

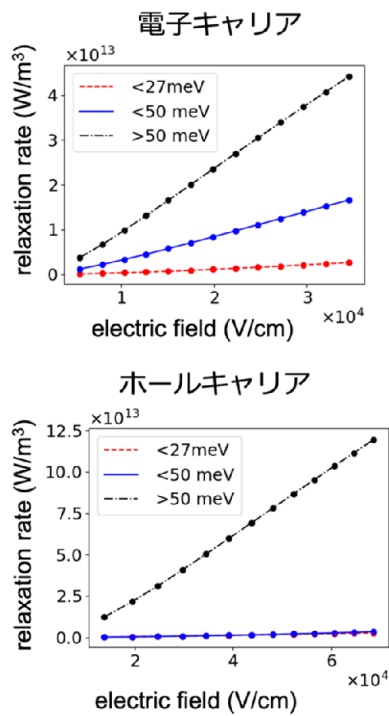
伝 熱

Journal of the Heat Transfer Society of Japan

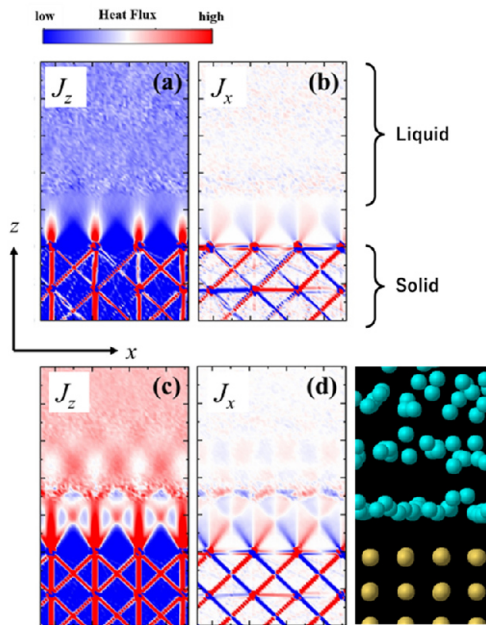
ISSN 1344-8692 Vol. 63, No. 264
2024. 7

The logo for the Heat Transfer Society of Japan (HTSJ) is located in the bottom right corner. It consists of the letters 'HTSJ' in a bold, sans-serif font. The letters are white with a blue outline and are set against a background of horizontal blue and white stripes.

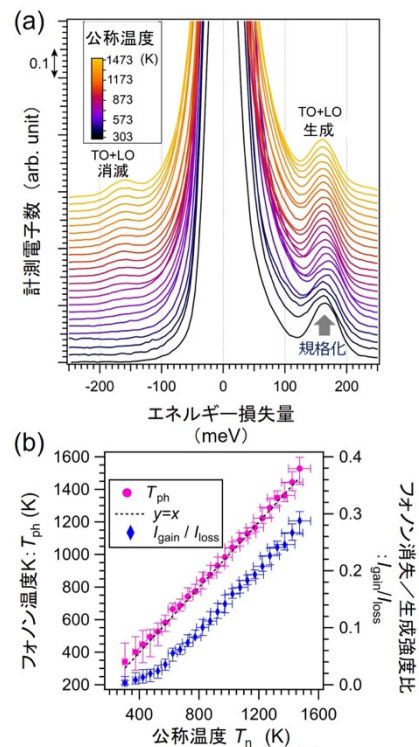
◆特集：熱輸送のスペクトル



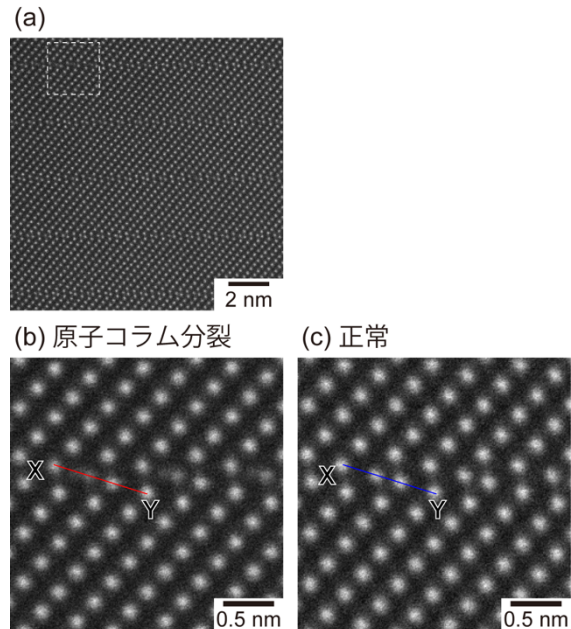
電子キャリアとホールキャリアにおけるエネルギー緩和レート（特集記事「第一原理計算による電子フォノン相互作用の精密解析とジュール熱発生素過程への応用（南谷英美）」より）



固体-液体界面における熱流束の二次元分布（特集記事「単原子スケール非平衡熱輸送場の分子動力学解析（藤原邦夫）」より）



フォノンの生成・消滅比を用いた温度計測の実証実験の一例（特集記事「単色化電子顕微鏡を用いたフォノン計測（吉川純）」より）



原子コラムの配列の乱れを含む視野の高角度環状暗視野走査透過電子顕微鏡像の一例（特集記事「酸化チタン自然超格子結晶の熱輸送特性（原田俊太）」より）

伝 熱

目 次

〈巻頭グラビア〉

| | |
|------------------|----------|
| 吉川 純 (物質・材料研究機構) | |
| 原田 俊太 (名古屋大学) | |
| 南谷 英美 (大阪大学) | |
| 藤原 邦夫 (大阪大学) | ……………表紙裏 |

〈新旧会長挨拶〉

| | |
|--------------------------------|-----------------------------|
| 第 62 期を振り返って ―カーボンニュートラルと伝熱学会― | |
| ……………平井 秀一郎 (東京工業大学) | …………… 1 |
| 第 63 期会長就任にあたって | ……………須賀 一彦 (大阪公立大学) …………… 2 |

〈第 36 回日本伝熱学会賞〉

| | |
|------------------------------|------------------------------------------------------------------------|
| 第 62 期 (2023 年度) 表彰選考委員会 報告 | |
| ……………表彰選考委員会 委員長 鈴木 洋 (神戸大学) | …………… 3 |
| 日本伝熱学会学術賞を受賞して | ……………小宮 敦樹 (東北大学), 古川 琢磨 (八戸工業高等専門学校), Juan F. Torres (ANU) …………… 5 |
| 日本伝熱学会学術賞を受賞して | ……………李 敏赫, 柳 旻勳, 鈴木 雄二 (東京大学) …………… 6 |
| 日本伝熱学会技術賞を受賞して | ……………平沢 浩一, 有賀 善紀 (KOA), ……………国峯 尚樹 (サーマルデザインラボ) …………… 7 |
| 日本伝熱学会技術賞を受賞して | ……………川島 知之, 小林 祥大, ……………浅川 一樹 (JFE スチール株式会社) …………… 8 |
| 日本伝熱学会登鯉賞を受賞して | ……………志賀 拓磨 (産業技術総合研究所) …………… 9 |
| 日本伝熱学会登鯉賞を受賞して | ……………岸本 将史 (京都大学) …………… 10 |
| 日本伝熱学会登鯉賞を受賞して | ……………スルブリス ドナタス (東北大学) …………… 12 |
| 日本伝熱学会奨励賞を受賞して | ……………アリザデ メヘルザード (大阪大学) …………… 13 |
| 日本伝熱学会奨励賞を受賞して | ……………榎本 陸 (東京工業大学) …………… 15 |

〈第 61 回日本伝熱シンポジウム〉

第 61 回日本伝熱シンポジウムの報告

| | |
|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| ……………鈴木 洋, 村川 英樹, 菰田 悦之 (神戸大学), 津島 将司 (大阪大学), 岩井 裕 (京都大学), 西田 耕介 (京都工芸繊維大学), 小澤 守, 小田 豊 (関西大学), 木村 文義, 河南 治 (兵庫県立大学), 日出間 るり (名古屋大学), 服部 博文 (名古屋工業大学), 須賀 一彦 (大阪公立大学), 店橋 護, 加藤 之貴 (東京工業大学), 中村 元 (防衛大学), 岩本 薫, 田川 義之 (東京農工大学), 服部 康男 (電力中央研究所), 塚原 隆裕 (東京理科大学), 鹿園 直毅, ムテルデュ ティモテ, イ エリム, 塩見 淳一郎, 鈴木 雄二, 白樫 了 (東京大学), 能村 貴宏, 田部 豊 (北海道大学), 中曾 浩一, 山田 寛 (岡山大学), 江目 宏樹 (山形大学), 宮崎 康次, 伊藤 衡平, 藏田 耕作 (九州大学), 櫻井 篤 (新潟大学), 春木 将司 (金沢大学), 小糸 康志 (熊本大学), 松川 嘉也, 徳増 崇 (東北大学), 荒木 拓人 (横浜国立大学), 勝身 俊之, 佐藤 大輔 (長岡技術科学大学), 西 剛伺 (足利大学), 小泉 雄大 (ナブテスコ (株)), 近藤 義広 ((株) 日立アカデミー), 春木 直人 (岡山県立大学) …………… | 16 |
|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|

優秀プレゼンテーション賞 受賞者 – 第 61 回日本伝熱シンポジウム –

| | |
|----------------------------------|----|
| ……………学生会委員会幹事 上野 藍 (名古屋大学) …………… | 32 |
|----------------------------------|----|

〈特集：熱輸送のスペクトル〉

| | |
|--------------------------------------------------------------------|----|
| 特集「熱輸送のスペクトル学的理解」にあたって ……志賀 拓磨 (産業技術総合研究所) …………… | 33 |
| 単色化電子顕微鏡を用いたフォノン計測 ……………吉川 純 (物質・材料研究機構) …………… | 34 |
| 酸化チタン自然超格子結晶の熱輸送特性 ……………原田 俊太 (名古屋大学) …………… | 40 |
| 第一原理計算による電子フォノン相互作用の精密解析とジュール熱発生素過程への応用 ……………南谷 英美 (大阪大学) …………… | 46 |
| 単原子スケール非平衡熱輸送場の分子動力学解析 ……………藤原 邦夫 (大阪大学) …………… | 53 |

〈行事カレンダー〉 …………… 59

〈お知らせ〉

| | |
|---------------------------------------------------------------------|----|
| 公益社団法人日本伝熱学会第 62 期 (2023 年度) 総会議事録 …………… | 60 |
| 2024 年度 日本伝熱学会 学術賞・技術賞・貢献賞・登鯉賞・奨励賞候補者推薦募集のお知らせ …… | 62 |
| 日本伝熱学会 関西支部 主催 第 18 回関西伝熱セミナー 「グリーントランスフォーメーションとエネルギー技術」会告 …………… | 63 |
| 編集出版部会からのお知らせ …………… | 64 |

〈編集出版部会ノート〉 …………… 67

CONTENTS

< Opening-page Gravure: heat-page >

Jun KIKKAWA (National Institute for Materials Science)
Shunta HARADA (Nagoya University)
Emi MINAMITANI (Osaka University)
Kunio FUJIWARA (Osaka University) Opening Page

< New and Former Presidents' Addresses >

Retirement Address as the 62nd President -Carbon Neutral and Heat Transfer Society of Japan-
Shuichiro HIRAI (Tokyo Institute of Technology) 1
Inauguration Address as the 63rd President
Kazuhiko SUGA (Osaka Metropolitan University) 2

< The 36th Heat Transfer Society Awards >

Report from the Award Selection Committee of the Heat Transfer Society of Japan, 2023
Hiroshi SUZUKI (Kobe University) 3
On Receiving Scientific Contribution Award of the Heat Transfer Society of Japan
Atsuki KOMIYA (Tohoku University), Takuma KOGAWA (NIT, Hachinohe),
Juan F. TORRES (ANU) 5
On Receiving Scientific Contribution Award of the Heat Transfer Society of Japan
Minhyeok LEE, Gyeonghun YOO, Yuji SUZUKI (The University of Tokyo) 6
On Receiving Technical Achievement Award of the Heat Transfer Society of Japan
Koichi HIRASAWA, Yoshinori ARUGA (KOA Corporation),
Naoki KUNIMINE (Thermal Design Laboratory Co.,Ltd.) 7
On Receiving Technical Achievement Award of the Heat Transfer Society of Japan
Tomoyuki KAWASHIMA, Akihiro KOBAYASHI,
Kazuki ASAKAWA (JFE Steel Corporation) 8
On Receiving Touri Award (Outstanding Young Researcher Award) of the Heat Transfer Society of Japan
Takuma SHIGA (AIST) 9
On Receiving Touri Award (Outstanding Young Researcher Award) of the Heat Transfer Society of Japan
Masashi KISHIMOTO (Kyoto University) 10
On Receiving Touri Award (Outstanding Young Researcher Award) of the Heat Transfer Society of Japan
Donatas Surblys (Tohoku University) 12
On Receiving Young Researcher Award of the Heat Transfer Society of Japan
Mehrza ALIZADEH (Osaka University) 13
On Receiving Young Researcher Award of the Heat Transfer Society of Japan
Riku ENOMOTO (Tokyo Institute of Technology) 15

<The 61st National Heat Transfer Symposium of Japan>

Report on the 61st National Heat Transfer Symposium of Japan

| | |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|
| Hiroshi SUZUKI, Hideki MURAKAWA, Yoshiyuki KOMODA (Kobe University), Shohji TSUSHIMA (Osaka University), Hiroshi IWAI (Kyoto University), Kosuke NISHIDA (Kyoto Institute of Technology), Mamoru OZAWA, Yutaka ODA (Kansai University), Fumiyoshi KIMURA, Osamu KAWANAMI (University of Hyogo), Ruri HIDEEMA (Nagoya University), Hirofumi HATTORI (Nagoya Institute of Technology), Kazuhiko SUGA (Osaka Metropolitan University), Mamoru TANAHASHI, Yukitaka KATO (Tokyo Institute of Technology), Hajime NAKAMURA (National Defense Academy), Kaoru IWAMOTO, Yoshiyuki TAGAWA (Tokyo University of Agriculture and Technology), Yasuo HATTORI (Center Research Institute of Electric Power Industry), Takahiro TSUKAHARA (Tokyo University of Science), Naoki SHIKAZONO, Timothée MOUTERDE, Yaerim LEE, Junichiro SHIOMI, Yuji SUZUKI, Ryo SHIRAKASHI (The University of Tokyo), Takahiro NOMURA, Yutaka TABE (Hokkaido University), Koichi NAKASO, Yutaka YAMADA (Okayama University), Hiroki GONOME (Yamagata University), Koji MIYAZAKI, Kohei ITO, Kosaku KURATA (Kyushu University), Atsushi SAKURAI (Niigata University), Masashi HARUKI (Kanazawa University), Yasushi KOITO (Kumamoto University), Yoshiya MATSUKAWA, Takashi TOKUMASU (Tohoku University), Takuto ARAKI (Yokohama National University), Toshiyuki KATSUMI, Daisuke SATO (Nagaoka University of Technology), Koji NISHI (Ashikaga University), Katsuhiro KOIZUMI (Nabtesuko Co.), Yoshihiro KONDO (Hitachi Academy Co., Ltd.), Naoto HARUKI (Okayama Prefectural University) | 16 |
|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----|

