全体概要]

次世代反応流体科学の創成 Frontier Science of Next Generation Reactive Fluid

研究代表者 石本 淳
 サブリーダー1 佐藤 岳彦
 サブリーダー2 丸田 薫
 サブリーダー3 石本 淳

1. 研究目的

ライフサイエンス、燃焼科学、高応答性流体科学の三つの研究領域からなるプロジェクト推進し、生物・化学・高応答流体の各種反応性流動に関する異分野融合型の学理創成を行う。近い将来、反応を伴う流動科学領域は次世代流体科学の主要学問領域として重要な地位を占めることは確実視されていると考えられるが、物理化学的プロセスや熱流動の素過程に多くの未解明な部分を残しているのが現状であり、工学的に十分な検討が行われているとはいいがたい。本プロジェクトにおいて次世代反応性流体科学の学理構築を推進するためには、既存の単一領域の発展型研究から脱却し異分野融合型の新しい発想からなる研究を推進する必要がある。そこで本研究においては、現在の先進流体科学をベースとした上記3研究領域の異分野融合の発想から成る先進的アプローチを行い、次世代反応性流体科学の創成を目指すものである。

2. 研究成果の内容

本年度は研究から3年目に当たり、徐々にではあるが各研究分野間の融合研究成果が形成されつつある。次世代反応性流動に関わる3研究プロジェクトの融合研究の指針と各研究グループによる進捗状況の確認を行った。

特に本年度は高応答性流体プロジェクトと燃焼研究グループの融合研究により「高圧下における微粒化現象と噴霧燃焼挙動の解明」がスタートしたので、この研究に関する初期成果概要を簡単に紹介する。混相流体工学と燃焼工学という異分野を専門とするグループが相互連携を行うことにより、高圧微粒化噴霧燃焼特性の解明と輸送機用新型直噴応用機器の創成が進展し、異分野融合による新発想の研究成果が得られつつある。

近年、自動車用ガソリンエンジン用インジェクタにおいて従来型のポート噴射から直噴化が進んできており、燃料噴霧により直接、高圧シリンダ内の混合器形成と高圧燃焼特性を制御する必要性が生じてきた。そこで本年度においては、まず高圧下における微粒化現象を計算流体力学の立場から解明することを目的とし、スーパーコンピューティングによる高圧噴霧微粒化特性の解明を行った。

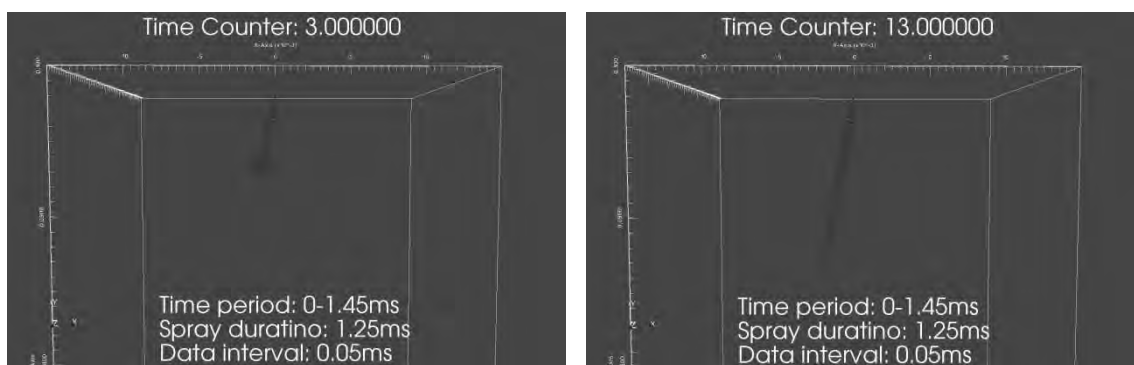


図 1： 高圧条件下における噴霧微粒化液滴群の挙動（容器内圧 5.0MPa）

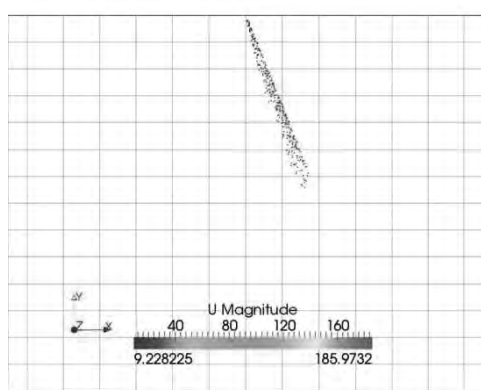


図 2： 高圧条件下における噴霧微粒化液滴群の流速分布

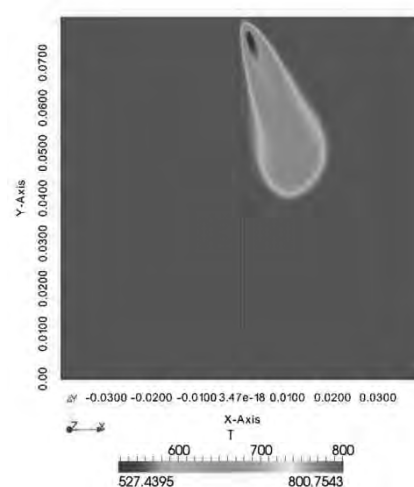


図 3： 高圧条件下における噴霧微粒化液滴群の温度分布

従来型の数値解析法をそのまま高圧噴霧流動に適用すると、微粒化液滴に作用する抗力が正確に評価されず、特に噴射方向が斜め方向の場合、噴霧先端部に実現象とは異なる巻き上がりが生じペネトレーションが正確に評価できない問題があった。また、相変化モデルが高圧条件に対応していないため、本来蒸発しているはずの微細粒子がそのまま停留し続ける等の不具合が散見された。以上の状況を打破するため、今回は高圧条件に対応した噴霧微粒化特性解析用の基盤ソフトウェアを開発し試し計算を行った。その結果、容器内圧 50 気圧の条件下、斜め方向の噴射条件においても安定した計算が進行し、微粒化液滴粒子群の位置情報、ペネトレーション、流速分布、温度分布に関する数値予測が可能であることを示した。本計算手法をさらに高精度化することにより高圧微粒化噴霧燃焼特性の定量予測と輸送機用新型直噴応用機器の創成が進展するものと考えられる。

3. 研究目標の達成状況

震災のため研究の実施が一時的に中断されたが、復旧が完了し共同研究の進展が見られる。ライフサイエンスグループにおいては、細胞・生体組織にかかわる反応・輸送現象をマルチスケールで明らかにし、細胞と流動場の相互作用に関する研究、燃焼グループにおいては利用技術が高度化する燃焼・反応現象の解明・モデル化・制御を通じて、持続可能な社会構築に貢献する環境負荷の低い次世代反応流体科学技術の創出に関する研究、高応答性流体グル

ープにおいては、外的要因に対し特有の反応・応答・機能性を表出化する流体・熱流動を対象とし、燃焼グループとの異分野融合型研究開発を開始するための基盤構築を行った。詳しい内容に関しては次ページ以降の各研究プロジェクト（研究小グループ）の報告内容を参照のこと。

4. まとめと今後の課題

現在のところ、各研究分野間の融合研究成果が形成されつつあり次世代反応性流動に関連する先進的成果を得るに必要な研究体制が整ってきていると言える。現在の研究体制に付加して3プロジェクト間の相互連携を行うことが分野横断型研究としての有効性を外部発信することにつながると考えられる。そこで次年度からはプロジェクト間の相互連携研究テーマとして、高応答性流体プロジェクトを基幹とした、1. ナノ固体窒素粒子噴霧を用いたヒト iPS 細胞の超高熱流束ガラス凍結（ライフグループと連携）、2. 高圧条件下における微粒化噴霧現象ならびにバイオ燃料の微粒化と噴霧燃焼特性（燃焼グループと連携）に関する融合研究を推進することを計画している。

細胞・生体組織における反応・輸送現象に関する研究
Research on Reaction and Transport Phenomena with Cell/Living Tissue

佐藤 岳彦^{1)†}, 小原 拓¹⁾, 太田 信¹⁾,
白井 敦¹⁾, 小宮 敦樹¹⁾, 富田 典子¹⁾

¹⁾東北大学流体科学研究所

†サブリーダー

1. 研究目的

細胞・生体組織にかかわる反応・輸送現象をマルチスケールで明らかにし、細胞と流動場の相互作用に関する基礎学理を構築する。本目的を達成するために、①プラズマ流の物理刺激輸送と細胞反応（佐藤）、②細胞膜輸送と細胞界面流動現象の理論的研究（小原）、③生体適合材料と細胞の相互作用（太田、富田）、④ガラス平板上における HL60 の挙動に対する細胞分化の影響（白井）、⑤物質・熱の細胞膜内輸送現象の実験的研究（小宮）の各研究課題について取り組む。

2. 研究成果の内容

本年度は、上記研究課題に対応して下記研究成果を得た。

①プラズマ流の物理刺激輸送と細胞反応（佐藤）

ミトコンドリア膜電位測定は、初期アポトーシスを判定する手法として用いられている。初期アポトーシスでは、ミトコンドリア膜電位の低下が起こるため、膜電位測定によってアポトーシスの検出が可能である。そこで、プラズマ流により生成された化学種の細胞に与える影響について、ミトコンドリアの膜電位の変化についてフローサイトメーターを利用して解析を行った。図 1 に各暴露条件に対するミトコンドリアの膜電位の変化を示す。グラフの縦軸はミトコンドリア膜電位が高い細胞数を示し、横軸はミトコンドリア膜電位が低い細胞数を示す。(A) Control, (B) プラズマ処理培地 (40 s 照射) と (C) 過酸化水素添加培地 (51 μ M), (D) Positive control である。プラズマ照射培地や過酸化水素への暴露は、Control と同じ傾向を示し、膜電位低下は観察出来なかった。これより、ミトコンドリアへ傷害や初期アポトーシスは本条件下では検出しなかった。

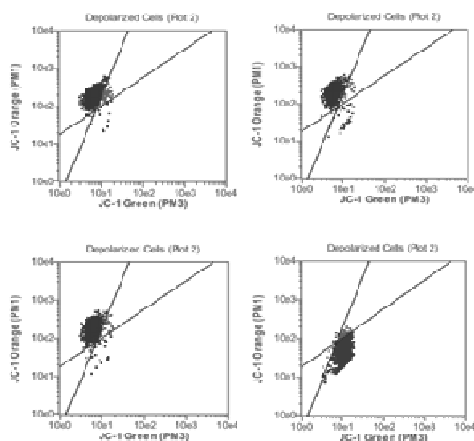


図 1：各暴露条件に対するミトコンドリアの膜電位の変化。(A) Control, (B) 40sec Plasma,

(C) 51uM H₂O₂, (D) Positive Control (50uM CCCP).