Best Presentation Award – 61st National Heat Transfer Symposium of Japan -

| | |
|-----------------------------------|----|
| Ai UENO (Nagoya University) | 32 |
|-----------------------------------|----|

<Special Issue: Thermal Science for Spectral Energy Transport>

Preface to “Thermal Science for Spectral Energy Transport”

| | |
|---------------------------|----|
| Takuma SHIGA (AIST) | 33 |
|---------------------------|----|

Phonon Measurements Using a Monochromated Electron Microscope

| | |
|--------------------------------------------------------------|----|
| Jun KIKKAWA (National Institute for Materials Science) | 34 |
|--------------------------------------------------------------|----|

Thermal Conduction in Titanium Oxide Natural Superlattices

| | |
|-----------------------------------------|----|
| Shunta HARADA (Nagoya University) | 40 |
|-----------------------------------------|----|

Ab Initio Analysis of Electron-phonon Coupling and Its Application for Initial Process of Joule Heating

| | |
|-----------------------------------------|----|
| Emi MINAMITANI (Osaka University) | 46 |
|-----------------------------------------|----|

Non-equilibrium Thermal Transport at Single-atom Scale based on Molecular Dynamics Method

| | |
|-----------------------------------------|----|
| Kunio FUJIWARA (Osaka University) | 53 |
|-----------------------------------------|----|

| | |
|------------------|----|
| <Calendar> | 59 |
|------------------|----|

| | |
|-----------------------|----|
| <Announcements> | 60 |
|-----------------------|----|

| | |
|---------------------------------------------|----|
| <Note from the JHTSJ Editorial Board> | 67 |
|---------------------------------------------|----|

第 62 期を振り返って
 —カーボンニュートラルと伝熱学会—
 Retirement Address as the 62nd President
 -Carbon Neutral and Heat Transfer Society of Japan-



平井 秀一郎 (東工大)
 Shuichiro HIRAI (Tokyo Institute of Technology)
 e-mail: hirai.s.aa@m.titech.ac.jp

日本伝熱学会は 60 年以上の歴史があり、現在、誰もが知っている CO₂ とか、地球温暖化という言葉さえなかったころに設立されている。現在、企業では、カーボンニュートラル (以下、CN) についての活動が極めて活発で、CN という部署が、最初は、“室” から始まったのが、“部門”、“事業部” へと拡大しているという話も聞いている。熱が発生し、伝わっていく伝熱は、ほとんどすべての機器で見られ、この機器の効率が高ければ高いほど CO₂ の排出は少なくなる。日本伝熱学会の、多くの研究が CN と関係づいている。

しかし、本学会のホームページを見ても、この学会の活動、すなわち会員各位の研究が、CN にどのように貢献しているのかが見えてこない。会員各位の伝熱研究と CN を紐づけしようとするとき、その中間的な位置づけに、伝熱シンポのセッションがあったらと思った。CN 対策技術と、伝熱シンポのセッションがどのような関係にあるのか、1 枚の絵にまとめたのが図 1 である。▶印にあるシンポのセッショ

ンを、関連する温暖化対策技術の絵に配置した。その配置に関して、少々強引なところがあることをご容赦いただきたい。近い将来、ホームページ上で、この絵のセッションをクリックすると、会員各位が行っている研究活動の紹介に飛ぶようになる予定である。

このようなことは、本来であれば企画部会の中で立ち上げるべきであった。しかし、時間がなく自分で絵を書き、12 月の第 3 回理事会で、“その他”の議題でとりあげてもらって、年があけてから広報委員長櫻井先生にセッションの代表者に、セッションを構成する会員に研究紹介の絵を集めてもらうことにした。何か新規で必要なことを立ち上げようとすると、会長の任期は 1 年では短すぎると感じ、会長任期を 2 年まで可能なように致しました。

本来は最初に述べることです。最後に第 61 回日本伝熱シンポジウムをもって、会長を退任いたしました。理事の皆様、この 1 年間大変お世話になりました。どうもありがとうございました。

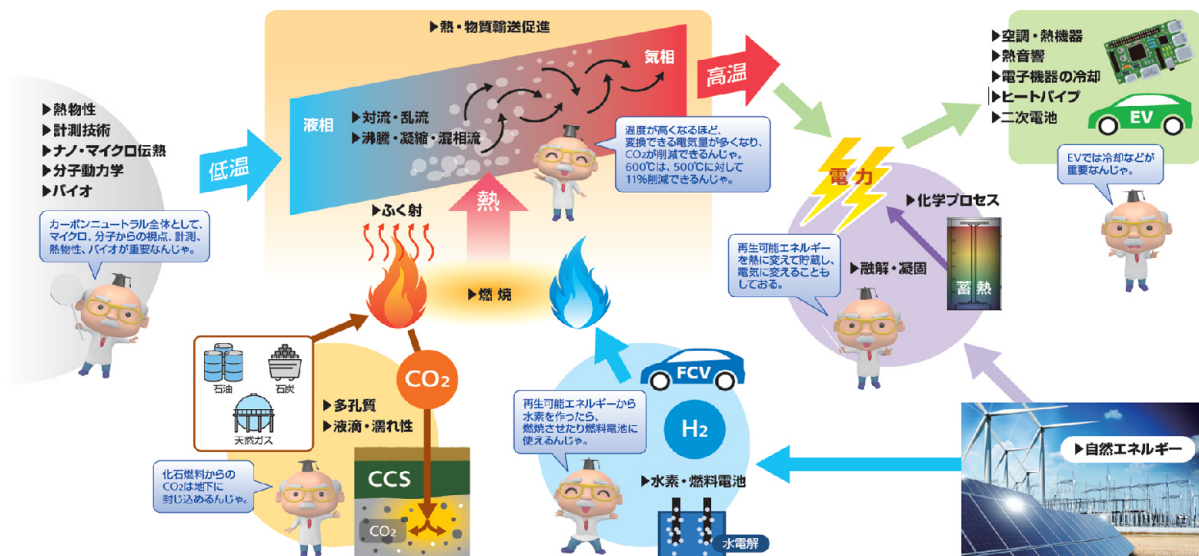


図1 カーボンニュートラル対策技術と伝熱分野 (▶伝熱シンポジウムのセッション名)

第 63 期会長就任にあたって
Inauguration Address as the 63rd President



須賀 一彦 (大阪公立大学)

Kazuhiko SUGA (Osaka Metropolitan University)

e-mail: suga@omu.ac.jp

過日、神戸にて行われました第 61 回日本伝熱シンポジウムでの総会で、第 63 期会長を拝命いたしました大阪公立大学の須賀一彦です。会員の皆様、どうぞよろしくお願ひ申し上げます。

私と本会との関係は、私が京都大学工学部機械工学科の卒業研究で佐藤 俊(さとう たかし)教授の研究室を希望した時からのものです。本会の前身である日本伝熱研究会の発起人八名のおひとりで、第 16 期会長であった佐藤 俊先生や当時は同じ研究室のまだ助教授でいらした第 38 期会長の鈴木健二郎先生をはじめ、以来 42 年間にわたり多くの伝熱学の先生方・先輩方にご指導を受けまして、伝熱研究一筋にこれまでやって来ました。その恩返しも含めて、学会運営に微力ながら尽力させていただこうという決意しております。

現在、日本伝熱学会も他の理工系学会同様、会員数の減少問題に直面しております。会員数が減り続けているため、これまでの運営システムでは、従来のような形での学会活動が困難になってきている状況です。いっぽうで、周知のように、現在我々は地球温暖化による気候変動に直面し、脱炭素の掛け声のもと、喫緊の技術開発が求められています。この時代の要請に応えるため、今年の伝熱シンポでは新たな試みの「IWSEC」と「水素・燃料電池・二次電池」のセッションで、全日程にわたり活発な討論が行われました。また、他のセッションでもカーボンニュートラル、SDGs に関連した議論が多く行われたわけで、今も昔も変わらず、エネルギーに関して地球規模で持続可能な社会を構築するために、伝熱研究が非常に重要だと多くの研究者が認識している証左と言えます。それなのに会員が減っていくという、この矛盾はどこから来るのでしょうか。

持続可能な社会を構築するためのエネルギーの有効利用といった、伝熱工学にとって不変とも言えるテーマを続けることは、例えば難攻不落の城攻めといった趣で、ともすると意に反して、従来テ

マを継続することに固執し、それが目的化しているように映る場合もあるでしょう。実際の城攻めの例では、難攻不落として知られていた豊臣の大坂城が大坂の陣で陥落したのは、膠着状態を打開するため、徳川方が英国から調達した、長射程のカルバリン砲による砲撃がゲームチェンジャーになったとも言われています。我々が対面している「大坂城」もゲームチェンジャーとなる新技術が登場すれば、落城するはずですが、戦況はいつ配備されるかどうかも分からない、カルバリン砲をただ待っているだけというわけにもいきません。このような新技術の開発と合わせて、従来技術の高度化も重要であるはずですが、それは、日々製品開発に携わる産業界の技術者の目線からも言えることでしょう。しかし、内燃機関の熱効率のように、既に高い水準にある技術の高度化は上乗せの多くを期待できないので(実は積分すると波及効果は高いのですが)、派手には見えないことが難点です。おそらく、それは研究費を配る側から見れば、物足りなく映り、選択と集中の命令のもと、予算を削られる側になってはいないでしょうか。城攻めで言えば、城を取り囲んでいる軍勢への兵糧が尽きかけているということかと思えます。それが、結果として学会の会員減少に拍車をかけ、産業界からみて魅力が薄れてきている原因のひとつではないかと個人的に考えております。したがって、研究費を配る側や審査する側の人たちには、テーマの斬新性だけではなく、見慣れたものでも、しっかり吟味して真に価値あるものを評価して頂きたいと切に願う訳であります。

いずれにしましても、学会運営の DX 化を含め、時流に合ったシステムに学会は進化しなければならないと思います。会員の皆様から様々な意見を頂戴し、持続可能な学会に日本伝熱学会もなっていけるよう進めてまいりますので、何卒よろしくお願ひいたします。

第 62 期 (2023 年度) 表彰選考委員会 報告

Report from the Award Selection Committee of the Heat Transfer Society of Japan, 2023

表彰選考委員会 委員長
鈴木 洋 (神戸大学)

Hiroshi SUZUKI (Kobe University),
e-mail:hero@kobe-u.ac.jp

1. 日本伝熱学会賞

2023 年度 (令和 5 年度) 日本伝熱学会賞の選考結果についてご報告します。

従来の学術賞, 技術賞, 貢献賞および奨励賞に加えて, 2023 年度独自の研究分野を開拓し, 優れた業績を挙げた若手研究者を対象とする登鯉 (とうり) 賞を新設した. 中国後漢書党固伝に「竜門登鯉」すなわち竜門 (流れの速い滝) を登る鯉が龍になるという成句があり, 新設された賞名として制定された.

今期は 2023 年 12 月 15 日を応募・推薦締切として募集を行い, 最終的に学術賞 3 件, 技術賞 2 件, 登鯉賞 8 件, 奨励賞 2 件, 貢献賞 2 件の自薦・他薦がありました. 表彰選考委員会において厳正な審査を行った結果, 学術賞 2 件, 技術賞 2 件, 登鯉賞 3 件, 貢献賞 2 件, 奨励賞 2 件を 2023 年 4 月の理事会に推薦し, 承認されました. 各賞の受賞者は下記のとおりです (順不同・敬称略).

1.1 学術賞 (Scientific Contribution Award of the Heat Transfer Society of Japan)

- 代表研究者: 小宮 敦樹 (東北大学)
共同研究者: 古川 琢磨 (八戸高専)
共同研究者: Juan Felipe Torres (オーストラリア国立大学)
「温度境界層共鳴効果を用いた自然対流伝熱促進に関する研究」
第 58 回日本伝熱シンポジウム講演論文集, B324, 2021.
- 代表研究者: 李 敏赫 (東京大学)
共同研究者: 鈴木 雄二 (東京大学)
共同研究者: 柳 晃勲 (東京大学)
「触媒燃焼で直接加熱される高温・高効率熱発電システムの開発」
第 59 回日本伝熱シンポジウム講演論文集, A343,

2022.



学会賞 授賞式

1.2 技術賞 (Technical Achievement Award of the Heat Transfer Society of Japan)

- 代表研究者: 平沢 浩一 (KOA (株))
共同研究者: 有賀 善紀 (KOA (株))
共同研究者: 国峯 尚樹 ((株)サーマルデザインラボ/KOA (株))
「小形電子部品を対象とした基板放熱型熱設計技術の確立」

- 2) 代表研究者：川島 知之 (JFE スチール (株))
共同研究者：小林 祥大 (JFE スチール (株))
共同研究者：浅川 一樹 (JFE スチール (株))
「長寿命・低 NOx・高効率ラジアントチューブ
バーナー」

1.3 登鯉賞 (Touri Award (Outstanding Young Researcher Award) of the Heat Transfer Society of Japan)

- 1) 受賞者名：志賀 拓磨 (産業技術研究所)
「表面に局在するフォノン波による熱伝導低減
機構の解明」
第 57 回日本伝熱シンポジウム講演論文集,
K1411, 2020.
- 2) 受賞者名：Donatas Surblys (東北大学)
「分子熱流体解析法の開発とナノスケール熱流
動解析への応用」
第 56 回日本伝熱シンポジウム講演論文集,
H233, 2019.
第 57 回日本伝熱シンポジウム講演論文集,
A124, 2020.
第 58 回日本伝熱シンポジウム講演論文集, J123,
2021.
- 3) 受賞者名：岸本 将史 (京都大学)
「固体酸化物形燃料電池の多孔質電極解析基盤
技術の開発とそのデジタルツイン構築に關する
研究」
第 58 回日本伝熱シンポジウム講演論文集,
B312, 2021.
第 60 回日本伝熱シンポジウム講演論文集,
E323, 2023.