②細胞膜輸送と細胞界面流動現象の理論的研究（小原）

脂質分子の自己組織化により水中で形成される二重膜構造の熱輸送特性を解析している。特に、脂質の分子種による違いが大きく現れる二重膜として、DPPC と SMPC の二重膜に対してそれぞれ膜面垂直方向に熱流束を与え、生じる温度分布を計測して二重膜各部の熱抵抗を計測した。図 2 から、単層膜がその脂質分子尾部を向かい合わせて弱く結合している二重膜中央付近の熱抵抗が顕著であること、この部分の熱抵抗は、SMPC の方が DPPC より小さいことなどがわかる。SMPC 単層膜界面の熱抵抗が小さいのは、SMPC 分子の尾部が凹凸に富んだ界面を形成していることによるものと考えられ、他のさまざまな界面熱抵抗と同様の傾向を示しているが、そのメカニズムはさらに検討する必要がある。

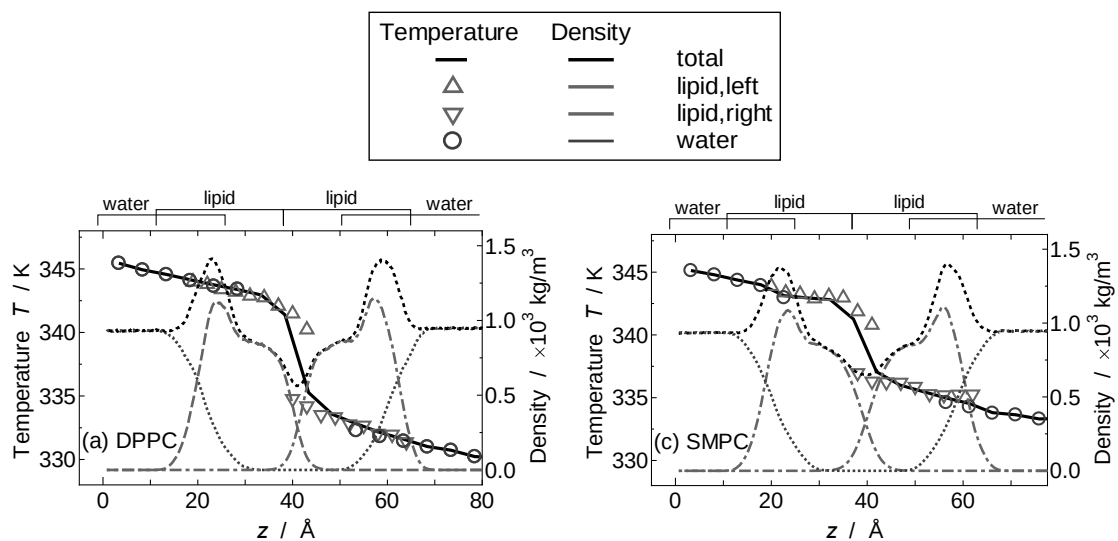


図 2：脂質二重膜垂直方向熱伝導における膜内温度分布. (左)DPPC, (右)SMPC

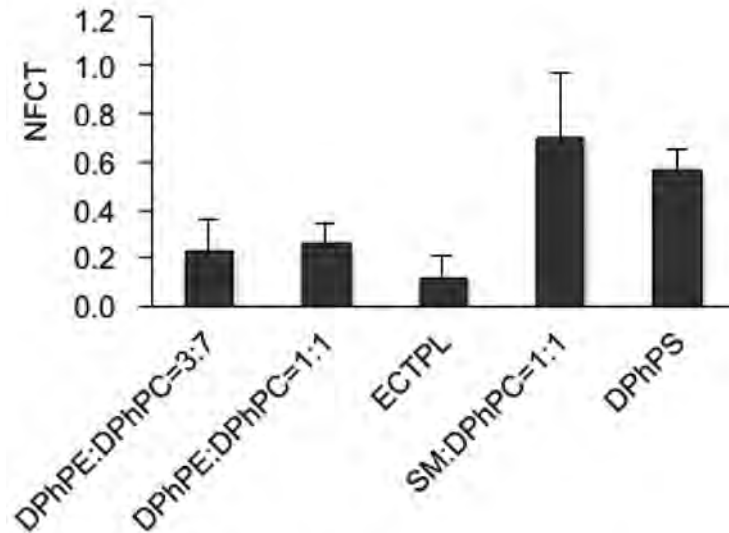
③生体適合材料と細胞の相互作用（太田，富田）

生体適合性材料を用いた生体軟組織の生体外循環システムモデル開発のため、脂質膜の構成要素が膜タンパク質に及ぼす影響について調べた。特に、本研究では、FhuA と呼ばれる β バレル型膜タンパク質について調べた。本型は、典型的な膜タンパク質を構成するが、脂質の影響を受けにくいとされてきた。

Lipidshape	Inverted cone	Truncated cone	Truncated cone	Cylinder	Cone
Dimensionless shape parameter	<1/3	1/3 - 1/2	1/2 - 1	~ 1	> 1
Phase	Spherical micelle	Cylindrical micelle	Lipid vesicle	Planar bilayer	Inverted micelle (Hexagonal (H _{II}))

図 3：脂質の形状と脂質膜の形状について

脂質膜を構成する脂質の形状は、図 3 のように分けられ、脂質膜の形状も決まってくる。



これらの膜タンパク質のエレクトロフィジオロジーへの影響を調べた。

図 4：一定時間における膜タンパク質孔の開鎖回数

その結果図 4 のように、様々な脂質において、一定時間における膜タンパク質の開鎖回数に差があることが分かった。これは、 β バレル型膜タンパク質においても孔を閉じる(=形状を変化させる)のに、周りの脂質の影響を受けていることを表す。次年度は、さらに大きな孔(=脂質膜の強度を低下させるため)を持つ膜タンパク質を調べる。

④ガラス平板上における HL60 の挙動に対する細胞分化の影響（白井）

好中球のモデル細胞である HL60 は、20%FBS を含む RPMI-1640 Medium を培地とし、CO₂ 濃度 5%，37℃で培養した。ここで、atRA(all-trans Retinoic Acid)を 99.5%エタノールに溶解させた後、HL60 の培地に最終濃度 1 μ M となるように添加し、5 日間培養した。その結果、NBT 還元法により 90%以上の細胞が分化していることを確認した。実験には、分化した細胞を PBS で洗浄した後に、濃度を 5 $\times 10^5$ cells/ml に調節して用いた。また、比較用として atRA を添加せずに培養した細胞も同濃度に調節して準備した。

傾斜遠心顕微鏡を用いて、ガラス平板上に押しつけられながら移動する HL60 細胞の挙動を観察した。まず、図 5 に、ガラス平板に対する付着率の比較を示す。ここで、血球挙動の PTV 計測における計測誤差を考慮し、移動速度が 5.27 μ m/s 以下の細胞を付着細胞と定義した。図より、HL60 は分化により付着率がほぼ倍増することが明瞭である。これは、分化により HL60 の表面に接着分子が発現したことに起因すると考えられる。次に、図 6 に、付着細胞を除いた細胞について、平均移動速度の比較を示す。図より、分化した HL60 の方が平均移動速度が小さい。ここの血球の挙動を観察したところ、分化した細胞では stick-slip 運動が確認された。これが付着率の上昇および平均移動速度の低下の一因であると考えられる。ただし、平均移動速度の差は、付着率の差と比較して著しく小さいことから、slip 状態の血球の移動速度に対しては、分化の有無はほとんど影響がないといえる。

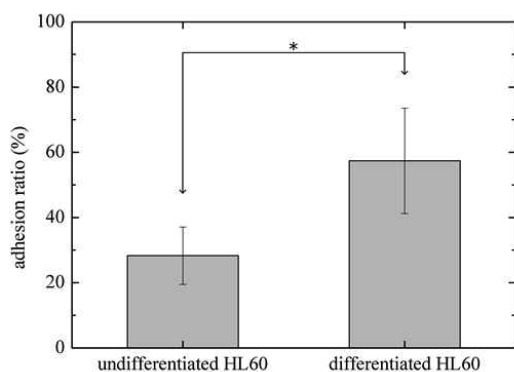


図 5: 分化による HL60 の付着率の比較
(* $p < 0.001$)

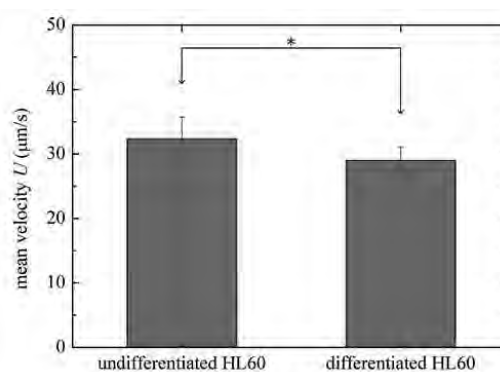
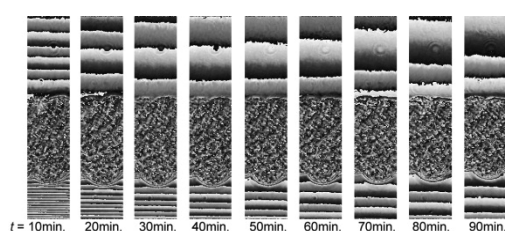


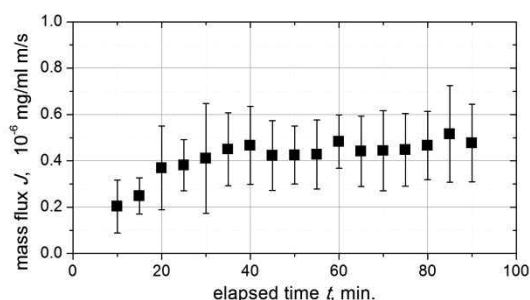
図 6: 分化による HL60 の平均移動速度の比較
(* $p < 0.001$)

⑤物質・熱の細胞膜内輸送現象の実験的研究（小宮）

高精度位相シフト干渉計を用いて、サブミリスケールの物質輸送可視化を行った。生体膜を模擬したマイクロチャネルを通過する物質輸送現象である束縛拡散の定量的評価を行った。結果を図 7 に示す。図 7(a) は Lysozyme の拡散実験結果であり、上部に純水を、下部に Lysozyme 溶液を満たして行った結果である。図中央のグレー部分は膜を示しており、膜内は初期条件として下部溶液が満たされている。図からわかるように、両液混合後、直ちに上部純水側に Lysozyme が拡散を開始するが、その後、濃度勾配は一旦緩やかとなり、再び急勾配となる。これは、拡散初期においては膜内に存在した Lysozyme が純水側に拡散するが、その後の下部溶液からの Lysozyme の供給が足らず、膜内を通過するのに時間を要することを意味しており、マイクロチャネルという物理的空間制限により、物質流束が制御可能であることを示している。図 7(b) は、拡散開始からの各時刻におけるチャネル端近傍の Lysozyme 物質流束の変化を表している。時間の経過とともに物質流束は一定値に収束することがわかる。



(a) 非定常拡散場の可視化結果



(b) 各時刻における物質流束の変化

図 7: マイクロチャネルによる Lysozyme 物質流束の制御

3. 研究目標の達成状況

本年度の研究目標は概ね達成し、順調に研究を遂行している。各研究課題に対する個別の達成状況は下記の通りである。

①プラズマ流の物理刺激輸送と細胞反応（佐藤）

本年度は、プラズマ流の刺激に対するミトコンドリアの膜電位解析を進め、弱い刺激に

においては、プラズマ流による傷害を受けないことを明らかにした。これより、本条件下では初期アポトーシスが発生しないことを示した。

②細胞膜輸送と細胞界面流動現象の理論的研究（小原）

脂質二重膜の熱輸送解析を続行し、単層膜界面の熱抵抗について興味深い特性を見出した。

③生体適合材料と細胞の相互作用（太田、富田）

細胞表面に存在するタンパク質の脂質膜との相互作用について、脂質膜の影響を受けることをβバレル型膜タンパク質でも存在する可能性を示唆した。

④ガラス平板上における HL60 の挙動に対する細胞分化の影響（白井）

分化した HL60 細胞を用いた実験により、当初の目標通りに、細胞の分化が HL60 の挙動に影響を与えることが示された。

⑤物質・熱の細胞膜内輸送現象の実験的研究（小宮）

本年度は、マイクロチャネル近傍のタンパク質物質移動過程を詳細観察し、束縛拡散における物質流束および見かけの物質拡散係数導出法を検討することに焦点を絞り、実験的アプローチを中心に研究を遂行した。諸種条件下におけるマイクロチャネル近傍の非定常濃度場を定量的に計測できたことから、全体としては 80%の達成度と評価できる。

4. まとめと今後の課題

今後の課題については、下記の通りである。

①プラズマ流の物理刺激輸送と細胞反応（佐藤）

ミトコンドリアの膜電位の計測から、細胞に初期アポトーシスが誘導されないことが示されたが、網羅的遺伝子解析と比較しどのような条件で初期アポトーシスが誘導されるのかについて検証する。

②細胞膜輸送と細胞界面流動現象の理論的研究（小原）

単層膜界面の熱輸送特性を決定するメカニズムを解析する必要がある。また、運動量の伝搬メカニズムと脂質二重膜の摩擦特性の解明が大きな課題として残っている。

③生体適合材料と細胞の相互作用（太田、富田）

今後、さらに大きな孔を構成する膜タンパク質について調べる。

④ガラス平板上における HL60 の挙動に対する細胞分化の影響（白井）

従来の研究では未分化の HL60 を用いてきたが、移動する細胞の平均移動速度については、分化の有無はあまり影響がないことが明らかとなった。ただし、血管内皮細胞基板を用いた場合、内皮細胞側の接着分子の影響が現れると考えられる。そのため、次年度は、HUVEC を培養したガラス平板を用い、分化の有無による HL60 の挙動を比較する。また、接着分子以外の要因がないかを確認するために、タンパクの結合を阻害する MPC でガラス平板をコーティングして挙動を比較する。

⑤物質・熱の細胞膜内輸送現象の実験的研究（小宮）

マイクロチャネル近傍の非定常濃度場可視化技術の確立および物質流束の同定法の確立を図った。得られた実験結果より、干渉縞画像から定量的な物質流束の導出を行うことができ、自由拡散の場合と異なる物質流束を求めることができた。今後は、マイクロチャネル径を変えたパラメトリックな実験を行っていく。

5. 研究成果（※は別刷あり）

1) 学術雑誌（査読つき国際会議、解説等を含む）

[1] Hidemasa Fujita, Seiji Kanazawa, Kiyonobu Ohtani, Atsuki Komiya and Takehiko Sato:

Spatiotemporal analysis of propagation mechanism of positive primary streamer in water, *Journal of Applied Physics*, Vol. 113, Issue 11, (2013), article no. 113304 (7 pages).

- [2] A. Shirai and S. Masuda: Numerical Simulation of Passage of a Neutrophil Through a Rectangular Channel with a Moderate Constriction, *PLoS ONE*, Vol. 8, No. 3 (2013), e59416.
- [3] A. Shirai, H. Sato and T. Hayase: Motion of fMLP-Stimulated HL60 Cells on HUVEC Cultured on a Flat Glass Plate, *Surface Modification Technologies XXVI*, Ecully, (2012/6/20-22), 83-91.
- [4] J.F. Torres, A. Komiya, J. Okajima and S. Maruyama: Measurement of the Molecular Mass Dependence of the Mass Diffusion Coefficient in Protein Aqueous Solutions, *Defects and Diffusion Forum*, Vol.326-328 (2012), pp. 452-458.
- [5] Tomita N, Mohammad MM, Niedzwiecki DJ, Ohta M, Movileanu L.: Does the lipid environment impact the open-state conductance of an engineered β -barrel protein nanopore?, *Biochim Biophys. Acta. Biomembrane*, Vol. 1828(3) (2013), pp. 1057-65.

2) 国際会議・国内学会・研究会・口頭発表等

- [1] Takehiko Sato, Mayo Yokoyama and Kohei Johkura: Gene Expression Analysis Using a Microarray for Hela Cells Exposed to a Plasma Flow, *Book of abstracts of the 9th International Bioelectrics Symposium (BIOELECTRICS 2012)*, Kumamoto, (2012), Paper No. O-23.
- [2] Mayo Yokoyama, Takehiko Sato and Kohei Johkura: Comprehensive Gene Expression Analysis of HeLa Cells in Response to Plasma Stimuli, *Proceedings of the Ninth International Conference on Flow Dynamics*, Sendai, (2012), pp.748-749.
- [3] Hidemasa Fujita, Seiji Kanazawa, Kiyonobu Ohtani, Atsuki Komiya and Takehiko Sato: Development of Visualization Methods of Streamers in Water, *Proceedings of the Twelfth International Symposium on Advanced Fluid Information and Transdisciplinary Fluid Integration*, Sendai, (2012), pp.142-143.
- [4] Hidemasa Fujita, Seiji Kanazawa, Kiyonobu Ohtani, Atsuki Komiya and Takehiko Sato: Propagation Process of Streamer Discharge in Water, *Proceedings of the Ninth International Conference on Flow Dynamics*, Sendai, (2012), pp.166-167.
- [5] A. Shirai, T. Umimoto, H. Uranuma and T. Hayase: INFLUENCE OF PRESSING FORCE ON MOTION OF HL60 CELLS ON HUVEC SUBSTRATE, *18th Congress of the European Society of Biomechanics (ESB2012)*, Lisbon, (2012/7/1-4), Presentation1717.
- [6] A. Komiya and J. Chevalier: Experimental Trial to Active Control of Protein Mass Flux in Hindered Diffusion Field, *Proceedings of the 23rd International Symposium on Transport Phenomena*, New Zealand, (2012), CD-ROM 268.
- [7] 佐藤岳彦: 大気圧低温プラズマ流のラジカル輸送機構と滅菌機構, スマート材料・デバイスの発展と技術イノベーション, (2012). (招待講演)
- [8] 藤田英理, 金澤誠司, 大谷清伸, 小宮敦樹, 佐藤岳彦: 水中プラズマのストリーマ形成過程, 第22回環境工学総合シンポジウム2012講演論文集, (2012), pp.209-210.
- [9] 佐藤岳彦: 大気圧プラズマのバイオ・医療に関する基礎と応用, 大気圧プラズマの産業応用に関する特別講演会, (2012). (招待講演)
- [10] 佐藤岳彦, 藤田英理, 金澤誠司, 大谷清伸, 小宮敦樹: 水中ストリーマ進展過程の可視化, 日本機械学会2012年度年次大会, (2012), 講演番号: S055012.