1.4 奨励賞 (Young Researcher Award of the Heat Transfer Society of Japan)

- 1) 受賞者名：Seyedmehrza Alizadehkolagar (大阪
大学)
「数理学と非平衡熱力学から明らかにする電
気化学反応輸送場の最適化構造」
第 59 回日本伝熱シンポジウム講演論文集,
A122, 2022.

- 2) 受賞者名：榎本 陸 (東京工業大学)
「熱力学的駆動力と温度場制御を用いた未利用
な長波長太陽光を短波長変換する革新的なフ
ォトン・アップコンバージョン固体材料系の創
出」
第 59 回日本伝熱シンポジウム講演論文集,
BPA1426, 2022.
第 60 回日本伝熱シンポジウム講演論文集, D213,
2023.

1.5 貢献賞 (Contribution Award of the Heat Transfer Society of Japan)

- 1) 受賞者名：服部 博文
「第 59 回日本伝熱シンポジウム実行委員会幹事
他, 学会主催行事」
- 2) 受賞者名：手嶋 秀彰
「第 60 回日本伝熱シンポジウム実行委員会幹事」

2. 名誉会員の顕彰

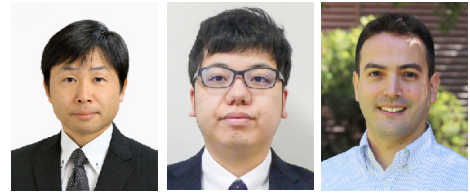
第 61 期では名誉会員として以下の 3 名 (敬称略)
を上記付帯行事において顕彰しました. 本会の発展
に多大なるご貢献ありがとうございました.

- 1) 高松 洋 (熊本高専)
第 50-51 期理事, 第 53 期理事 (伝熱シンポジウ
ム実行委員長), 第 60 期副会長, 第 61 期会長
- 2) 佐藤 勲 (東京工業大学)
第 44-45 期理事, 第 52-53 期副会長
- 3) 花村 克悟 (科学技術振興機構)
第 43-44 期理事, 第 54-55 期副会長, 第 56-58
期理事, 第 59 期会長, ACTS2020 実行委員長

3. 謝辞

2023 年度より新たに設けた登鯉賞の制定には本
会表彰部会委員の皆様には有益なご意見をいただき
ました. また日本伝熱学会賞の選考には, 本会第 62
期表彰選考委員会の皆様には多大なご尽力をいただき
ました. ご協力いただきました関係各位に深く御
礼申し上げます.

日本伝熱学会学術賞を受賞して
*On Receiving Scientific Contribution Award of the
 Heat Transfer Society of Japan*



小宮 敦樹 (東北大学), 古川 琢磨 (八戸工業高等専門学校), Juan F. Torres (ANU)
Atsuki Komiya (Tohoku University), Takuma Kogawa (NIT, Hachinohe), Juan F. Torres (ANU)
e-mail: komiya@tohoku.ac.jp

令和6年5月30日に神戸国際会議場で開催されました日本伝熱学会第62期総会において、令和5年度日本伝熱学会学術賞をいただき光栄に存じます。大変栄誉のある賞をいただき、ご審査いただきました選考委員会の先生方ならびに伝熱学会関係者の皆様に厚く御礼を申し上げます。いただきました賞を励みとし、今後も伝熱工学分野の発展に貢献できるよう努めてまいります。

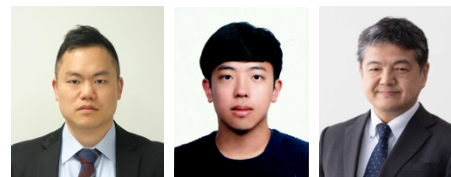
この度の受賞の対象となりました研究「温度境界層共鳴効果を用いた自然対流伝熱促進に関する研究」は、私どもがこの10年で興味を持ち始めたエネルギーの有効利用およびサーマルマネージメントに関する研究内容の一部で、東北大学流体科学研究所で研究を開始したときから培ってきた光学干渉計による温度境界層のその場計測技術を利用しての研究となります。自然対流による伝熱の研究対象は主として層流から乱流への遷移過程を理解することであり、伝熱学会においても古くから研究が進められてまいりましたが、私どもが注目したのは層流領域において如何に低エネルギーで伝熱促進を実現できるか、という観点であります。自然対流の最たる特徴はエネルギーの投入なしで対流伝熱が実現できることにありますが、伝熱をさらに促進するためには無次元数である Ra を臨界値まで上げなければならず、即ち系を大きくするか大きな温度差を付すといった受動的対応に依らざるを得ません。そこで私どもは層流温度境界層に能動的に刺激を与えることによって乱流遷移を早める、もしくはそれに類似する現象を引き起こすことに挑戦をしてみました。刺激を与える手法は複数ありますが、本研究では容易に作り出せる「風」に着目しました。この「風」を数値計算上でパラメータとし、鉛直平板伝熱面にできる自然対流温度境界層に当ててみたところ、ある条件下でのみ伝熱面全体の平均ヌセルト数が上昇することが分かりました。簡易計算であり信

頼性に乏しかったことから、直ちに温度境界層可視化実験を行い、同様の現象を確認しました。可視化実験は、私どもの得意とするところですが、これらの計算および実験結果から、この現象は共鳴現象による温度場の揺らぎが局所的に境界層を薄層化し、伝熱が促進されることを見出しました。

私どもはこの研究の成果が、今後のエネルギー有効利用や環境発電への応用に生かせると考えております。これまで自然対流による伝熱(冷却効果)はその絶対的能力が小さいことから、なかなか日の目を浴びる機会を得ることができませんでした。しかしながら、現在の社会の風潮はエネルギーや熱を地産地消する考えにシフトしてきております。つまりは、その場のエネルギーを有効利用するという考えで、Society5.0の概念にも通ずる持続可能な社会の実現に必要な技術になると考えております。例えば、工場等で排出される未利用廃熱を用いて微噴流を作り出せれば、本研究で見出した共鳴効果により、冷却塔での伝熱促進が期待できます。この例えは本研究の出口を見据えた一部になりますが、この達成のためにはこれからもその原理をさらに探求していかなければならず、言うまでもなく、これからも日本伝熱シンポジウム等において、対流熱伝達を研究されている先生方および計測技術に関する会員の皆様から貴重なご助言・ご指導をいただければなりません。受賞者一同、引き続きご指導賜れば幸甚に存じます。

最後になりましたが、今回の受賞に関しましては、精緻な実験と計算を根気強く進めてくれた学生諸君の協力に依るところが大きく、受賞者のみでの力ではここまでの研究の進展はありませんでした。また、本研究に携わりました東北大学流体科学研究所伝熱制御研究分野のスタッフにも深く感謝いたします。今後も更なる研究の深化に努めてまいります。

日本伝熱学会学術賞を受賞して
On Receiving Scientific Contribution Award
of the Heat Transfer Society of Japan



李 敏赫, 柳 旻勳, 鈴木 雄二 (東京大学)
Minhyeok LEE, Gyeonghun YOO, Yuji SUZUKI (The University of Tokyo)
e-mail: mlee@mesl.t.u-tokyo.ac.jp

この度、「触媒燃焼で直接加熱される高温・高効率熱電発電システムの開発」について日本伝熱学会学術賞の栄誉を賜り、誠に光栄に存じます。

自律ロボットの長時間駆動には、リチウムイオン電池に代わる小型高密度電源が強く求められています。家庭用カセットボンベに用いられているボタンはエネルギー密度が高くかつ交換が容易であるため、可搬機器に最も適した燃料といえます。一方、熱電発電は可動部分を持たず、低エミッション、低騒音の小スケール発電が可能と考えられることから、燃焼ベースの小型熱電デバイスが提案されています。しかし、従来のシステムでは、燃焼器と熱電モジュールが分離しているため熱の有効利用が難しく、また熱電モジュールの作動温度の上限が 280 °C 程度と低く、発電密度および変換効率が低いなどの問題がありました。

本研究では、これらの課題を克服するため、1) 触媒燃焼による熱電素子の高温端の直接加熱、2) 燃料と空気の混合気を熱電素子に沿って流すことによる対流効果を用いた低温端への熱伝導損失の抑制、を特徴とする熱電発電モジュールの設計法の確立とプロトタイプの実作・評価を行いました。

まず、高温の酸化環境で使用可能な熱電材料として、高温端を一体焼結した SiGe 素子[1]、高温端を溶接した Ni 合金素子を仮定し、熱電素子内の熱伝導と対流効果を加味した数値解析により、流速、熱電素子間の間隔が熱損失の低減効果および燃焼効率に与える影響について系統的に評価しました。その結果、実際に製作可能な寸法を考慮すると、燃焼効率をほぼ 100%に保った上で熱伝導損失を SiGe 素子では 1/4, Ni 系合金素子では 1/15 程度に抑制できることを明らかにしました。

そして、数値計算結果に基づいて、サスペンションプラズマ溶射を用いて成膜した多孔質アルミナ膜を触媒担体とする Pd 触媒層を SiGe 模擬素子の高温端上に形成し、最高温度 1074 °C、温度差

700 °C、燃焼効率 9 割以上を実現しました。また、厚さ 0.2 mm の薄板状 Ni 系合金素子からなる高集積性の熱電発電モジュールを試作し、最高温度が 645 °C と予測値からは低い値に留まったものの、10.8 kW/m³ の高い発電密度を達成しました。

さらに、2021 年 7 月には、福島県双葉郡大熊町の帰還困難区域（当時）において、本熱電発電システムのプロトタイプを搭載した自律ロボットの実地走行試験を実施しました[2]。

以上のように、本研究では、熱電素子を触媒燃焼器と一体化し、全く新しい高発電密度の熱電発電システムを提案しました。数値解析によりその設計法を確立するとともに、試作素子を用いた燃焼実験により、対流効果により熱損失が抑制され、高い発電密度が得られることを明らかにしました。今後、素子のさらなる集積化および排熱回収熱電モジュールとの組み合わせによって、高出力の発電システムの開発を目指していきます。今後ともご指導ご鞭撻のほどよろしくお願い申し上げます。

なお、本研究の一部は、NEDO 先導研究プログラムの支援を受けました。ご協力いただいた東京大学浅間研究室、産業技術総合研究所、株式会社 KELK、ダイニチ工業株式会社の関係者の方々に、この場をお借りして感謝申し上げます。

[1] Uchida, S., Lee, M., Lee, C. -H., and Suzuki, Y., High-Temperature Monolithic SiGe Thermo-Electric Device Directly-Heated by Catalytic Combustion, *Appl. Phys. Lett.*, **120-5** (2022) 053901.

[2] 李敏赫, 筑紫彰太, 鈴木雄二, 浅間一, 帰還困難区域での熱電発電システムを用いた自律移動ロボットの実地走行～家庭用カセットボンベを燃料として長時間の環境モニタリングを実現～, 東京大学工学部プレスリリース (2021).

日本伝熱学会技術賞を受賞して
On Receiving Technical Achievement Award of the
Heat Transfer Society of Japan



平沢 浩一, 有賀 善紀 (KOA), 国峯 尚樹 (サーマルデザインラボ)
Koichi HIRASAWA, Yoshinori ARUGA(KOA Corporation)
Naoki KUNIMINE(Thermal Design Laboratory Co.,Ltd)
e-mail : ko-hirasawa@koaglobal.com

このたびは、日本伝熱学会賞 技術賞をいただき、まことに光栄に存じます。表彰選考委員会の皆様をはじめ関係者の方々に深く感謝いたします。

表題は「小形電子部品を対象とした基板放熱型熱設計技術の確立」です。小形発熱電子部品についてプリント配線板を放熱板として利用して熱設計をシステムティックに行う手順作りと微小部品に特化した温度測定技術の構築、さらに表面実装部品の中で使用数が非常に多い抵抗器については、合理的な熱設計を困難にしていた温度管理部位の見直しを含む IEC (International Electrotechnical Commission: 国際電気標準会議)規格改訂の主導など、一連の活動を評価いただきました。

基板放熱型熱設計とは、小形表面実装発熱電子部品が自己を自己の表面積で冷却する能力が不足している場合に、プリント配線板の面積を借用して不足分を補う熱設計手法です。部品単体が自己を冷却する能力は、その部品の表面積を S [m²]、熱伝達率を h [W/(m²·K)]として単体熱抵抗 $R_{th_{own}}=1/(Sh)$ で表わされます。また、設計上その部品に消費させなければならない電力を P [W]、その部品に許容される温度上昇を T_{max} としたときにその部品に要求される冷却能力は目標熱抵抗 $R_{th_{target}}=T_{max}/P$ で表わされます。一つ一つの発熱部品について両者を比較し、以下のような熱設計方針を立てます。 $R_{th_{own}} \leq R_{th_{target}}$ であれば自己の冷却能力が要求される冷却能力よりも高いので対策不要です。 $R_{th_{own}} > R_{th_{target}}$ かつ $R_{th_{target}} \leq 30$ °C/Wの部品はヒートシンクなど本格的な対策が必要で、 $R_{th_{target}} > 30$ °C/Wの部品はプリント配線板の面積を借りて対策します。必要面積の算出には Lee の式[1]などを応用します。この手順を踏むことで、ア트워크前に熱対策が仕分けされるため、手戻りの少ない熱設計が可能となります。

過去の表面実装抵抗器の IEC 規格では、抵抗器に消費させてよい電力は、図 1(a)の横軸を周囲温

度で表わした負荷軽減曲線のみで仕様化されてきました。しかしながら、周囲温度で消費電力上限が定められる部品は、図 2 のリード線形抵抗器のように放熱先が周囲空間の場合だけです。表面実装抵抗器の放熱先はプリント配線板なので、消費可能な電力は図 1(b)のようにプリント配線板と接する端子部温度との関係において仕様化されるべきです。2023 年 8 月に改訂された表面実装抵抗器の IEC 規格には、図 1(b)の負荷軽減曲線が例示されました。基板放熱型熱設計との組み合わせにより、表面実装抵抗器を使用した熱設計は、合理的に実施できるようになると考えます。今後は周知活動に尽力する所存です。有難うございました。