- [11] 佐藤岳彦: プラズマの生体作用, 第 2 回パルスパワーおよび放電の農水系利用調査専門委員会, (2012).
- [12] 佐藤岳彦: 大気圧プラズマ流の照射による HeLa 細胞の生体応答, 第 28 回九州・山口プラズマ研究会, (2012). (招待講演)
- [13] 佐藤岳彦, 横山茉代, 城倉浩平: 大気圧プラズマ流処理培地への暴露による HeLa 細胞の機能応答, 日本機械学会第 25 回バイオエンジニアリング部門講演会, (2013).
- [14] 杉山, 白井, 早瀬: ガラス平板上における HL60 の挙動に与える分化の影響, 日本機械学会第 25 回バイオエンジニアリング講演会講演論文集, つくば, (2013/1/9-11), 331-332.

3) その他(特許, 受賞, マスコミ発表等)

(特許) 該当なし

(受賞) 該当なし

(マスコミ発表) 該当なし

燃焼・反応現象の解明と制御に関する研究
Research on Combustion and Chemical Kinetics

丸田 薫^{1†}, 小林 秀昭¹⁾, 中村 寿¹⁾, 店橋 護²⁾, Sergey Minaev³⁾, Yiguang Ju⁴⁾
¹⁾東北大学流体科学研究所, ²⁾東京工業大学, ³⁾SB RAS, ITAM, ⁴⁾Princeton University, MAE,
†サブリーダー

1. 研究目的

バイオ燃料、水素、石炭改質燃料など低環境負荷およびエネルギーセキュリティに優れた多様な燃料の極限環境における燃焼機構解明と先端的数値解析を可能にする反応機構、計算技術を確立する。また、新規高圧燃料改質炉や廃棄物処理炉内の基礎特性を明らかにする。さらに各種燃料の詳細化学反応機構の高度化に向けて、独自手法である温度分布制御型マイクロフローリアクタへの燃料適合範囲を発展するとともに、光学計測や表面反応の評価へと展開する。

2. 研究成果の内容

平成 24 年度主たる研究成果の内容は以下の通りである。

① 燃焼・反応現象の理解（乱流燃焼特性）

- ・CH 比が異なる元燃料の改質ガスに対して、CCS を想定した純酸素・高濃度二酸化炭素予混合気に対する高圧乱流燃焼実験を実施した（図 1）。
- ・次世代バイオ燃料であるプロパノールに対し円形ノズルバーナによる高圧乱流燃焼実験を実施した（図 2）。
- ・プロパノール異性体における熱分解過程の違いが乱流火炎構造におよぼす影響について、詳細反応経路解析と 2 段反応モデルによる不安定性解析によってそのメカニズムを明らかにした。
- ・高圧燃料改質炉内の気体混合部における純酸素燃焼基礎特性を明らかにした。
- ・廃棄物焼却炉内の燃焼数値解析により低酸素高温空気燃焼の有効性を明らかにした。
- ・低酸素高温空気燃焼条件におけるポリマーの熱分解過程を明らかにした。

② 燃焼・反応現象の理解（燃料の着火特性）

- ・燃料の着火特性を計測するためのマイクロリアクタについて、ガソリン燃料のオクタン価評価能の提示に続き、正ヘプタンへのトルエン添加効果とその機構、およびセタン価評価能の提示（図 3）を行った。
- ・マイクロリアクタ内の化学種の分光計測に着手し、リアクタ内でも光学計測（OH 基）が可視化できることを示した。
- ・マイクロリアクタにおける壁の化学的消炎作用について実験および数値計算により検討し、従来から使用されてきた壁でのラジカル失活モデルは、失活効果を過大評価していることを示した。

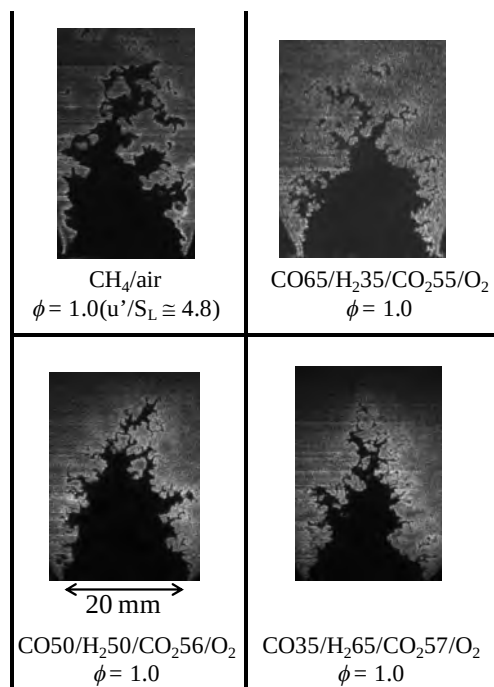
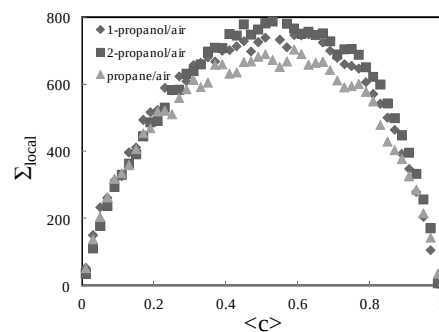
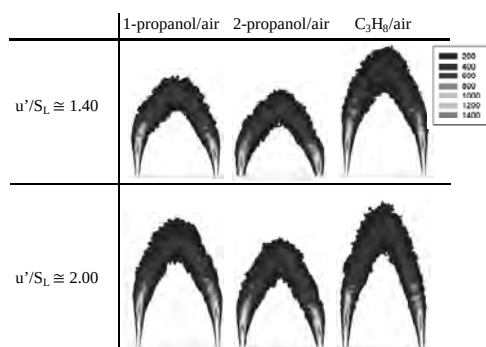


図 1 : CO/H₂ 比が異なる純酸素・高濃度 CO₂ 高圧乱流予混合火炎の OH-PLIF 画像 (0.5 MPa)



(a) 局所火炎面密度分布
(u'/SL=1.4)

(b) 火炎面密度と反応進行変数の関係 (u'

図 2 : プロパノール異性体における火炎密度分布の違い (0.5 MPa)

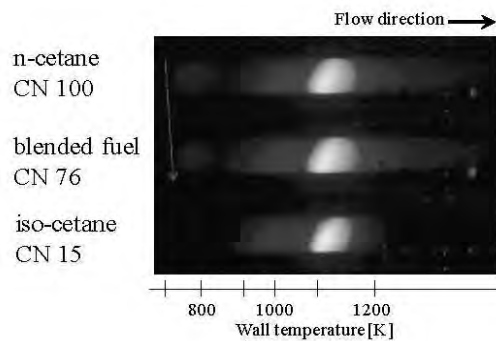


図 3 : マイクロフローリアクタにおける Weak flame がセタン価に依存して変化する様子

3. 研究目標の達成状況

計画に基づき、平成 24 年度も順調に推移している。

4. まとめと今後の課題

各サブトピックの基盤技術の高度化、計測手段の展開を実施した。平成 25 年度はこれらをさらに押し進め、実験から素反応計算、さらには直接数値計算までを総合した研究を実施することが課題である。

5. 研究成果

1) 学術雑誌（査読つき国際会議、解説等を含む）

- [1] J. Wang, Z. Huang, H. Kobayashi, Y. Ogami: Laminar burning velocities and flame characteristics of CO/H₂/CO₂/O₂ mixtures, *International Journal of Hydrogen Energy*, Vol.37(2012), pp.19158-19167.
- [2] Y. Ogami, M. Mori, K. Yoshinaga, H. Kobayashi: Experimental Study on Polymer Pyrolysis in High-Temperature Air Diluted by H₂O and CO₂ Using Stagnation-Point Flow, *Combustion Science and Technology*, Vol.184 (2012), pp.735-749.
- [3] 傳田知広, 中山剛, 内山武, 岩崎敏彦, 鈴木康夫, 小林秀昭, 大上泰寛, 奥山昌紀: 数値シミュレーションによるストーカ炉内燃焼挙動解析, 日本機械学会論文集 78 巻 789 号,(2012), pp. 65-69.
- [4] 熊上学, 加藤裕之, 白川駿, 奥山昌紀, 鈴木拓朗, 大上泰寛, 小林秀昭: 高圧環境における同軸酸素噴流拡散火炎の安定性に関する研究, 日本燃焼学会誌第54巻170号,(2012), pp.269-278.
- [5] J. Wang, F. Matsuno, M. Okuyama, Y. Ogami, H. Kobayashi, Z. Huang: Flame front characteristics of turbulent premixed flames diluted with CO₂ and H₂O at high pressure and high temperature, *Proceedings of the Combustion Institute*, Vol.34 (2013), pp. 1429-1436.
- [6] H. Kobayashi, Y. Otawara, Jinhua Wang, F. Matsuno, Y. Ogami, M. Okuyama, T. Kudo, S. Kadowaki: Turbulent premixed flame characteristics of a CO/H₂/O₂ mixture highly diluted with CO₂ in a high-pressure environment, *Proceedings of the Combustion Institute*, Vol.34 (2013), pp.1437-1445.
- [7] Aiwu Fan, Jianlong Wan, Kaoru Maruta, Hisashi Nakamura, Hong Yao: Flame dynamics in a heated meso-scale radial channel, *Proceedings of the Combustion Institute*, Vol.34, Issue 2:3351-3359 (2013).
- [8] Roman Fursenko, Sergey Minaev, Hisashi Nakamura, Takuya Tezuka, Susumu Hasegawa, Koichi Takase, Xing Li, Masato Katsuta, Masao Kikuchi, Kaoru Maruta: Cellular and sporadic flame regimes of low-Lewis-number stretched remixed flames, *Proceedings of the Combustion Institute*, Vol.34, Issue 1:981-988 (2013).
- [9] Satoshi Suzuki, Mikito Hori, Hisashi Nakamura, Takuya Tezuka, Susumu Hasegawa and Kaoru Maruta: Study on cetane number dependence of diesel surrogates/air weak flames in a micro flow reactor with a controlled temperature profile, *Proceedings of the Combustion Institute*, Vol.34, Issue 2:3411-3417 (2013).
- [10] Hisashi Nakamura, Akira Yamamoto, Mikito Hori, Takuya Tezuka, Susumu Hasegawa, Kaoru Maruta: Study on pressure dependences of ethanol oxidation by separated weak flames in a micro flow reactor with a controlled temperature profile, *Proceedings of the Combustion Institute*, Vol.34, Issue 2:3435-3443 (2013).