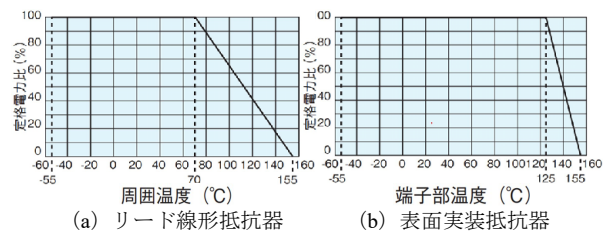


図 1 負荷軽減曲線

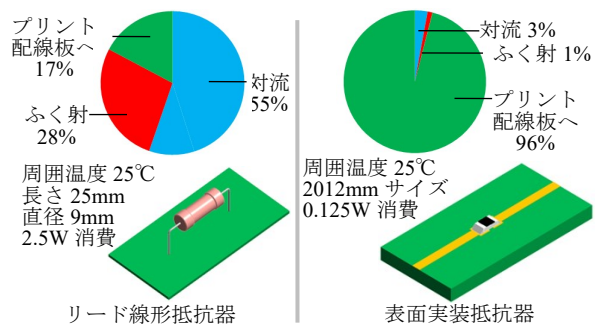


図 2. 放熱割合

参考文献

[1] S. Lee, S. Song, V. Au, and K.P. Moran, “Constriction/Spreading Resistance Model for Electronics Packaging”, Proceedings of the 4th ASME/JSME Thermal Engineering Joint Conference, Vol. 4, pp.199-206, 1995

日本伝熱学会技術賞を受賞して
On Receiving Technical Achievement Award of the
Heat Transfer Society of Japan



川島 知之, 小林 祥大, 浅川 一樹(JFE スチール株式会社)
Tomoyuki KAWASHIMA, Akihiro KOBAYASHI, Kazuki ASAKAWA (JFE Steel Corporation)
e-mail: tom-kawashima@jfe-steel.co.jp

この度、日本伝熱学会第 62 期総会において、技術賞を受賞する栄誉をいただき、大変光栄に思います。このような名誉ある賞をいただけたことは、表彰選考委員会の皆様をはじめ、関係各位のご支援とご指導の賜物と深く感じております。心より感謝申し上げます。

今回の受賞の対象となった技術は「長寿命・低 NOx・高効率ラジアントチューブバーナー」となります。第 58 回日本伝熱シンポジウムでの企業特別セッションでの発表を初めとして、The 33rd International Symposium on Transport Phenomena, 日本機械学会熱工学コンファレンス 2023 等での成果発表及びそれらに関連した特許について評価いただきました。

ラジアントチューブバーナー（以下 RTB）では金属製のチューブ内で燃焼が生じ、その燃焼熱をチューブに伝えます。そして、加熱されたチューブの輻射熱により鋼板を加熱します（図 1）。RTB は、無酸化または還元雰囲気内で鋼板等を加熱可能であり、多くの加熱炉で用いられています。RTB に求められる性能としては、①長寿命性、②低 NOx 性、③高熱効率（=CO₂削減）性能の 3 つが挙げられます。実操業では RTB の長寿命化は特に重要な課題でした。そこで、重力方向の変形抑止が期待できる楕円形状のチューブを用いた RTB の実用化に取り組みました。

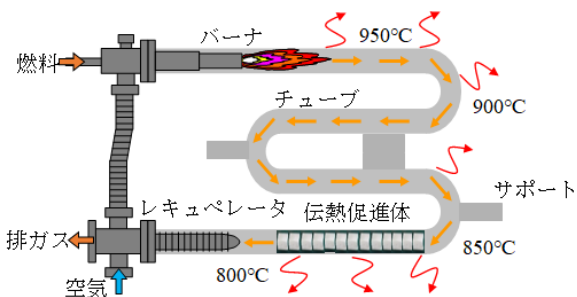


図1 ラジアントチューブバーナーの構造

上記の 3 つの課題をいずれも高い水準で解決した楕円型 RTB を図 2 に示します。各開発アイテムに関する説明を以下に詳述します。

- ① 支持構造を第一バンド-第三バンド連結構造とすることで、チューブとサポートの接合部に荷重が集中することを防ぎ、サポート部の変形を抑止しました。
- ② 楕円型のチューブと円形型のバーナーを組み合わせることで、バーナー近傍において旋回流と循環流が発達し、大幅な NOx 低減を実現しました。
- ③ 楕円形状のチューブに適した歯車形状の伝熱促進体を開発しました。燃焼ガス温度からチューブ内壁への伝熱量が低下する第 4 直管部に開発した伝熱促進体を設置することで高い熱効率を達成しました。

開発した RTB は JFE スチール千葉地区冷延工場に導入されてから 7 年程度経過しており、期待通りの高い効果が確認されています。

最後になりましたが、本技術の開発にご協力いただいた社内外の関係者の皆様に、あらためて深く感謝申し上げます。今後も伝熱技術の研究・開発により産業界の発展に貢献して参ります。

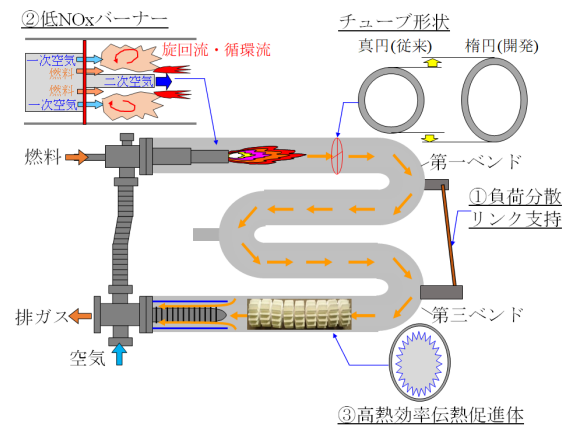


図2 開発したラジアンチューブバーナー

日本伝熱学会登鯉賞を受賞して
*On Receiving Touri Award (Outstanding Young Researcher
Award) of the Heat Transfer Society of Japan*



志賀 拓磨 (産業技術総合研究所)

Takuma SHIGA (National Institute of Advanced Industrial Science and Technology, AIST)

e-mail: takuma.shiga@aist.go.jp

先の第 61 回日本伝熱シンポジウムにおきまして、日本伝熱学会登鯉賞をいただきました。ご推薦いただきました方々、ご審査いただきました方々を始めとし、伝熱学会関係者の皆様にご心より感謝申し上げます。本受賞を励みとし、伝熱の学理と応用のさらなる発展に貢献できるよう一層の精進に務める所存です。

受賞の対象になりました「表面に局在するフォノン波による熱伝導低減機構の解明」では、表面に局在するフォノン（表面フォノン）が薄膜の熱伝導に与える影響を理論的に明らかにしました。以下では、本研究の目的と結果を紹介させていただきます。

膜厚が薄くなるにつれて、薄膜表面におけるフォノン散乱が支配的になり、熱伝導率が低下することが知られています。この熱伝導のサイズ効果はボルツマン輸送方程式に基づいた Fuchs-Sondheimer モデルによって説明できることが知られています。一方、膜厚を原子層レベルまで薄くすると、振動モードはバルクと全く違ったものになり、従来モデルでは説明できません。極限的な薄さにおける熱伝導がサイズ効果で説明できないことは直感的にも明らかですが、十分薄いが原子層レベルではない膜厚領域、具体的には、膜厚がバルク中の平均自由行程よりも十分薄く、フォノンの波長と同程度またはそれ以下になる場合の熱伝導の理解は限定的でした。

数 Å から 10 nm の膜厚の極薄膜材料の熱伝導に関するこれまでの研究では、もっぱら分子動力学シミュレーションが用いられていましたが、フォノン熱輸送スペクトルなどのモーダルな解析は行われていませんでした。このため本研究では、極薄膜材料の構造をあらわに考慮したフォノン輸送解析を実施するべく大規模格子動力学法を開発し、異なる表面を持つ極薄膜シリコンの膜厚に依

存した熱伝導解析を実施しました。

膜厚の減少に伴いフォノン波の閉じ込め効果が顕著になると、波長と周波数の関係であるフォノン分散関係が大きく変調されることがわかりました。この変調において、バルクや単原子層とは異なる振動状態があることに気づき、固有振動解析によって、これが薄膜表面に局在する表面フォノンであることがわかりました。表面フォノンの状態密度は大きくないように思えますが、数 nm 以下の膜厚領域では、表面フォノンの存在は無視できません。そこで、フォノン同士の散乱を詳細に調べることで、表面フォノンが薄膜全体の熱伝導に与える影響を評価しました。

その結果、表面フォノンが薄膜全体または内部に伝搬するフォノンを強く散乱することを初めて明らかにしました。さらに、20 nm までの膜厚領域では、表面フォノンによる熱伝導抑制が無視できないことも理論的に明らかにしました (Phys. Rev. B **103**, 195418 (2021))。本研究で得られた知見に基づくと、薄膜表面構造を制御することで、表面フォノンの振動状態や熱伝導率低減を抑えることが可能です。また、本成果は二次元物質を積層した材料などで見られる、二次元とも三次元とも言えない振動状態を有する材料の熱伝導を理解することにも繋がります。

このような基本的な研究課題に取り組むことができたのも、JST さきがけ「熱輸送のスペクトル学的理解と機能的制御」にて、花村克悟研究総括と領域アドバイザーから「本質に迫る研究をせよ」と激励をいただいたおかげです。ここに御礼を申し上げます。また、当時研究を共に進めてくれた森田路真氏にも感謝します。今後もこのようなアプローチをさらに進めて、ナノマイクロスケール熱工学のさらなる発展に貢献していきたいと考えています。

日本伝熱学会登鯉賞を受賞して

*On Receiving Touri Award
of the Heat Transfer Society of Japan*

岸本 将史 (京都大学)

*Masashi KISHIMOTO (Kyoto University)**e-mail: kishimoto.masashi.3m@kyoto-u.ac.jp*

この度は日本伝熱学会登鯉賞を頂き、誠に光栄に存じます。選考委員会ならびに関係者の皆様にご感謝申し上げます。この栄誉ある賞を受賞できたのは、これまでご指導いただいた先生方、研究相談に付き合っていたいただいた同世代の方々、そして粘り強く研究に取り組んでくれた学生の皆さんあってこそそのものと感じています。この場をお借りして御礼申し上げます。また、学生の頃からお世話になり、常に研究活動の中心であった伝熱学会から賞を頂けたことは、大変嬉しく思います。

受賞対象の研究課題名は「固体酸化物形燃料電池の多孔質電極解析基盤技術の開発とそのデジタルツイン構築に関する研究」であり、これまで伝熱シンポジウムのほか、機械学会等の講演会や国際ジャーナルでも関連する内容を発表しています。固体酸化物形燃料電池 (Solid Oxide Fuel Cell: SOFC) は、私が修士学生の頃から一貫して取り組んでいる研究対象であり、電極に用いられる多孔質体内部における輸送・反応連成現象を明らかにし、より良い電極を設計する際の指針を得ることを目的としてきました。

SOFC の電極はサブミクロンスケールの粒子から形成される多孔質体であり、その内部では電子・イオン・ガスの輸送現象が生じるとともに、電気化学反応が生じています。SOFC の性能向上に向けて、それらの現象が円滑に進行できるように多孔質構造の設計が必要とされています。従来は経験則に基づく設計がなされてきましたが、近年の観察技術の発展により、電極構造をナノスケールで 3 次元的に観察することが可能になりました。私自身は、集束イオンビームを備えた走査型電子顕微鏡 (Focused Ion Beam – Scanning Electron Microscope: FIB-SEM) を用いて、SOFC の電極構造の観察を行ってきました^[1]。京都大学に FIB-SEM が導入されたのは、私が修士 1 年生であった 2009 年の初めであり、それ以来私の研究にお

ける相棒とも呼べる存在です。その他にも X 線 CT 技術を用いた観察技術も同時期に SOFC の電極観察に適用されました。それらから得られる 3 次元の構造データは、これまでの断面 2 次元情報と比べると圧倒的に豊富な情報量を有しており、多孔質内部における 3 次元的な輸送パスや反応サイトの分布を可視化することが可能になりました。また、構造を特徴づける構造パラメータの定量化についても、特段の仮定を置くことなく行うことが可能になりました。これらの可視化・定量化技術の開発に学生の頃から携わり、今でもその高度化に取り組んでいます。さらに、実多孔質構造を計算系とする輸送・反応連成シミュレーション技術の開発も行い^[2]、電極構造から性能を予測することが可能になりました。このような、電極多孔質構造の詳細観察・構造定量化・数値シミュレーションによる性能予測といった電極解析に有用な一連の基盤技術は、研究開始当時ほとんど未整備であったため、一つ一つ丁寧に作り上げていきました。

3 次元構造観察を発端とする電極解析基盤技術の開発により、SOFC の電極構造の最適化への期待が高まりました。しかし、現実はそのままで甘くはなく、思ったほどスムーズには進んでいないのが実情です。その原因として、電極の 3 次元構造観察や、構造の定量化、さらには電極の数値シミュレーションといったプロセスが、どれも作業負荷や計算負荷が高いという点が挙げられます。例えば 3 次元構造観察は、丁寧な試料作製に加え、数時間から十数時間程度のプロセスタイムが必要です。また、得られた画像を解析可能なデータ型にするためには、領域分け (segmentation) という作業が必要であり、手作業も介在するため時間がかかります。構造定量化や性能予測のための数値シミュレーションについても、複雑な 3 次元多孔質を対象とするため計算時間が膨大なものとなり

がちです。

このような問題を受けて、近年発展が目覚ましい機械学習技術を取り入れることで、ボトルネックとなっているプロセスを高速化することを考え始めました。初めて研究テーマに機械学習を取り入れたのは 2021 年の夏でした。当初は機械工学・熱工学を専門とする研究室において、機械学習をど真ん中に置くテーマを立ち上げることにはためらいがありました。しかし、FIB-SEM 観察により得られる画像の処理や、構造情報からの特徴量の抽出というのは、機械学習技術が得意とするところであり、適用するに際のハードルが低かったことは幸運でした。また、周囲の方々のアドバイス、後押しもあり、思い切って始めることができました。その後、携わってくれた／くれている学生達の頑張りにより、成果に結びつきつつあります。

SOFC の電極解析に機械学習技術を適用している具体例をいくつか紹介します。図 1 に示すように、3 次元構造観察を発端とする電極構造最適化ループは、3 次元構造観察、領域分け、構造定量化、性能評価 (数値シミュレーション)、そしてフィードバックからなります。まず、観察から得られた 3 次元構造データの領域分けは、これまで手作業を含む長時間の作業が必要でしたが、semantic segmentation という技術を適用することで、瞬時に済ませることが可能になりました^[3]。車の自動運転のための画像認識などに広く用いられている技術であり、ライブラリも整備されているため、今までの苦労は何だったのかと思うくらい、なんなく開発ができてしまいました。次に解析可能なデータ型になった構造情報から、構造を特徴づける構造パラメータの抽出を試みました。電極の性能と相関のある構造パラメータの中でも、輸送現象に関係する屈曲度ファクタは従来手法による定量化の負荷が高いため、最初のターゲットとしました。画像からの特徴量抽出を得意とする畳み込みニューラルネットワーク (Convolutional Neural Network: CNN) を用いることで、電極を構成するどの相に対しても瞬時に定量化することに成功しました^[4]。また、そもそもの電極作製の所からデジタル空間で行うことができれば、構造観察のプロセスもバイパスできることに気がつき、模擬電極構造生成モデルの開発に取り組みました。敵対的生成ネットワーク (Generative Adversarial

Network: GAN) を用いることで、本物そっくりな多孔質電極構造を生成することに成功しました。さらに、特定の幾何的、統計的な制約を満たすような構造を生成するモデルとして、条件付き GAN (Conditional GAN) の開発にも取り組み、体積率と構造スケールを明示的に指定して模擬構造を生成できるモデルが構築できつつあります^[5]。その他にも、数値シミュレーションの代替手段として Physics-Informed Neural Network (PINN) の適用や、Persistent Homology に基づく位相的データ解析に基づく 3 次元構造情報の次元圧縮など、新たな要素を取り入れた研究を行っています。

このように、受賞研究課題名の後半部分である「デジタルツイン構築に関する研究」については、研究を始めてからまだ日が浅く、道半ばと言わざるを得ません。電極構造最適化ループのデジタルツインを実現するためには、各要素技術の高度化や、それらをスムーズにつなぐ技術の開発が必要です。この度の登壇賞の受賞を激励として受け取り、今後も研究に邁進していきたいと思っております。伝熱学会の会員の皆様におかれましては、今後ともご指導のほどどうぞよろしくお願いいたします。

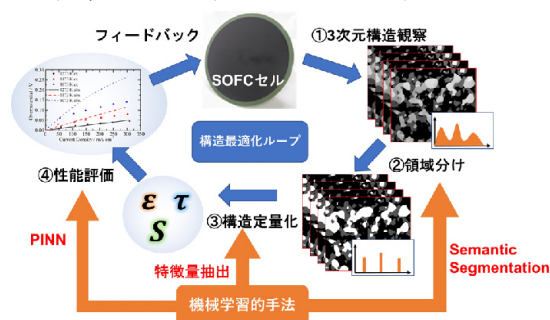


図 1 3 次元電極構造解析を発端とする電極構造最適化ループと機械学習技術の適用

参考文献

- [1] Kishimoto, M., et al., *J. Power Sources* **196** (2011) 4555-4563.
- [2] Kishimoto, M., et al., *J. Electrochem. Soc.* **159**(3) (2012) B315-B323.
- [3] Wang, Y., *ECS Transactions* **111**(6) (2023) 457-467.
- [4] 岸本将史 他, 第 60 回日本伝熱シンポジウム.
- [5] Kishimoto, M., et al., *J. Power Sources* **580** (2023) 233411.

日本伝熱学会登鯉賞を受賞して

*On Receiving Touri Award
of the Heat Transfer Society of Japan*



スルブリス ドナタス (東北大学)
Donatas SURBLYS (Tohoku University)
e-mail: donatas@tohoku.ac.jp

この度、2023 年度日本伝熱学会登鯉賞をいただきまして気の引きしまる思いであり、誠に光栄に存じます。ご推薦くださいました方々、ならびに選考委員会の皆様、心より御礼申し上げます。

受賞の対象となった研究課題は「分子熱流体解析法の開発とナノスケール熱流動解析への応用」です。電子デバイスの開発が高いペースで進められていますが常につきまとうのはサーマルマネジメント問題です。小型化によって構造がナノ領域に達しており、従来の手法での解析や改良が困難になってきています。そこで原子個々の運動を古典的力学で解いている分子動力学解析 (Molecular Dynamics; MD) の出番となります。

本研究では異なるスケールの凹凸固液界面の熱輸送特性に関する MD 計算を行い、驚くことに多くの場合は接触面積の増加分の熱輸送向上も見られました[1]。つまり、拡大伝熱面の概念をそのまま適用できることが分かりました。一方、固液間相互作用が特に強い時に界面での液体が結晶化し、弱い時に液体分子が溝に入らず、熱輸送性能が凹凸のスケールに左右されます。この計算系は単原子分子から構成されたものでしたが、より実現象に近い複雑な分子から構成される場合、分子の慣性半径、界面での配向、水素結合の有無など、熱輸送に影響を与える要因は多岐に渡ります。分子の扱いも当然ながら複雑になり、最初に扱った 2 体相互作用の質点から多体相互作用の分子に変わり、形状を保つために拘束力学も加わります。複雑な系の熱流束を正しくかつ効率的に算出させる手法はもう一つ本研究のテーマです[2,3]。一旦煩雑に思われるが、MD であっても、エネルギー保存の物理法則が成り立たなければならないため、エネルギーの時間変化から考えていけば、最終的に原子ごとの熱流束ベクトルが定義でき、積分することによって効率的かつ正確に検査体積内の値が分かれます。

現実系の計算について触れてきましたが MD では現実には成し得ない操作が可能なメリットもあります。前段の凹凸系では固液間相互作用強さが重要でしたが、実現象と関連づける際に付着仕事が使われます。付着仕事は固液の分離に必要な可逆仕事であり、実験では接触角測定と Young-Dupré 式で求められます。MD での接触角測定は系のサイズや時間の制約があり、必ずしも最適とは言えません。そこで使われるのは熱力学的積分です。分かりやすいのは Phantom-Wall 法であり、液にのみ斥力を働かせる仮想壁を純静的に動かし、液相を剥がします。仮想壁のピストン仕事は固液付着仕事と体積を増やす仕事となります。本研究では発展型である Dry-Surface 法を扱いました。Dry-Surface 法は仮想壁面の代わりに固液作用そのものを純静的に斥力作用に変え、ピストンの役割をさせます。長距離作用であるクーロン作用の扱いが非常に厄介となり、効率的な Dry-Surface 法の適用スキームを開発しました[4,5]。

最後になりましたが、学生時代からご指導頂き、今もご協力いただいている山口康隆先生や多大なる助言をいただきました Darmstadt 工科大学の F. Müller-Plathe 先生、F. Leroy 氏、東北大学の菊川豪太先生、松原裕樹氏、そして研究に理解を示し、後押ししてくださった小原拓先生に心より感謝申し上げます。

- [1] Surblys, D., Kawagoe, Y., Shibahara, M., Ohara, T., *J. Chem. Phys.*, **150** (2019) 114705.
- [2] Surblys, D., Leroy, F., Yamaguchi, Y., Müller-Plathe, F., *Phys. Rev. E*, **99** (2019) 051301.
- [3] Surblys, D., Müller-Plathe, F., Ohara, T., *J. Appl. Phys.*, **130** (2021) 215104.
- [4] Surblys, D., Matsubara, H., Kikugawa G., Ohara, T., *J. Chem. Phys.*, **148** (2018) 134707.
- [5] Surblys, D., Matsubara, H., Kikugawa G., Ohara, T., *J. Phys. Chem. A*, **126** (2022) 5506.

日本伝熱学会奨励賞を受賞して
*On Receiving Young Researcher Award
of the Heat Transfer Society of Japan*



アリザデ メヘルザード (大阪大学)
Mehrzad ALIZADEH (Osaka University)
e-mail: alizadeh.mehrzad@gmail.com

I am incredibly honored and humbled to receive the Young Researcher Award from the Heat Transfer Society of Japan (HTSJ). This recognition from such a prestigious organization is a tremendous motivator and validates my passion for research in heat and mass transfer. I would like to express my sincere gratitude to the selection committee, the society's secretariat, and my supervisors, Prof. Shohji Tsushima and Assoc. Prof. Takahiro Suzuki. Additionally, I am grateful to our collaborators, Asst. Prof. Patcharawat Charoen-amornkitt from King Mongkut's University of Technology Thonburi (KMUTT), Thailand, and Assoc. Prof. Jeff Gostick from the University of Waterloo, Canada.

The research for which I received the award, entitled “Optimized structure of electrochemical reaction transport field revealed through mathematical science and non-equilibrium thermodynamics”, is my doctoral project at Osaka University, for which I also received a Young Scientist Research Fellowship from the Japan Society for the Promotion of Science (JSPS). Reactive transport in porous media is crucial for various systems, including catalytic reactors and electrochemical energy devices (e.g., secondary batteries and fuel cells). In these devices, the porous electrode structure significantly impacts performance. Our research focuses on enhancing device efficiency by optimizing these structures using mathematical optimization and non-equilibrium thermodynamics analysis. By leveraging mathematical modeling and optimization techniques, we refine the porous electrode structures to enhance overall cell performance. In addition, by employing non-equilibrium thermodynamics analysis, we aim to elucidate the physicochemical reasons behind performance improvement and theoretically identify

the optimal structure for maximum performance under non-equilibrium conditions.

Electrodes are the heart of electrochemical devices. They are porous reactors where fluid flow, heat transfer, electric charge transport, and electrochemical reactions occur simultaneously. Optimizing electrode structures is critical for improving device performance and lifespan by balancing these processes. In our first attempt, we employed a density-based topology optimization technique to find the optimal layout of a porous (electro-) chemical reaction-diffusion system. This method utilizes a macro-scale finite element model and aims to maximize the conversion rate and minimize losses associated with various phenomena within the electrode. Additionally, we used entropy generation analysis based on the concept of non-equilibrium thermodynamics to analyze the optimization process. We found that a better design not only corresponds to lower overall entropy generation but also may promote a more uniform distribution of entropy generation at the local level. These findings have been published as “Alizadeh et al., *J. Electrochem. Soc.*, 170, 2023”, “Alizadeh et al., *Chem. Eng. Sci.*, 275, 2023”, and “Charoen-amornkitt et al., *Int. J. Heat Mass Transfer*, 202, 2023”.

Given that the transport and rate processes in these systems occur at micro- and nano-scale, it is essential to employ pore-scale models that can capture these phenomena at a realistic length scale without reliance on volume-averaged properties required for finite element modeling. However, pore-scale models, such as geometrically resolved direct numerical simulations, require significant computational power that may not be manageable when incorporated into an optimization loop.

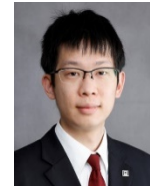
To address these challenges, our group developed a

novel method that integrates pore network modeling and metaheuristic optimization algorithms. This method optimizes the morphology of an advection-diffusion-reaction porous reactor by directly resolving the inherent heterogeneity of the porous structure without resorting to macro-homogeneous models, while eliminating excessive computational power requirements associated with direct numerical simulations. The method has a broad application scope for porous structure design problems and is expected to establish a new trend in high-resolution porous reactor design. The optimized structures obtained from this framework also reveal previously unresolved microscale heterogeneity, providing insights into the mechanisms and controlling factors. This work was presented at the International Workshop for Sustainable Energy Conversion Systems (IWSEC

2024), which was co-located with 61st Japan Heat Transfer Symposium.

Finally, we would also like to extend our sincere gratitude to the Japan Society for the Promotion of Science for their invaluable financial support through the Grant-in-Aid for JSPS Fellows (Grant Number: 22KJ2198) and JSPS KAKENHI Grant (Grant Number: 21H04540). Additionally, we are highly grateful for the instrumental support received from the Office of the Permanent Secretary, Ministry of Higher Education, Science, Research and Innovation (OPS MHESI), Thailand Science Research and Innovation (TSRI), and King Mongkut's University of Technology Thonburi.

日本伝熱学会奨励賞を受賞して
On Receiving Young Researcher Award
of the Heat Transfer Society of Japan



榎本 陸 (東京工業大学)

Riku ENOMOTO (Tokyo Institute of Technology)

e-mail: enomoto.r.ab@m.titech.ac.jp

この度、日本伝熱学会第 62 期総会におきまして日本伝熱学会賞 (奨励賞) を受賞し、光栄に感じております。ご審査下さいました選考委員の先生方、受賞対象の研究でご指導を頂いた村上陽一先生、ご支援頂いた共同研究者の皆様にご感謝申し上げます。

受賞表題は「熱力学的駆動力と温度場制御を用いた未利用な長波長太陽光を短波長変換する革新的なフォトン・アップコンバージョン固体材料系の創出」で、原著論文二報[1,2]と第 59 回及び第 60 回の伝熱シンポジウムでの発表が該当しております。

現在、光触媒や太陽電池を含む幅広い光エネルギー変換では、各材料に固有な波長より長波長側の光 (bandgap energy 以下のエネルギーの光子) は未利用で、これが変換効率を根本的に制限しています。この制限を回避できる方法として、低エネルギーの光子 (長波長の光) をより高エネルギーな光子 (短波長の光) に変換する「フォトン・アップコンバージョン (UC)」があります。近年、二種類の有機分子 (光吸収を担う「増感分子」と短波長発光を担う「発光分子」) の間のエネルギー移動を用いる UC 法が比較的強度な入射光に適用可能な方法として注目を集めています。しかし、従来研究の大半は応用に不適な有機溶媒溶液の形態でした。

その解決に向けて材料の固体化が追求されていますが、従来研究では増感分子と発光分子とを均一に混合するために融液の急速硬化や結晶の急速析出等の固体生成法を用いたため、結晶性が極めて低く、材料中を励起状態が殆ど伝播しないため、低効率で高い入射光強度を要する低性能なものでした。

本研究では、二種分子の均一な混合に、熱力学的な駆動力である混合エントロピーを利用する独自の着想から、発光分子の結晶中に増感分子を均一に固溶させた固溶体 UC 結晶を創出しました (図 1)。本材料は、その極めて高い結晶性によって、従来の固体 UC 材料では達し得なかった非常に高い UC 量子効率を示し、太陽光強度の約 1/5 という極めて低

い入射光強度で動作可能、空気中で使用可能、連続光照射で安定という、従来の固体 UC 材料の短所を一挙に解決した革新的な材料を創出しました [1]。

続いて、基板上に多結晶の固溶体 UC 膜を製膜する温度勾配制御装置を考案、開発しました (図 2)。本装置は分子融液の面内方向の凝固・結晶化の速度を最適に時空間温度制御することを可能としたもので、これにより、大気中で太陽光強度以下の微弱な青色光を連続的に紫外光へと変換する革新的な固溶体多結晶膜を創出しました [2]。

2024 年 4 月に東京工業大学ゼロカーボンエネルギー研究所の助教に着任致しました。分子スケールの伝熱工学・熱工学の観点からエネルギー有効利用の研究に取り組んでゆく所存です。今後ともご指導ご鞭撻のほど、何卒宜しくお願い申し上げます。

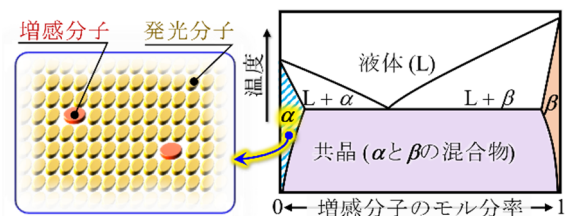


図 1 実現した固溶体 UC 結晶の模式図。

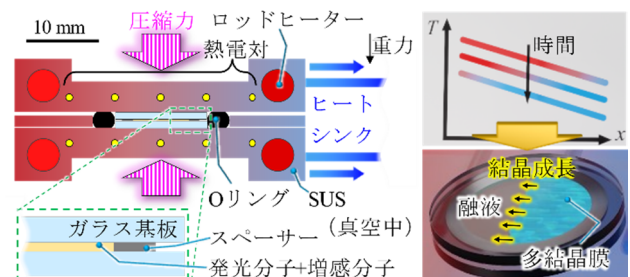


図 2 本研究で考案、創出した温度勾配制御による固溶体多結晶成膜装置とその原理の模式図。

参考文献

- [1] Enomoto, R., Murakami, Y. et al., Materials Horizons, **8** (2021) 3449.
[2] Enomoto, R. and Murakami, Y., Journal of Materials Chemistry C, **11** (2023) 1678.