- [11] Mikito Hori, Hisashi Nakamura, Takuya Tezuka, Susumu Hasegawa, Kaoru Maruta: Characteristics of n-heptane and toluene weak flames in a micro flow reactor with a controlled temperature profile, *Proceedings of the Combustion Institute*, Vol.34, Issue 2:3419-3426 (2013).
- [12] Hisashi Nakamura, Aiwu Fan, Sergey Minaev, Evgeniy Sereshchenko, Roman Fursenko, Yosuke Tsuboi, Kaoru Maruta: Bifurcations and negative propagation speeds of methane/air premixed flames with repetitive extinction and ignition in a heated microchannel, *Combustion and Flame*, Vol.159, Issue 4 : 1631-1643 (2012).
- [13] Dae Keun Lee and Kaoru Maruta: Heat recirculation effects on flame propagation and flame structure in a mesoscale tube, *Combustion Theory and Modelling*, Vol.16, Issue 3:507-536 (2012).
- [14] Mikito Hori, Akira Yamamoto, Hisashi Nakamura, Takuya Tezuka, Susumu Hasegawa and Kaoru Maruta: Study on octane number dependence of PRF/air weak flames at 1-5 atm in a micro flow reactor with a controlled temperature profile, *Combustion and Flame*, Vol.159, Issue 3 : 959-967 (2012).

2) 国際会議・国内学会・研究会・口頭発表等

- [1] H. Kobayashi, Y. Otawara, Jinhua Wang, F. Matsuno, Y. Ogami, M. Okuyama, T. Kudo, S. Kadowaki: Turbulent premixed flame characteristics of a CO/H₂/O₂ mixture highly diluted with CO₂ in a high-pressure environment, *34th International Symposium on Combustion*, 2A10, (2012/7/29-8/3).
- [2] S. Souyoshi, T. Suzuki, T. Kudo, H. Kobayashi: Turbulent Combustion Characteristics of Propanol Isomers in a High-Pressure Environment, *34th International Symposium on Combustion*, W4P093, (2012/7/29-8/3).
- [3] S. Kadowaki, H. Kobayashi: Formation of Cellular Fronts in High-Temperature Premixed Flames, *The Twelfth International Symposium on Advanced Fluid Information and Transdisciplinary Fluid Integration (AFI/TFI-2012)*, (2012), pp.46-47. (2012/9/19-21).
- [4] S. Souyoshi, T. Suzuki, T. Kudo, H. Kobayashi: Combustion Characteristics of Propanol/Air Turbulent Premixed Flames at High Pressure, *Ninth International Conference on Flow Dynamics (9th ICFD 2012)*, OS11-40, (2012/9/19-21).
- [5] 大島卓也, 小林秀昭, 門脇敏, 高温予混合火炎の数値解析: 固有不安定性に及ぼす未燃ガス温度とレイス数の影響, 日本機械学会北陸信越支部 第 49 期総会・講演会 講演論文集 (2012) 0516.(2012/3/10).
- [6] 宗吉俊吾, 鈴木拓朗, 工藤琢, 小林秀昭: アルコール系バイオ燃料の高圧乱流燃焼特性に関する研究, 第49回日本伝熱シンポジウム2012 講演論文集, (2012), pp.441-442. (2012/5/30-6/1).
- [7] 傳田知広, 中山剛, 内山武, 岩崎敏彦, 小林秀昭: 数値シミュレーションによるストーカ炉内燃焼挙動解析 (第二報), 第 22 回環境工学総合シンポジウム 2012,(2012)205, (2012/7/4-7/6).
- [8] 白川駿, 熊上学, 工藤琢, 小林秀昭: 高圧環境における同軸酸素噴流拡散火炎の安定化機構, 日本機械学会熱工学コンファレンス 2012, (2012), pp.93-94. (2012/11/17-11/18).
- [9] 鈴木拓朗, 宗吉俊吾, 工藤琢, 小林秀昭: 高圧環境におけるアルコール系バイオ燃料の乱流燃焼メカニズムに関する研究, 第 50 回燃焼シンポジウム講演論文集, (2012), pp.44-45. (2012/12/5-7).
- [10] 青木佑丞, 山崎渉, 小林秀昭, 門脇敏: 高温予混合火炎の数値解析: 固有不安定性による三次元セル状火炎の形成, 第 50 回燃焼シンポジウム講演論文集, (2012), pp.146-147. (2012/12/5-7).

- [11] 熊上学, 加藤裕之, 白川駿, 奥山昌紀, 鈴木拓朗, 大上泰寛, 小林秀昭: 高圧環境における同軸酸素噴流拡散火炎の安定性に及ぼす乱流強化の影響, 第 50 回燃焼シンポジウム講演論文集, (2012), pp.564-565. (2012/12/5-7).
- [12] 高瀬 光一, Xing Li, 中村 寿, 手塚 卓也, 長谷川 進, 勝田 真登, 菊池 政雄, 丸田 薫: 微小重力場における低伸長率 $\text{CH}_4/\text{O}_2/\text{Xe}$ 対向流予混合場中の球状火炎, 第 49 回日本伝熱シンポジウム講演論文集 Vol. I + II, (2012), 255-256 頁.
- [13] 鈴木 聡史, 堀 幹人, 手塚 卓也, 長谷川 進, 中村 寿, 丸田 薫: 温度分布制御型マイクロフローリアクタを用いたディーゼルサロゲート燃料のセタン価と燃焼特性第 49 回日本伝熱シンポジウム講演論文集 Vol. I + II, (2012), 251-252 頁.
- [14] 鎌田 大輝, 中村 寿, 手塚 卓也, 長谷川 進, 丸田 薫: 温度分布制御型マイクロフローリアクタを用いた低級アルカン燃料の Weak flame の高分解能観察, 第 49 回日本伝熱シンポジウム講演論文集 Vol. I + II, (2012), 399-400 頁.
- [15] 中村 寿, 堀 幹人, 手塚 卓也, 長谷川 進, 丸田 薫: 温度分布制御マイクロフローリアクタによるエタノール酸化反応の圧力依存性, 第 50 回燃焼シンポジウム講演論文集, (2012), 438-439 頁.
- [16] Xing Li, Li Jia, 大西孝和, 手塚卓也, 長谷川進, 丸田 薫: Study on Ignition and Combustion Characteristics of $\text{CH}_4/\text{O}_2/\text{C O}_2$ Mixture Using a Micro Flow Reactor with a Controlled Temperature Profile, 第 50 回燃焼シンポジウム講演論文集, (2012), 194-195 頁.
- [17] 高瀬 光一, Xing Li, 中村 寿, 手塚 卓也, 長谷川 進, 勝田 真登, 菊池 政雄, 丸田 薫: 微小重力場における低伸長率 $\text{CH}_4/\text{O}_2/\text{Xe}$ 対向流予混合火炎の球状火炎への遷移, 第 50 回燃焼シンポジウム講演論文集, (2012), 278-279 頁.
- [18] 鎌田 大輝, 手塚 卓也, 長谷川 進, 丸田 薫: 温度分布制御型マイクロフローリアクタを用いた天然ガス成分燃料の着火・燃焼特性に関する研究, 第 50 回燃焼シンポジウム講演論文集, (2012), 22-23 頁.
- [19] 鈴木 聡史, 中村 寿, 手塚 卓也, 長谷川 進, 丸田 薫: 温度分布制御型マイクロフローリアクタにおけるディーゼル基準燃料のすす生成, 第 50 回燃焼シンポジウム講演論文集, (2012), 190-191 頁.

高応答性流体の異分野融合展開

Development of the Different Academic Field Integration of High Responsible Fluid

石本 淳^{1†}, 西山 秀哉¹⁾, 高奈 秀匡¹⁾, 徳増 崇¹⁾, 寒川 誠二¹⁾, 久保田 智広¹⁾
Kozo Saito²⁾, 姫野 武洋³⁾, 新城 淳史⁴⁾, 岡村 崇弘⁵⁾, 松浦 一雄⁶⁾, 井上 元⁷⁾

¹⁾東北大流体研, ²⁾IR4TD, University of Kentucky, USA, ³⁾東京大学大学院,
⁴⁾JAXA 研究開発本部, ⁵⁾KEK 素核研低温, ⁶⁾愛媛大学大学院, ⁷⁾京都大学大学院
†サブリーダー

1. 研究目的

外的要因に対し特有の反応・応答・機能性を表出化する流体・熱流動を対象とし、その異分野融合型研究開発手法を通して、ナノ機能性創出、反応性界面物理、環境調和型エネルギー、低炭素社会構築、リサイクル科学、流体－固体材料連成科学への学術的貢献と先端応用展開を目指す。各小研究グループにおける研究目標は以下となる。

① サステナブル反応性微粒化・界面現象に関する研究 (石本 G)

外的要因に対し特有の反応・応答・機能性を表出化する流体の微粒化・界面現象に関して、その異分野融合型研究開発手法を通して、新エネルギー循環科学への学術的貢献と先端応用展開を目指す。

② プラズマチューブによる管内微粒子流動制御 (西山・高奈 G)

近年、自動車の排気ガスや工場から発する煤煙などによる大気汚染は深刻化しており、環境への配慮が責務である産業界にとっては環境汚染対策が急務の課題になっている。そこで本研究では、大気汚染微粒子の除去ならびに高効率微粒子搬送技術の確立を目指し、空気を誘電体バリア放電(Dielectric Barrier Discharge)を用いて活性化させた管内において、微粒子の攪拌・搬送及び浄化を可能とするプラズマチューブを提案するとともに、その特性を明らかにすることを目的とする。

③ PEFC 触媒層の酸素、プロトン輸送性能の評価シミュレータの構築 (徳増 G)

固体高分子形燃料電池(PEFC)は化石燃料に代わる次世代電源として期待が大きいが高まっているが、その利用効率を増加させるには触媒層で十分な反応を生じさせる必要がある。現在、分極が大きいのはカソード側の触媒層であり、この分極を低下させるにはカソード側触媒層で触媒表面に十分な量のプロトン、酸素を供給する必要がある。触媒層内では触媒表面や担持カーボンはアイオノマーと呼ばれる厚さ数 nm の高分子超薄膜で覆われており、プロトンはこのアイオノマー内を移動して触媒表面に到達し、酸素分子はこのアイオノマーを透過して触媒表面に到達する。このアイオノマーは厚すぎると酸素透過を阻害し、薄すぎるとプロトン輸送を阻害するため、触媒層で効率よく反応を起こすためには、このアイオノマー内部におけるプロトンおよび酸素のナノスケール輸送現象を解明し、その知見を元に触媒層の最適設計を行う必要がある。このような理由から、本研究では東北大学側が分子動力学法を用いてアイオノマー内のプロトン輸送現象、酸素透過現象を解明する。また九州大学側では触媒層の多孔体構造を数値的に再現してその内部の輸送現象をマクロ方程式により解析するシミュレータを開発し、最終的にはこのマクロシミュレータに分子動力学法より得られたプロトン輸送、酸素透過モデルを組み込むことにより PEFC 触媒層の包括的な性能を予測できるマルチスケールシミュレータを確立することを目的とする。

- ④ 計算と実験の融合によるプラズマとナノ構造表面界面相互作用に関する研究（寒川 G）
ワイヤレス測定システムを実証し、測定適用可能範囲を明らかにする。さらに、ダメージ・エッチング形状予測のためのデータベースを拡充する。これらを測定システムへと統合する。これらのことから、実用的なシステムへと完成度を高める。一方で、開発したセンサを用いてプラズマ-固体表面相互作用の解明を進める。

2. 研究成果の内容

外的要因に対し特有の反応・応答・機能性を表出化する流体・熱流動を対象とし、その異分野融合研究を推進する。具体的には、1) サステナブル反応性微粒化・界面現象に関する研究（石本グループ）、2) 環境浄化・エネルギー促進用反応性混相プラズマ流動システムの構築（西山・高奈グループ）、3) プラズマ固体相互作用の解明とナノ界面制御（寒川・Huangグループ）、4) 燃料電池内部の反応流動現象のマルチスケール解析（徳増グループ）の4グループにより研究を実施した。本年度は、上記研究課題に対して以下の研究成果を得た。

① サステナブル反応性微粒化・界面現象に関する研究（石本 G）

研究成果に関しては、全体の研究概要を参考のこと。

② プラズマチューブによる管内微粒子流動制御（西山・高奈 G）

図1(a)(b)に実験装置の概略図及びプラズマチューブの断面図をそれぞれ示す。表裏に幅5 mmの一对の螺旋状の銅電極を有する内径12 mm及び20 mmのテフロン製の長さ100 mmのプラズマチューブを製作し、大気圧・室温の下で放電を行った。なお、プラズマチューブの外壁及び内壁には幅5 mmの銅電極が3 mm及び4 mmの間隔で交互に螺旋状に巻きつけられており、電極角度は45°である。流れのない状態で管中央底部に30 nmのアルミナ粒子を静置し、±14 kV程度の電圧を1 kHzの正弦波で印加すると、管内微粒子は静電気力により攪拌されながら管軸方向にプラズマアクトチュエータ効果により搬送される。

図2に14.3 kVppを1 kHzでパルス状に印加した際の数値計算により得られたプラズマチューブ内の電界強度分布及び微粒子の軌道を示す。なお、粒子の初期導入位置 r_i は、管入口の $r_i = 4$ mm、 $\theta_i = 30^\circ$ である。粒子径が50 nm及び1 μm の場合では、静電気力により電極間において電界の向きに応じて半径方向に振動しつつ、誘起流により軸方向に搬送される。一方、10 μm の場合では、慣性力が大きいと振幅がより大きく、静電気力の小さな領域では、重力により鉛直下向きに下降しながら軸方向に搬送される。また、振幅は電界強度の高い壁面近傍においてより大きい。

図3にプラズマチューブ出口における粒子速度を様々な粒径及び粒子の初期半径位置に対して示す。粒子の初期位置が管中心軸に近いほど管出口における粒子速度が高い。これは、管中心に近いほど主流域で粒子が加速されるためである。また、特に粒子の初期位置が壁面近傍（ $r_i = 4$ mm）の場合、0.4 μm 以下の粒子では、粒径が小さいほど粒子速度が高くなる。これは、粒径が小さくなると慣性が小さくなるため、誘起流により加速されることによる。一方、0.4 μm 以上の粒子に対して粒径の増加に伴って粒子速度が高くなるのは、粒径が大きいほど帯電量が大きく、また、慣性力が大きいと、静電気力による振幅が大きくなり、主流域に搬送されるようになるためである。

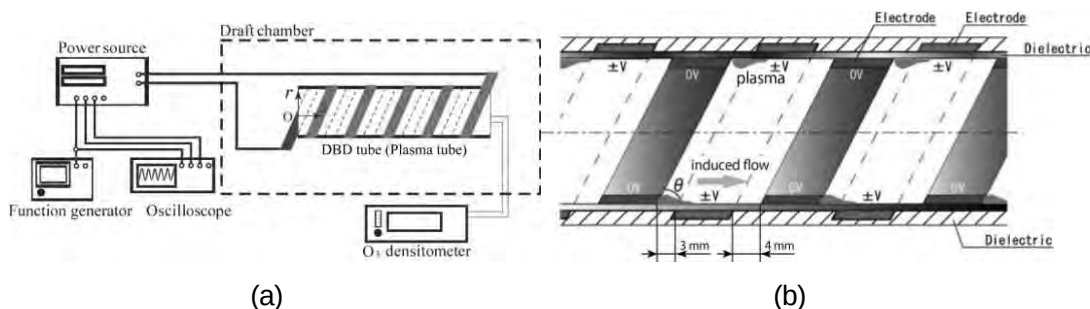


図 1 : (a) 実験装置の概略図, (b) プラズマチューブの断面図

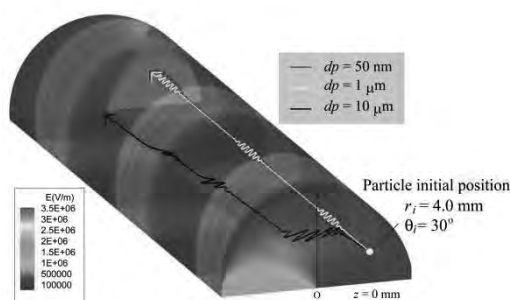


図 2 : プラズマチューブ内における微粒子軌跡

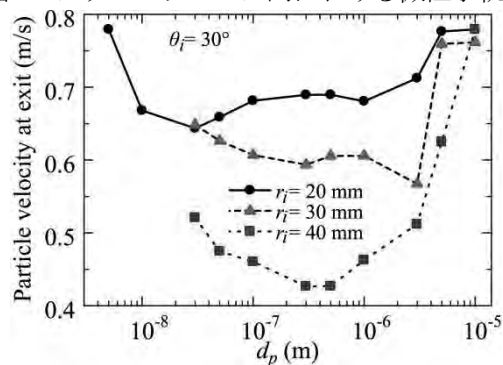


図 3 : 粒径に対する出口粒子速度

③ PEFC 触媒層の酸素, プロトン輸送性能の評価シミュレータの構築 (徳増 G)

東北大学側では, まず前年度に得られた計算結果の妥当性を検証すべく, 計算規模を拡大してその再現性を確認した. またアニーリングの方法を変化させてその再現性を検証した. その結果, どのようなアニーリング方法を用いてもアイオノマーの含水率が増加すると酸素透過性能は減少する結果が得られることが確認された. さらに今年度は同様の計算を炭化水素系膜で行うためのプログラムを作成した. 用いた炭化水素系膜を図 4 に示す. 炭化水素系膜は構成する原子数が多いため,

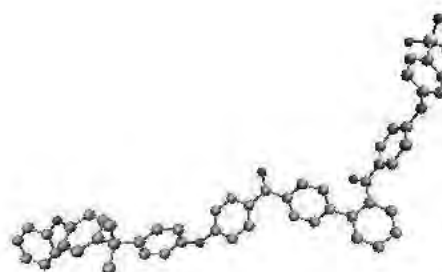


図 4: United Atom Model を用いた炭化水素系アイオノマーを構成する高分子

そのまま計算したのでは多大な計算時間を要する。そのため本研究では **United Atom Model** を導入して計算負荷の軽減を図った。この膜をアニーリングして白金に付着させ、アイオノマー内部の水分布などを計測した。