第 61 回日本伝熱シンポジウム・IWSEC2024 の報告

*Report on the 61st National Heat Transfer Symposium of Japan
and on International Workshop for Sustainable Energy Conversion Systems*

鈴木 洋, 村川 英樹, 菰田 悦之 (神戸大学), 津島 将司 (大阪大学), 岩井 裕 (京都大学),
西田 耕介 (京都工芸繊維大学), 小澤 守, 小田 豊 (関西大学),
木村 文義, 河南 治 (兵庫県立大学), 日出間 るり (名古屋大学),
服部 博文 (名古屋工業大学), 須賀 一彦 (大阪公立大学),
店橋 護, 加藤 之貴 (東京工業大学), 中村 元 (防衛大学),
岩本 薫, 田川 義之 (東京農工大学), 服部 康男 (電力中央研究所), 塚原 隆裕 (東京理科大学),
鹿園 直毅, ムテルデウ ティモテ, イ エリム, 塩見 淳一郎, 鈴木 雄二, 白樫 了 (東京大学),
能村 貴宏, 田部 豊 (北海道大学), 中曾 浩一, 山田 寛 (岡山大学), 江目 宏樹 (山形大学),
宮崎 康次, 伊藤 衡平, 藏田 耕作 (九州大学), 櫻井 篤 (新潟大学),
春木 将司 (金沢大学), 小糸 康志 (熊本大学), 松川 嘉也, 徳増 崇 (東北大学),
荒木 拓人 (横浜国立大学), 勝身 俊之, 佐藤 大輔 (長岡技術科学大学),
西 剛伺 (足利大学), 小泉 雄大 (ナブテスコ (株)),
近藤 義広 ((株) 日立アカデミー), 春木 直人 (岡山県立大学)
*Hiroshi SUZUKI, Hideki MURAKAWA, Yoshiyuki KOMODA (Kobe University),
Shohji TSUSHIMA (Osaka University), Hiroshi IWAI (Kyoto University),
Kosuke NISHIDA (Kyoto Institute of Technology), Mamoru OZAWA, Yutaka ODA (Kansai University),
Fumiyoshi KIMURA, Osamu KAWANAMI (University of Hyogo), Ruri HIDEWA (Nagoya University),
Hirofumi HATTORI (Nagoya Institute of Technology), Kazuhiko SUGA (Osaka Metropolitan University),
Mamoru TANAHASHI, Yukitaka KATO (Tokyo Institute of Technology),
Hajime NAKAMURA (National Defense Academy),
Kaoru IWAMOTO, Yoshiyuki TAGAWA (Tokyo University of Agriculture and Technology),
Yasuo HATTORI (Center Research Institute of Electric Power Industry),
Takahiro TSUKAHARA (Tokyo University of Science),
Naoki SHIKAZONO, Timothée MOUTERDE, Yaerim LEE, Junichiro SHIOMI, Yuji SUZUKI,
Ryo SHIRAKASHI (The University of Tokyo), Takahiro NOMURA, Yutaka TABE (Hokkaido University),
Koichi NAKASO, Yutaka YAMADA (Okayama University), Hiroki GONOME (Yamagata University),
Koji MIYAZAKI, Kohei ITO, Kosaku KURATA (Kyushu University),
Atsushi SAKURAI (Niigata University), Masashi HARUKI (Kanazawa University),
Yasushi KOITO (Kumamoto University), Yoshiya MATSUKAWA, Takashi TOKUMASU (Tohoku University),
Takuto ARAKI (Yokohama National University),
Toshiyuki KATSUMI, Daisuke SATO (Nagaoka University of Technology), Koji NISHI (Ashikaga University),
Katsuhiro KOIZUMI (Nabtesco Corporation), Yoshihiro KONDO (Hitachi Academy Co., Ltd.),
Naoto HARUKI (Okayama Prefectural University)*

1. シンポジウム概要

第 61 回日本伝熱シンポジウムは、5 月 29 日(水)から 31 日(金)の日程で、神戸国際会議場において開催されました。神戸での開催は 2000 年(実行委員長:藤井照重先生)以来の 24 年ぶりとなります。本シンポジウムでは新たな試みとして、国際ワークショップ(International Workshop for

Sustainable Energy Conversion Systems: IWSEC2024, 実行委員長:津島将司先生)を併設して行いました。参加登録者数は 772 名(ご招待者 8 名・IWSEC 参加者を含む)、講演数は特別講演 1 件、IWSEC18 件を含んで 349 件(基調講演 30 件)となりました。完全対面方式となった前回の第 60 回[参加登録者数:738 名]、ハイブリッド開催の第 59 回[参加登

録者数：703 名] に対して、COVID 前の第 56 回 [参加登録者数：768 名] と、参加登録者数はほぼ同等まで回復しております。講演数については第 60 回の 350 件をやや下回りましたが、一部のオーガナイズドセッションを国際ワークショップに移行したためかも知れません。

今回のシンポジウムでは新たにバイオ伝熱が加わり、8 つのオーガナイズドセッション (OS) が企画されました。また一般セッションに加えて、優秀プレゼンテーション賞セッション、特定推進研究特別ワークショップ (招待講演のみ)、企業の方が気軽に議論できる「モノづくりセッション」が開催されました。公開講演会として特別講演会に加えて「人と熱との関わりの足跡 (その 7)」、 「関西地区企業における部品開発・技術開発の紹介」が開催されました。2 日目 (5 月 30 日) には特別講演・総会の後に、ポートピアホテルにて、意見交換会が開催され、281 名 (招待者 5 名を含む) のご参加をいただきました。第 60 回の 253 名、第 59 回の 213 名に比べて増加しております。

以上、本シンポジウムの概要をまとめました。本記事にはオーガナイズドセッションの報告もまとめていただいておりますので、是非ご一読ください。
(鈴木 洋, 村川 英樹)



図 1-1 神戸国際会議場の概観と看板

2. 国際ワークショップ (IWSEC)

2.1 概要

伝熱シンポジウムと併催して国際ワークショップを開催することとなった。テーマとしてはエネルギーに関連したものとすることが実行委員会で示され、OS「水素・燃料電池・二次電池」のオーガナイザーに企画と運営が依頼された。「International Workshop for Sustainable Energy Conversion Systems 2024」としてワークショップを開催し、日本、中国、韓国からあわせて 4 件の基調講演に加えて、14 件の一般講演があり、1 日半をかけて実施された。

2.2 基調講演

最初に、産業技術総合研究所の前田哲彦氏より「Evaluation of water electrolysis in renewable energy and development of hydrogen energy systems」と題した基調講演が行われた。福島再生可能エネルギー研究所における研究開発を中心として、再生可能エネルギーを用いた水電解システムの構築と評価について、経緯と現状、さらに将来展望も含めた講演がなされた。初日の午後には清華大学の Jianbo Zhang 教授より「A nanofluidic reactor for pure water electrolysis with no Ir, no membrane, and no added electrolyte」として、電極をナノスケールにまで近接させた場合に両極の電気二重層が重なることを利用した、全く新しいコンセプトによる純水を用いた水電解についての基調講演がなされた。二日目の午前には、ソウル国立大学の Jungwon Park 准教授によって「Real-time nanoscale observation of catalysts in energy conversion systems」と題して、触媒粒子の実時間観察についての基調講演がなされた。ナノ粒子への物質の挿入・脱離や溶解の過程などを捉えた最新の結果が紹介された。午後には上海交通大学の Peng Zhang 教授より「Data-driven design and optimization of thermal energy storage system for heating and cooling applications」の基調講演が行われ、蓄熱システムのデータ駆動型アプローチによる最適化に関するこれまでの取り組みと最新の研究成果が示された。

2.3 まとめ

基調講演に加えて、一般講演についても興味深い発表ばかりであり、活発な質疑応答がなされた。最新の研究成果について参加者が議論し、フィードバ

ックと刺激を得たワークショップとなった。ワークショップの開催にご協力をいただいた皆様にあらためて感謝いたします。

(津島 将司, 岩井 裕)

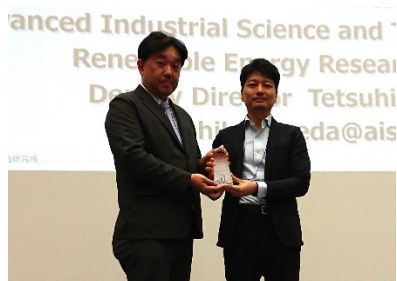


図 2-1 Dr. Tetsuhiko Maeda (Left)



図 2-2 Prof. Jianbo Zhang (Left)



図 2-3 Prof. Jungwon Park (Left)

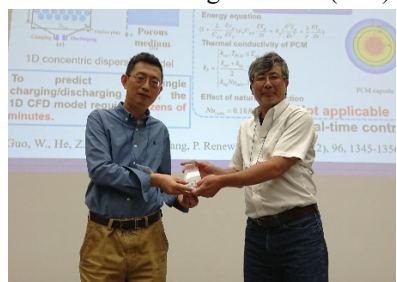


図 2-4 Prof. Peng ZHANG (Left)



図 2-5 講演会場の様子

3. 特別講演

第 61 回日本伝熱シンポジウム特別講演会は、公開講座として、第 62 期総会の前に開催されました。講師には神戸大学大学院工学研究科長の小池淳司先生をお招きしました。小池先生のご専門は土木計画学ですが、国土交通省や内閣府の委員を歴任されており、また環境庁からも表彰され、都市計画や技術政策にご意見を述べられる立場にある方です。また社会科学、科学哲学的なご研究を精力的に行われています。

今回は「研究者・技術者の教養」と題してご講演を賜りました。「教養とは何か」。先生のご講演ではまず教養について述べられました。「教養とは知識の量ではなく、見識である。すなわち教養人とは常識的価値判断ができる人である」、一方で「常識を疑う常識を持つべきである」と述べられた。また「中庸」についても言及され、本当の中庸は「固執しない」しかし「同調もしない」ということであると講演されました。先生のご講演内容は、研究者・技術者が本来どうあるべきかを示唆しておられ、今後の研究者の育成に関して指針を示されました。

小池先生の特別講演は非常に好評であり、懇親会にご出席された小池先生の周りには多くの参加者が次々と意見を求めて訪れました。小池先生には急なお願いで特別講演をお引き受けいただき、また非常に素晴らしいご講演を賜り、実行委員会一同感謝に耐えません。なお、小池先生がアップロードされた講義ビデオが YouTube (Atsushi Koike で検索すると表示される) に掲載されているので、ご興味がある方は是非視聴されたい。

(鈴木 洋)



図 3-1 小池淳司先生



図 3-2 特別講演の様子

4. オーガナイズドセッション

4.1 OS1 乱流を伴う伝熱研究の進展

対流伝熱のセッションといえば、以前は乱流伝熱（熱伝達）現象に関する発表が多くを占め、シンポジウム初日から一番大きな会場のひとつで、活況を呈していたが、日本ではやや乱流伝熱研究が下火となりつつあることから、その研究を再び活性化するためと、企業の方々にも乱流熱伝達研究の重要性を理解していただくために本 OS を立ち上げた。今回のシンポジウム開催地である神戸では、初日の F 室にて午前から午後にかけての 3 セッションで基調講演 1 件、研究講演 13 件の発表があった。基調講演は、名古屋工業大学の服部博文氏による「乱流熱伝達現象のモデリングと DNS」と題した講演が行われた（図 4-1）。この講演では、乱流伝熱（熱伝達）研究に必須的な基礎事項の解説から始まり、乱流熱伝達現象を、モデリング手法を含めて数値解析するために最重要事項となる乱流スケールに対して、その最小スケールが実際ではどれくらいになるかも含めて解説がなされ、乱流熱伝達現象を数値解析する困難さが紹介された。研究講演は、部屋一杯の聴講者がいるなか、3 セッションに分けて行われた。最初のセッションは主に数値計算による研究発表が 3 件、次は機械学習と実験を含む研究発表が 5 件、最後は実験と理論、数値計算の研究発表が 5 件あり、これらの研究対象場の殆どが壁乱流であることが、乱流熱伝達研究を象徴していた。しかし、壁乱流に限らず、乱流を伴う熱（物質も含む）輸送場は多く存在し、それらの現象解析や理解は、理論構築、計測・計算技術も含めて困難を極めるため、本 OS が研究進展・現象理解の一助になれ

ば幸いである。

（服部 博文，須賀 一彦，店橋 護，中村 元，岩本 薫，服部 康男，塚原 隆裕，小田 豊）



図 4-1 基調講演の様子

4.2 OS2 熱エネルギー材料・システムのための熱・物質輸送促進

本 OS は、熱エネルギー材料や熱に関するシステムにおける伝熱促進や物質移動促進に関して議論を深めることを目的とし、趣旨説明、基調講演、一般講演 17 件の計 19 件の講演等が 2 日間にわたり行われた。まず、セッションの冒頭でオーガナイザーの加藤之貴先生（東工大）から本 OS の趣旨説明として、再生可能エネルギーを取り巻く現状と蓄熱プロセスの位置づけ、最近の取り組みなどを概説いただいた。また、基調講演として、中垣隆雄先生（早稲田大）より、「カーボンニュートラルに向けたエネルギー貯蔵システムの役割」と題するご講演をいただき、カーボンニュートラル社会実現に向けた政策、および熱利用技術・プロセスに関する現状や展望について解説いただいた。一般講演では、マイクロセル潜熱蓄熱材のペレット化技術および触媒材料への展開、気固系化学蓄熱における蓄熱材開発やシミュレーション、伝熱促進、マイクロ波による非平衡プラズマによるメタン生成、熱交換面の形状最適化、音波を利用した熱移動促進、イオン液体を利用した高真空下における冷却技術開発、磁性流体による熱スイッチの研究など、いずれも興味深い研究が報告された。総合討論の一つでは、講演者の一人である藤井祥万先生（東大）から、発表された研究の技術成熟度や、今後の社会実装に向けた課題や展望について各発表者にコメントが求められ、議論を深めるという挑戦的な取り組みがなされた。単