京都大学側では、昨年度担持カーボンとアイオノマーからなる複雑多孔質内部の電気化学反応と物質輸送の連成解析を行い、その複雑不均一構造が酸素・プロトン輸送に及ぼす影響を明らかにした。そして各白金点の反応量分布を評価し、電極構造と白金有効利用率の相関から、低白金化の指針として実構造の把握が極めて重要であることを把握して、そこで今年度は作成したアイオノマー被覆モデルを発展させ被覆成形シミュレータの開発を目指し、まずは基礎検討として細孔構造が大きい **PEFC** ガス拡散層のバインダー被覆シミュレータの開発を行った(図 5)。

実プロセスを対象とし多孔質体であるガス拡散層への塗布、含浸、乾燥を考慮した解析により、厚み方向の樹脂不均一偏析の形成メカニズムと、その構造がガス拡散性能に及ぼす影響を明らかにした(図 6)。今後は触媒層に適用して検証を行う予定である。

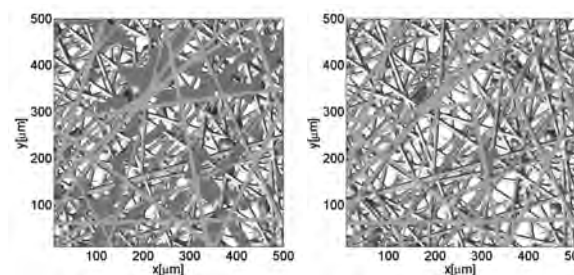


図 5: ガス拡散層内の樹脂偏析解析結果
乾燥時相対湿度 (左) RH=5%, (右) RH=95%

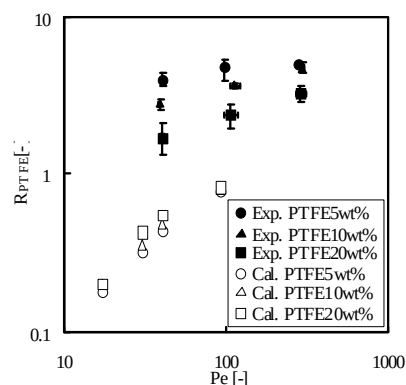


図 6: 触媒層構造と反応量分布の相関

④ 計算と実験の融合によるプラズマとナノ構造表面界面相互作用に関する研究 (寒川 G)

これまで進めてきたオンウェハモニタリングによるプラズマ測定システムについて、ワイヤレス化を推進した(図 7)。

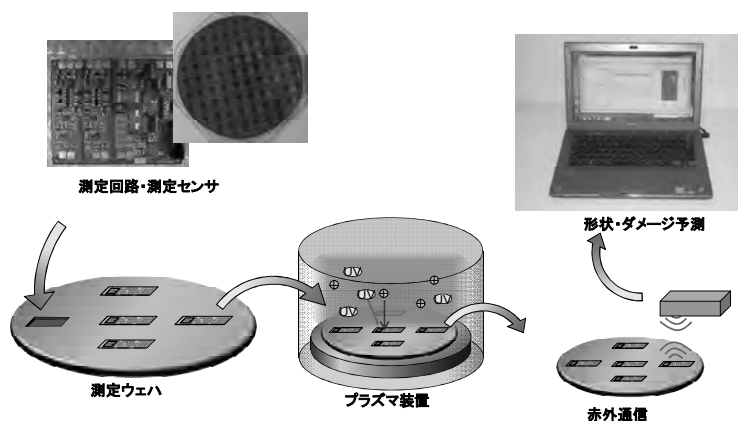


図 7: ワイヤレス・オンウェハモニタリング測定システム

ワイヤレス測定システムの実現のために、測定回路の改良を行った。適切なシールド方法、およびセンサから入力されるノイズから測定回路を保護するための方法を開発した。これら

の改良により、これまで開発してきた紫外光照射損傷センサ・チャージアップセンサ・シース形状センサについて、ワイヤレスでの測定を実現した。

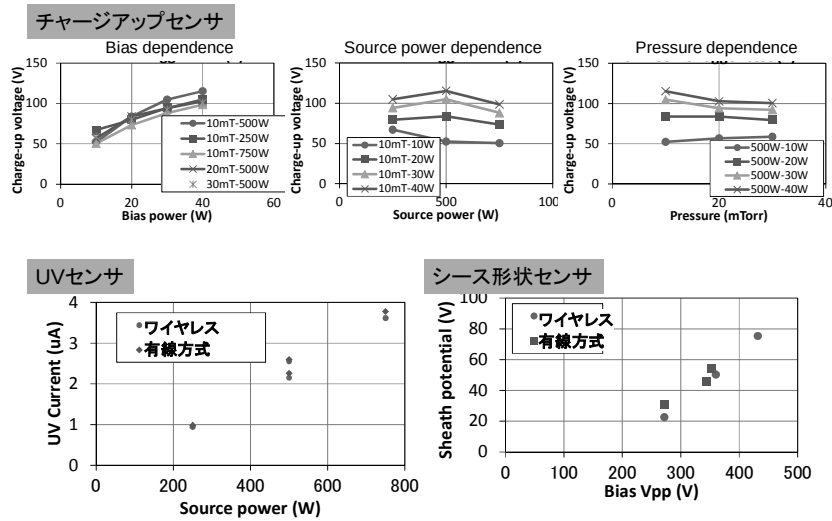


図 8：ワイヤレス・オンウェハモニタリング測定システムによる測定結果

さらに、測定システムから得られる情報をもとにしたイオン軌道の予測についても改良を加えた。まず、シース形状センサから得られる情報をもとに、任意の3次元形状の周囲におけるシースのひずみを計算できるソフトウェアを開発した。このソフトウェアを用いて、シース形状センサの測定結果に基づいた予測を行い、その結果と実際のエッチング結果を比較した。エッチング結果を図 9、エッチング結果と予測結果の比較を図 10 に示す。図 9 を見ると、段差付近でエッチング形状が実際に傾いていることが分かる。図 10 を見ると、実験結果における傾きが正確に予測されていることが分かる。このことから、図 9 で見られる傾きはシース形状のゆがみによるものであること、センサ測定とシミュレーションの組み合わせによってエッチング形状異常が正しく予測できたことが分かる。

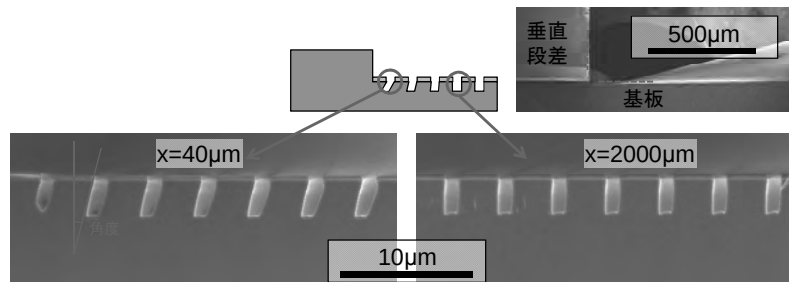


図 9：垂直段差を持つサンプルの塩素プラズマエッチングの結果

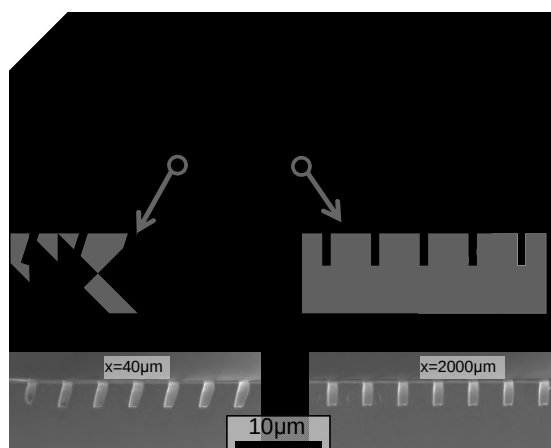


図 10：エッチング形状と予測形状との比較

3. 研究目標の達成状況

① サステナブル反応性微粒化・界面現象に関する研究(石本 G)

高圧条件に対応した噴霧微粒化特性解析用の基盤ソフトウェアを開発し試し計算を行った。その結果、容器内圧 50 気圧の条件下、斜め方向の噴射条件においても安定した計算が進行し、微粒化液滴粒子群の位置情報、ペネトレーション、流速分布、温度分布に関する数値予測が可能であることを示した。

② プラズマチューブによる管内微粒子流動制御 (西山・高奈 G)

数値計算によりプラズマチューブ内の3次元電位分布を明らかにするとともに、粒子帯電を考慮した帯電微粒子軌道解析を行い、粒径が微粒子挙動に与える影響を詳細に解析することに成功したことから、本研究目標は概ね達成されたと考える。

③ PEFC 触媒層の酸素、プロトン輸送性能の評価シミュレータの構築 (徳増 G)

今年度は昨年度の成果をさらに各研究室単位で発展させ、より詳細な現象の理解を行うことができ、さらにお互いの計算の融合を測る上で必要な課題の抽出ができたため、十分に目標は達成されたと考えている。

④ 計算と実験の融合によるプラズマとナノ構造表面界面相互作用に関する研究 (寒川 G)

今年度は、オンウェハモニタリングの実用性を高めるためのワイヤレス化を実証することができた。さらに、3次元形状の周囲ではシースのゆがみに起因するエッチング形状異常が生じることを実証し、定量的な形状予測も可能となった。従って、目標を十分に達成することができたと言える。

4. まとめと今後の課題

① サステナブル反応性微粒化・界面現象に関する研究(石本 G)