なる研究発表だけでなく、社会実装を見据えた議論の場として大変有意義なものとなった。最近のカーボンニュートラル実現に向けた関心の高まりを反映し、発表件数、参加者数とも増加傾向である。基調講演を行っていただいた中垣先生をはじめ、発表者の皆様、ご参加いただいた皆様に深く感謝申し上げます。

(加藤 之貴, 鹿園 直毅, 能村 貴宏,
中曾 浩一)



図 4-2 OS2 基調講演の様子

4.3 OS3 ふく射輸送とふく射性質

本 OS は日本伝熱学会特定推進研究課題「太陽光エネルギー利用における伝熱工学の新展開」のメンバーが中心となり、毎年企画している OS で、ふく射伝熱の発展に資する発表を幅広く募集している。

今回は基調講演 1 件、一般講演 9 件の計 10 件の講演があり、シンポジウム 2 日目の 5 月 30 日に発表が行われた。10 件という多くの申し込みをいただき、執筆者がオーガナイザーとなって初めて 3 セッションが組まれた。OS とは関わりないが、今回の優秀プレゼンテーション賞の受賞研究のうち、3 件がふく射に関わるものだったことも相まって、ふく射研究の盛り上がりを感じることができ、大変喜ばしい出来事だった。

今回、OS 基調講演として、JAXA 宇宙科学研究所の太刀川純孝先生に「次世代宇宙機用熱制御材料の開発とふく射特性の測定」を講演頂いた。近年、盛んとなっている宇宙開発からのふく射伝熱への要望も含め、お話をいただき、立ち見が出るほどの聴講者が集まり、大変な盛り上がりを見せた。お忙しい中、講演をお引き受け頂いた太刀川先生に誌面を借りて感謝申し上げます。

一般講演については、「ふく射」というキーワードのもと、基礎研究から応用研究、理学から工学分野まで、幅広い内容の研究が集まり、活発な議論がなされた。

セッション 1 では、相変化材料である二酸化バナジウム VO_2 によるパッシブなふく射制御に関する研究 2 件、セッション 2 では、散乱性媒体のふく射伝熱に関連した 3 件、セッション 3 では、メタマテリアルのふく射伝熱への応用に関連した 2 件の発表、多孔体太陽光集熱に関連した 2 件の発表があった。応用先にカーボンニュートラルを見据えた研究が多かったのも興味深い。



図 4-3 盛況だった総合討論の様子

本年は、伝熱学会が主催となり、ふく射の世界的研究者を招聘し、5th International Workshop on Nano-Micro Thermal Radiation (NanoRad2024) が 7 月に北海道で開催される予定であり、世界各国から多数の参加申し込みを受け、ナノテクふく射伝熱技術の社会貢献が益々期待されるステージとなっている。

(江目 宏樹, 宮崎 康次, 櫻井 篤)

4.4 OS4 化学プロセスにおける熱工学

本 OS は、化学プロセス内で生じる伝熱現象、および熱移動制御によるプロセスの効率化や新しいプロセスの提案、エネルギー有効活用、カーボンニュートラル実現に向けた研究開発など、幅広く議論する場として開催された。趣旨説明、基調講演 2 件、一般講演 8 件の発表がなされた。まずセッション冒頭で中曾 (岡山大) より趣旨説明をおこない、続いて塚原保徳先生 (マイクロ波化学 (株)) より「マイクロ波化学プロセスのグローバルスタンダード化」と題する基調講演を行っていただいた。マイク

ロ波による加熱原理の基礎を解説いただき、マイクロ波化学プロセスのスケールアップのための研究開発事例などをご紹介いただいた。また、もう1件の基調講演として、菅原武先生(大阪大)から、「エネルギー貯蔵媒体としてのクラスレートハイドレート」と題する基調講演を行っていただいた。クラスレートハイドレートの基礎についてご説明いただき、クラスレートハイドレートの特徴を活かしたエネルギー貯蔵媒体および輸送媒体としての検討例のほか、クラスレートハイドレート研究の今後の展望などを丁寧に解説いただいた。一般講演では、マイクロ波加熱に関する無次元数の提案、輻射ヒーターによる加熱の効率化に関する研究、化学蓄熱材の開発、太陽光を利用したCO₂分解反応技術検討、鉄鋼スラグ中のCaO分離回収に関する検討、火災を利用した複合触媒粒子合成の研究、プラスチックフィルム加熱融着の熱解析、3Dプリンターで作製したヒートパイプ開発のための沸騰熱伝達特性に関する研究発表がなされ、いずれも興味深い研究報告であった。シンポジウム最終日にもかかわらず、参加者も多く活発な議論が交わされ、幅広い分野の研究者が集まる大変有意義な機会となった。基調講演を行っていただいた塚原先生、菅原先生をはじめ、発表者の皆様、ご参加いただいた皆様に深く感謝申し上げます。

(中曾 浩一, 春木 将司, 小糸 康志,
松川 嘉也)



図 4-4 OS4 基調講演の様子 (菅原 武先生)

4.5 OS5 水素・燃料電池・二次電池

本オーガナイズドセッションは、水素関連技術から燃料電池、電解、二次電池などエネルギー変換デ

バイスに関する様々なトピックまで広くカバーしており、伝熱シンポジウムでは、第43回(2006年)から名称を変えながら長年継続して企画・開催されています。過去15年間の講演件数の推移を図4-5に示します。当初は、燃料電池(PEFC, SOFC)関係の話題が多くを占めていましたが、近年では、二次電池(リチウムイオン電池、金属空気電池、全固体電池、レドックス・フロー電池)や電解(PEMEC, SOEC)に関する講演が増加傾向にあり、基調講演を含め35件以上の研究発表が3日間にわたり活発に行われています。また、大学関係者のみならず企業の方にご参加いただいているのも特徴として挙げられます。

今回は、国際ワークショップ(IWSEC)と連携して開催する運びとなり、期間はIWSEC後の1.5日(2日目午後~3日目)に短縮されましたが、19件のご講演をいただき盛会に開催されました(図4-6)。講演の内容は、水素の貯蔵・生成、燃料電池、水電解、二次電池、全固体電池における反応輸送現象の計測解析、各種セルの性能評価など多岐にわたっており、触媒層や多孔質電極におけるマイクロ現象からデバイスやシステムに至るマルチスケールな視点で様々な取り組みが報告され、白熱した議論が繰り広げられました。セッションにご参加いただいた講演者、関係者の皆様には厚く御礼申し上げます。次回も多数のご発表をお待ちしております。

(西田 耕介, 荒木 拓人, 伊藤 衡平, 岩井 裕,
田部 豊, 津島 将司, 徳増 崇)

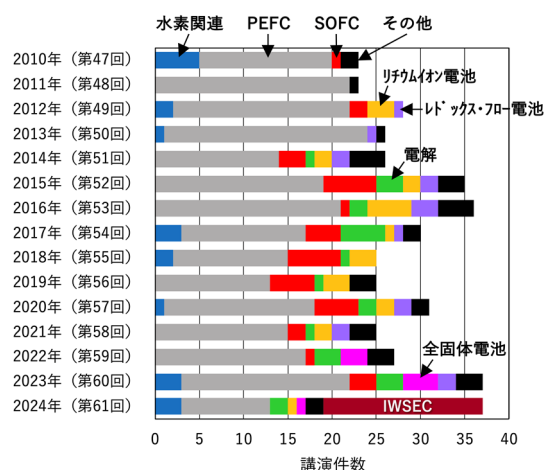


図 4-5 水素・燃料電池・二次電池 OS における講演件数の推移



図 4-6 講演会場の様子

4.6 OS6 液滴・濡れ現象の制御と理解

今年で 3 年目を迎える伝熱シンポジウムのオーガナイズドセッション「Control and Understanding of Droplet and Wetting Phenomena (液滴・濡れ現象の制御と理解)」は、今回初めて全体を通して英語で実施された。この OS の目的は、さまざまな工業的・科学的応用において重要な役割を果たす液滴の挙動と濡れ現象の理解と制御における最新の研究を議論することである。2 日間にわたって 21 名の研究者による発表が行われ、常に満席の聴衆を集めるとともに活発な議論が交わされた。また、今年は 3 名の基調講演者が登壇し、OS がさらに充実したものとなった。



図 4-7 Zuankai Wang 教授（香港理工大学）による基調講演

1 件目は 2024 年度の抜山記念国際賞を受賞した香港理工大学の Zuankai Wang 教授より、ライデンフロスト効果に関する興味深い研究結果を紹介いただいた。濡れ性、粗さ、多孔性などの表面構造特性を操作することで、ライデンフロスト温度を 1000°C 以上に上昇させることに成功した成果など

が披露された。このブレイクスルーは液体による冷却効率を高めるだけでなく、水やエネルギーハーベスティングへの応用に新たな道を開くものであり、出席者の中で大きな関心を集め、議論が交わされた。

2 件目は北海道大学の村井祐一教授から、“壁流中の気液二相流パターンと壁面性状走査の効果”について講演いただいた。気泡のダイナミクスと壁面性状が熱伝達と摩擦特性をどのように大きく変化させるかに関する研究成果の紹介があり、特にミリバブルとマイクロバブルの影響や、伝熱システムの最適化におけるはっ水性コーティングと親水性コーティングの役割が議論された。

3 件目の九州大学の森昌司教授からは、沸騰現象と水の電気分解のアナロジーに着目した研究について講演いただいた。革新的なハニカム多孔質プレートを用いることで、沸騰時の限界熱流束と水電解の臨界電流密度の両方が著しく向上することが紹介された。このアプローチは効率を向上させるだけでなく、異なる熱・電気化学プロセスに同様の物理原理を適用するための貴重な洞察となっている。

さらに、大学院生やポスドクを含む多くの若手研究者によって非常に興味深い研究結果が発表され、セッションを活気づけた。

これらの素晴らしい研究発表と質の高い議論により、液滴と濡れ現象を理解・制御することの面白さや、伝熱分野でみられる様々なトピックスにおける重要性が再確認された。今回の OS により、基調講演者 3 名の研究に代表されるように、液体の濡れだけでなく、気体のダイナミクスも制御することが研究の重要な方向性であることが示された。

本 OS の参加者の方々全員とご協力頂いた皆様に感謝申し上げます。

(ムテルドゥ ティモテ, イ エリム, 田川義之, 山田寛, 塩見淳一郎)

4.7 OS7 燃焼伝熱研究の最前線

伝熱に関する研究分野の一つである燃焼工学分野の学術的交流を促進することを目的とし、例年、燃焼工学に関する OS「燃焼伝熱研究の最前線」を開催している。今回、講演を募集したところ、内燃機関、アンモニア燃焼、燃焼制御技術、燃焼計測技術、数値解析手法、燃焼安全など幅広い研究トピックスに関する計 18 件の講演申し込みがあった。これらを 5 つのセッションに分けて 2 日間（5 月 29

日、30日)に渡って実施した。当日は多くの方にご参加いただき、質疑応答や自由討論なども活発に繰り広げられ、盛況のうちに終えることができた。ご参加いただいた皆様に厚く御礼申し上げます。次回も多数のご発表とご参加を心よりお待ちしております。

(勝身 俊之, 佐藤 大輔, 鈴木 雄二, 店橋 護)



図 4-8 会場の様子

4.8 OS8 バイオ伝熱

本 OS は伝熱学会の研究会「細胞内熱ダイナミクス研究会」の活動の一環として開催した。この研究会は、異分野との交流による伝熱分野の課題開拓を目的とした特定推進研究委員会の研究課題「細胞内における熱・物理的環境」の活動終了後に設立され、バイオに関わる伝熱分野の課題の持続的な探索、およびそのための伝熱学会員と生命科学・医学分野の温度・熱に関わる研究者との交流窓口の役割を担っている。



図 4-9 バイオ伝熱 参加者の様子

本年度は、細胞温度生物学の第一人者である岡部弘基博士(東京大学大学院薬学系研究科)に、基調講演「単一細胞内の温度変動の発見と意義と機構」をお願いした。参加者は約 20 名で、同基調講演の他、2セッションで5件の伝熱学会員による発表があった。特に、細胞内のナノスケールの熱的变化の測定という刺激的な内容の基調講演に対して、多くの質疑があった。生物分野に所属する基調講演の講師は、当学会の質疑応答には全く付度がないことや、伝熱学会員が想像以上にバイオ(医療)に寄り添った内容の研究をしていることに、感銘を受けた様子であった。

(白樫 了, 藏田 耕作)



図 4-10 バイオ伝熱 基調講演 岡部弘基氏

5. 特別企画セッション

5.1 SS1 特定推進研究特別ワークショップ

特定推進研究企画委員会は 2012 年(平成 24 年)に設置され、社会の期待に応えるための社会的・科学技術的課題、あるいは我が国の今後の成長分野における個別先鋭的な研究課題を客観的な根拠に基づいて設定し、発信して参りました。毎年の伝熱シンポジウムにおいても、特定推進研究特別ワークショップを開催し、委員会での活動内容を紹介してきましたが、本年度は 10 年の活動の区切りとして、以下のセッションを実施いたしました(以下、敬称略)。

E141 我が国の科学技術の変遷と将来展望

— どうする伝熱工学

菱田 公一(明治大学), 藤岡 恵子(ファンクショナル・フルイッド), 小澤 守(関西大学)

E142 特定推進研究企画委員会が考えるこれからの伝熱工学の未来

「人と自然の共存社会実現のための伝熱工学」

小宮 敦樹 (東北大学)

「社会的課題に向けた科学技術と工学」

花村 克悟 (JST)

「医療, 生命科学と伝熱工学」

白樫 了 (東京大学)

本ワークショップは, 優秀プレゼンテーション賞セッションと産学連携イベントと同時刻に併催されましたが, 図 5-1 に示すように, 本ワークショップにも多くのシンポジウム出席者に参加いただき, 盛況に開催することができました。