高圧微粒化噴霧燃焼に関する計算手法をさらに高精度化することにより高圧微粒化噴霧燃焼特性の定量予測と輸送機用新型直噴応用機器の創成が進展するものと考えられる。また、ウルトラクリーンナノデバイス洗浄システムの実用化には、マイクロ固体窒素粒子の有するレジストはく離メカニズムに関するシミュレーション科学的検討を行う必要があることが判明した。すなわち固体窒素粒子界面の有する高機能性に対し流体力学的アプローチと

熱力学的アプローチの両面から成る検討を行い、粒子界面と洗浄対象物間の相互作用を解明する必要がある。

② プラズマチューブによる管内微粒子流動制御（西山・高奈 G）

管内に誘電体バリア放電(DBD)発生機構を有するプラズマチューブに対し、数値モデルを構築し、3次元シミュレーションによりプラズマチューブの微粒子搬送特性を明らかにした。今後は、実験により本数値モデルの妥当性を評価するとともに、数値シミュレーションと実験との統合解析により、微粒子の攪拌・搬送のための最適条件を明らかにし、さらには、微粒子の浄化効果についても検討することが重要である。

③ PEFC 触媒層の酸素、プロトン輸送性能の評価シミュレータの構築（徳増 G）

今後はお互いの計算結果の融合を視野に入れ、ナノスケール(分子動力学法)のシミュレーションで得られた酸素透過現象に関する知見のモデリングを行い、メゾスケールのシミュレータに組み込む予定である。また遅れているプロトン輸送についても計算を行っていく予定である。

④ 計算と実験の融合によるプラズマとナノ構造表面界面相互作用に関する研究（寒川 G）

今後、ワイヤレス測定システムの実用性を更に高めるため、ウェハー型の容器や薄型の回路などを開発することで真空搬送可能なシステムを目指す。また、シミュレーションをさらに発展させ、チャージアップやUV照射によるエッチング形状異常予測、さらにはエッチング形状の時間発展の予測も試みる。一方で、開発したセンサを用いてプラズマ-固体表面相互作用の解明を進める。

5. 研究成果（*は別刷あり）

1) 学術雑誌（査読つき国際会議、解説等を含む）

- [1] Jun Ishimoto, U Oh, Daisuke Tan: Integrated Computational Study of Ultra-High Heat Flux Cooling Using Cryogenic Micro-Solid Nitrogen Spray, *Cryogenics*, Volume 52, Issue 10, October 2012, Pages 505-517. **(Top 25 Hottest Articles in *Cryogenics*, July to September 2012, 15th).**
- [2] Jun Ishimoto, Daisuke Tan, Hiroto Otake and Seiji Samukawa: Thermomechanical Resist Removal-Cleaning System Using Cryogenic Micro-Slush Jet, *Solid State Phenomena*, Vol. 187, (2012), pp. 145-148.
- [3] Kazuo MATSUURA, Masami NAKANO, Jun ISHIMOTO: Acceleration of hydrogen forced ventilation after leakage ceases in a partially open space, *International Journal of Hydrogen Energy*, Volume 37, Issue 9, May 2012, Pages 7940-7949.
- [4] Kazuo MATSUURA, Masami NAKANO, Jun ISHIMOTO: Sensing-based risk mitigation control of hydrogen dispersion and accumulation in a partially open space with low-height openings by forced ventilation, *International Journal of Hydrogen Energy*, Volume 37, Issue 2, January 2012, Pages 1972-1984.
- [5] U Oh, Jun Ishimoto, Naoki Harada and Daisuke Tan: ULTRA-COOLING HEAT TRANSFER CHARACTERISTICS USING CRYOGENIC MICRO-SOLID NITROGEN SPRAY, *Proceedings of the ASME 2012 Summer Heat Transfer Conference*, July 8-12, 2012, Rio Grande, Puerto Rico, USA [in CD-ROM].
- [6] G. Inoue, N.Ishibe, Y.Matsukuma, M.Minemoto: Understanding mechanism of PTFE distribution in fibrous porous media, *ECS Trans.* (Honolulu) (2013) 50(2): 461-468 (8 page).

- [7] T. Tokumasu, A. Fukushima, T. Mabuchi and Y. Sugaya: Large-scale Molecular Dynamics Simulations for Analyses of Transport Phenomena in Polymer Electrolyte Fuel Cell, *Journal of Computational Chemistry, Japan*, (2013) 12(1): 8-15(8 page)
 - [8] Tomohiro Kubota, Akira Wada, Yuuki Yanagisawa, Batnasan Altansukh, Kazuhiro Miwa, Takahito Ono, and Seiji Samukawa: 3-Dimensional and Defect-free Etching by Neutral Beam for MEMS Applications, *2012 International Conference on Solid State Devices and Materials*, Kyoto, (2012), pp. 935-936.
 - [9] Yuuki Yanagisawa, Tomohiro Kubota, Batnasan Altansukh, Kazuhiro Miwa, and Seiji Samukawa: 3-Dimensional and defect-free neutral beam etching for MEMS applications, *AVS 59th International Symposium and Exhibition*, Tampa, (2012), p. 216.
 - [10] Akira Wada, Tomohiro Kubota, Yuuki Yanagisawa, Batnasan Altansukh, Kazuhiro Miwa, Takahito Ono, and Seiji Samukawa: 3-Dimensional and Damage-Free Neutral Beam Etching for MEMS Application, *IEEE Sensors 2012 Conference*, Taipei, (2012), B3P-J7
- 2) 国際会議・国内学会・研究会・口頭発表等
- [1] Jun Ishimoto: Supercomputing approach of flotsam mixed tsunami in narrow region, *International Innovation Workshop on Off Shore Tsunami Energy Dissipation and Peak Height Alleviation*, September 10-12, 2012, Tohoku University, Sendai, Japan **(Invited)**.
 - [2] Jun Ishimoto: Innovative Nano-Device Cleaning Technology Using Cryogenic Spray Flow of Micro-Solid Nitrogen, *Painting Technology Workshop (PTW2012)*, October 30-31st, 2012, Lexington, Kentucky, USA **(Invited)**.
 - [3] Jun Ishimoto: Thermomechanical Resist Removal - Cleaning Technology Using Cryogenic Micro - Nano Solid Nitrogen Spray, *Center for High-rate Nanomanufacturing Fall Seminar Series*, November 16th , 2012, College of Engineering, Northeastern University, Boston, USA **(Invited)**.
 - [4] U Oh, Naoki Harada and Jun Ishimoto: Innovative Wafer Resist Removal-Cleaning Technology by Using Smart Cryogenic Spray Flow of Solid Nitrogen, *Technical Congress of Progress and Innovation for Smart Materials and Related Technology (PI-SMART)*, April 24 2012, Hirosaki, Japan [in CD-ROM].
 - [5] Naoya Ochiai, Yuka Iga, Motohiko Nohmi, Toshiaki Ikohagi, Jun Ishimoto and Kozo Saito: Numerical Prediction of Cavitation Erosion Using a Coupled Analysis of Cavitating Flow Field and Bubbles, *Proceedings of the Twelfth International Symposium on Advanced Fluid Information and Transdisciplinary Fluid Integration*, Sendai, (2012), pp. 50-51.
 - [6] U Oh, Jun Ishimoto and Jin-Goo Park: Thermomechanical Nano Device Resist Removal-Cleaning Technology by Using Cryogenic Spray Flow of Solid Nitrogen, *Proceedings of the Twelfth International Symposium on Advanced Fluid Information and Transdisciplinary Fluid Integration*, Sendai, (2012), pp. 114-115.
 - [7] G. Inoue, Nishibe, Y.Matsukuma, M.Minemoto: Understanding mechanism of PTFE distribution in fibrous porous media, *222th ECS meeting (PRiME2012)* (Honolulu), (2012), B12-1627 (1page).

- [8] 王 宇 (東北大), 原田 直樹 (名古屋大), 石本 淳 (東北大): 微細固体窒素スプレーを用いたウエハレジストはく離-洗浄特性に関する研究, 混相流学会年会講演会 2012 オーガナイズドセッション (OS-6 サステナブル異分野融合型混相流). [2012 年 8 月 9-11 日, (東京大学 柏キャンパス)]
- [9] 石部直之, 井上元: 繊維状多孔質電極内の樹脂偏析機構の解明, 第 49 回日本伝熱シンポジウム講演論文, (富山), (2012), (2page).
- [10] 菅谷悠太, 徳増崇: PEFC カソード側触媒層 ionomer における酸素分子透過に関する分子論的研究, 第 26 回数値流体力学シンポジウム講演予稿集, (2012), E02-4 (1page).
- [11] 柳沢優希, 和田章良, 荒木良亮, 久保田智広, 寒川誠二: 中性粒子ビームを用いた 3 次元 MEMS 構造の無損傷エッチング, 2012 年秋季 第 73 回応用物理学会学術講演会, (2012), 13a-F7-2.
- [12] 久保田智広, 佐藤充男, 岩崎拓也, 小野耕平, 寒川誠二: オンウェハモニタリングによるプラズマプロセスダメージ・形状予測, 第 60 回 応用物理学会春季学術講演会, (2013), 27p-A3-4.

3) その他 (特許, 受賞, マスコミ発表等)

- [1] 高奈秀匡, 篠原圭介, 西山秀哉, 「微粒子搬送装置及びこの装置を用いた微粒子の浄化方法」, 特開 2012-91925, (2012 年 5 月 17 日)
- [2] 特許出願名称: 極低温マイクロスラッシュ生成システム
 発明者: 石本淳
 出願番号: 2006-170710
 公開番号: 2008-002715
 出願日: 2006 年 06 月 20 日
 公開日: 2008 年 01 月 10 日
登録日: 2012 年 04 月 06 日
- [3] 津波、建物ごとに予測 ― 東北大 発電所や工場、模擬実験 ―
 掲載日: 2013 年 1 月 24 日 日経産業新聞 11 ページ