本年度のワークショップは, 特定推進研究企画委員会の 10 年の活動をまとめるものとして, 伝熱工学および伝熱学会の将来について参加者全員で考えることを目的とした構成としました。ワークショップ前半では, 日本伝熱学会元会長 3 名による将来の伝熱工学に関するパネルディスカッションが行われました (図 5-2)。ワークショップの後半では, 特定推進研究企画委員会の現メンバーによる各人が考える伝熱工学の未来について 3 件の発表が行われました。



図 5-1 ワークショップ会場の様子



図 5-2 パネルディスカッションの様子

冒頭に, 特定推進研究企画委員会の鹿園直毅委員長より, 今回のワークショップの趣旨について説明がありました。続いて, 藤岡恵子先生よりパネルデ

ィスカッションを行うことになった経緯が説明され, 菱田公一先生より日本学術会議での経験も踏まえた日本の科学技術の変遷, および伝熱工学の将来展望についてのお話がありました。人口減や国際競争力低下といった構造変化の中で, 危機意識を持って長年染み付いた価値観を転換すべきとの問題提起がありました。小澤守先生からは, 国として強い自前技術を育てることの重要性について, 藤岡恵子先生からは要素研究から脱却して社会課題につながるシステムやプロセスまで研究をインテグレートすることの重要性などが指摘されました。参加者も含めた活発な議論が進められ, 次世代で生き残るための展望を考える有意義なパネルディスカッションとなりました。

ワークショップ後半では, まず小宮敦樹先生から, 2050 年を見据えて「時間的つながり」, 「空間的つながり」, 「ヒトと環境のつながり」の観点から今後求められる研究領域とキーワードの紹介がありました。花村克悟先生からは, 科学技術振興機構 (JST) 研究開発戦略センター (CRDS) の紹介, および熱効率 55%超の内燃機関開発グリーンイノベーション (GI) 基金事業 (NEDO) において, 高い目標設定が新しい研究開発を生むという実際の事例が紹介されました。白樫了先生からは, 医療応用と生命科学の概要の説明とともに, 伝熱工学が寄与できる領域を紹介いただきました。

本ワークショップにご参加いただきました皆様に, 特定推進研究企画委員会として御礼を申し上げます。

(鹿園 直毅, 田部 豊)

5.2 SS2 公開セッション「人と熱の関わりの足跡 (その 7)」

第 61 回日本伝熱シンポジウムの 2 日目午後のこのセッションは「研究会“熱事象の科学知・技術知” (主査 大久保英敏)」が企画した人と熱の関わりの足跡をたどることを目的としたもので, 通算 7 回目にあたる。この一連のシリーズの公開セッションでは, 様々な熱事象を取り上げ, あわせてそれらの詳細について学会誌『伝熱』上で「ヒストリーQ」として報告してきた。今回の内容についても同じく学会誌に投稿する予定であるが, それに先立ってシンポジウム実施報告の枠組みのなかで講演の概略を取りまとめておく。

今回の公開セッションは、シンポジウム開催担当が関西支部であったことから企画内容は関西特に京阪神地区に関わるものとした。具体的には、気液二相流研究が第 2 次世界大戦終了後まもなく大阪と神戸で開始されたこと、また大阪は明治末期から産業用の中小容量ボイラ、特に丸ボイラの我が国における製造拠点であったこと、さらに関西地区には信楽焼、伊賀焼、丹波焼など多くの陶磁器製造の拠点があり、中でも京文化の中で育まれた感覚と多様性を特徴とする京焼の拠点は京都であることなどを背景（若干こじつけではあるが）として、セッションの内容を次のように決定した。

F231 “ボイラの水循環と気液二相流研究の展開”
*小澤守（関西大学）

F232 “ボイラ製造における職人技—ボイラ屋の意気込みと心意気” *木下正成（榊ヒラカワ）、小澤守（関西大学）

F233 “陶芸における熱—土変じて珠玉と成す” 村田真人（井筒屋亀水窯）、*藤岡恵子（ファンクショナル・フルイッド（*は講演者）

最初の F231 は戦後すぐに大阪大学および神戸大学を中心としてボイラの水循環研究が行われ、その基礎として気液二相流研究がスタートした。水循環研究は気液二相流の時間平均特性研究につながり、これらさらに二相流の詳細機構、統計的性質、貫流ボイラの開発に関わった動特性研究から不安定流動研究へと発展した。講演ではそれら二相流研究の展開を時系列的に概説した。

F232 の講演は、産業用ボイラ製造企業において 60 余年にわたってボイラ製造に関わってきた講演者によるもので、我が国における中小ボイラ製造の黎明期から 1950 年代に至るボイラ製造現場を紹介した内容となっている。溶接など製造技術が進化する以前のリベット接合や鍛造、穴あけ作業などものづくりに関わった職人技を概観し、ものづくりの基本を垣間見たように思う。

最後の F233 では、陶磁器製造過程、なかでも登り窯の特徴について事例を交えながら解説した。薪を用いた登り窯では薪の成分や灰が関与して複雑な窯変と呼ばれる色や質感の変化があること、長い焼成時間をかけることにより釉薬が素地に拡散して素地と釉薬の境界が広くなり、出来上がりに奥行きがでること、焼成方法としての酸化雰囲気/還元雰囲気、焼成時間、急冷/徐冷に応じて、釉薬をかけ

なくても生地成分の化学変化によってさまざまな色と質感を呈することなど、陶芸において熱を扱う多彩な手法が生み出す美術的效果を紹介した。

このセッションの様子を写真に示しておく。セッションには 50 余人の参加があった。筆者の講演が時間超過したため、残りの 2 件の講演者には迷惑をかけてしまったこと、そのため参加者からの質問など受ける時間がなくなったことなど問題なしとは言えないが、それぞれ興味深い内容となった。現在の伝熱工学・伝熱技術は過去の長期にわたる歴史に立脚しており、そのような研究や技術の流れを知ったうえで将来を展望することの重要性、さらには我々がそれと認識していない領域でも熱技術が重要な役割を果たしていることなどに対する認識が深まった 90 分間であった。

（小澤 守）



図 5-3 公開セッションの様子

5.3 SS3 企業特別セッション「関西地区企業による部品開発・技術開発の紹介」

産学交流委員会では、毎年、シンポジウム2日目午前、シンポジウム開催地区の地元企業をお招きしたセッションを企画しています。シンポジウム登録参加者だけでなく、一般の方も参加可能な公開セッションとし、シンポジウム開催地区の企業の社業、技術、取り組みを学ぶとともに、総合討論を通じて伝熱に関する新たな気づき、繋がりを得ようという趣旨で開催しています。

今年は、「関西地区企業による部品開発・技術開発」と題して、2セッションで構成し、大阪に本社を置く企業2社（うち1社は神戸にR&Dを置く企業）、地元神戸に本社を置く企業2社からご講演頂きまし

た。いずれのご講演も40～50名前後の方々に聴講頂きました（図5-4）。

講演題目等は、以下の通りです。また、講演者の集合写真を図5-5に示します。ご講演者の皆様には、快くご講演をお引き受け頂き、深く感謝申し上げます。



図5-4 企業特別セッション会場の様子



図5-5 講演者との集合写真

（左から、日本カノマックス 塩崎様，エスペック 田中様，バンドー化学 高原様，及川様，旭光電機 和田様，本セッション主担当 西，小泉）

- (1) 「環境試験分野における伝熱技術の活用」
エスペック株式会社 事業開発部 部長
田中 浩和 氏
- (2) 「点計測からハイスピード立体計測へー高速演算，リアルタイム処理可能な熱・流体計測技術のご紹介ー」
日本カノマックス株式会社 流体計測事業部
ディヴィジョンマネージャー 塩崎 康弘 氏
- (3) 「バンドー化学における熱マネジメント製品開発」
バンドー化学株式会社 新事業推進センター
イノベーション推進室長 及川 征大 氏

営業部電子資材第一営業グループ長
高原 雄介 氏

- (4) 「熱情報と熱電発電のIoT事例」
旭光電機株式会社 代表取締役社長
和田 貴志 氏
（西 剛伺，小泉 雄大）

5.4 SS4 モノづくりセッション

産学交流委員会では、シンポジウム初日夕刻に、モノづくりセッションを企画し、運営させて頂きました。昨年まで実施されていた産学交流ポスターに代わる、産学交流の活性化を目的とした新たな試みです。

冒頭の趣旨説明では、まず本学会の企業会員の現況について説明がなされました。現在、企業所属の正会員数は、正会員全体の44%を占めますが、企業所属の正会員によるシンポジウムでの講演数は全体の10%前後（前回の福岡開催では7%、今回の神戸開催では13%）に過ぎません（図5-6）。そこで、企業所属の研究者、技術者にとって、講演しやすい、もしくは講演したくなるセッションを目指し、本セッションを企画しました。研究そのものは、一般セッションもしくはOSでご発表頂き、それ以外の熱に関わる各社の社業や取り組みについて、本セッションでご紹介頂くという趣旨です。



図5-6 セッション趣旨説明の様子

初めての試みではありましたが、多くの企業にご賛同頂き、3つのセッション計14社の発表で構成しました（表5-1）。本セッションは優秀プレゼンテーション賞セッション、特定推進研究特別ワークショップと同時刻に併催されましたが、会場は非常に活況で、いずれのセッションも90名前後のご参加

を頂くことができました (図 5-7)。発表内容は多種多様で、さまざまな熱関連技術が、さまざまなアプリケーションで生かされていることを知る事ができる機会となりました。聴講者の方々にとっても、社会実装、技術の出口の観点から新たな気づき、繋がりが得られたのではないかと思います。セッション後には発表企業の皆様と産学交流委員で意見交換会を開催し、大いに盛り上がりました。

表 5-1 モノづくりセッション発表企業一覧
(発表順)

| 企業名 | 題目 |
|-----------------|------------------------------------|
| シーメンス | ROM 技術を利用した熱解析モデルの企業間共有 |
| 日本製鉄 | 熱処理プロセスの数値解析モデルの開発 |
| デンソー | 制御用コンピュータに必要な半導体の伝熱解析モデル |
| 日立製作所 | データ駆動モデリング技術の開発 |
| 東京電力ホールディングス | 空間サーモグラフィを用いた乾燥工程のデジタルトランスフォーメーション |
| ベテル | 新規熱伝導材料に最適な多機能熱拡散率測定装置の開発 |
| 東亜電気工業 | サーバールームの熱問題に対応した RDHx 導入のご提案 |
| 富士高分子工業 | FUJIPOLY が提供する熱伝導性複合材料の紹介 |
| 日本ガイシ | 選択波長赤外線による新規プロセスの構築 |
| スタンレー電気 | UV-C LED 水除菌リアクターの熱設計技術 |
| Wave Technology | (株)Wave Technology における熱設計の取り組み |
| KOA | 電子機器における熱設計コンセプトの変化と電子部品メーカーの提案 |
| レゾナック | レゾナックの熱マネジメントソリューションのご紹介 |
| WELCON | マイクロチャネル構造を適用した高性能熱交換器 |

来年のシンポジウムでも、同様のセッションを企画予定ですので、ご興味をお持ちの企業の方は発表をご検討頂ければ幸いです。

(近藤 義広, 西 剛伺)



図 5-7 モノづくりセッション会場の様子

6. 優秀プレゼンテーション賞セッション

優秀プレゼンテーション賞 (Best Presentation Award: BPA) セッションは、伝熱シンポジウムの付帯イベントとして例年シンポジウムの初日にポスター形式で開催しております。28 歳以下の若手研究者や学生会員が伝熱シンポジウム参加者に自身の研究を紹介し、時間をかけた議論と発表技術に磨きをかける場を提供するセッションとして位置づけており、学生会委員会と現地実行委員会により企画・運営されております。過去を遡りますと、平成 15 年 (2003 年) 5 月に広島国際会議場で開催されました第 40 回日本伝熱シンポジウムにて初めて「学生プレゼンテーション賞セッション」(第 41 回より現在の「優秀プレゼンテーション賞セッション」に改称) がプログラムされており、ここから数えて本年度は 22 回目の開催となります。

本年度の優秀プレゼンテーション賞セッションは、昨年(第 60 回)伝熱シンポ(福岡)同様、完全対面開催となりました。特に今回は、現地の実行委員会、および会場となった神戸国際会議場の多大なご協力をいただきまして、図 6-1 に示すような盛んなセッションとなりました。なお今回より、BPA がすでに伝熱シンポ参加者に十分認知されている点を考慮し、アピールスライドの実施を取りやめの実施としております。

会場では、工夫を凝らしたポスターの数々が展示され、中には iPad を利用した動画を含んだプレゼンテーションも見られました。会場では、大学の先生や企業の研究者からの質問だけではなく、発表の学生同士での質問や討議が活発に行われておりました。講演申込数は 54 件で、そのうち 1 件は事前にキャンセルの申し出があったことから、今回は 53 件が審査対象となりました。この件数は、ここ

12 年間の中では最高の件数であります。今回も 1 発表につき 5 名の審査員による厳正の審査の結果、BPA08 高橋 諒旭 (京都大), BPA10 高橋 匠 (山形大), BPA14 ランザトゥソン メッシー (九州大), BPA27 畑中 健太 (九州工大), BPA32 王 曉晗 (東工大), BPA43 川合 晃生 (東京大), BPA52 高木 松誠 (東北大) (敬称略, 発表番号順) の 7 名が優秀プレゼンテーション賞を受賞しました。(本誌の「優秀プレゼンテーション賞 受賞者」の記事もご覧ください。) 受賞者 7 名は、シンポジウム 2 日目の総会時に受賞の紹介と賞状の授与がシンポジウム実行委員長の神戸大学 鈴木洋 先生から行われると、記念撮影が行われました (図 6-2)。

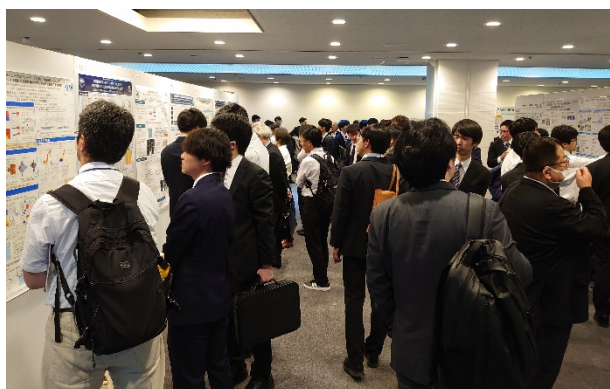


図 6-1 BPA セッション会場の様子



図 6-2 鈴木実行委員長との記念撮影

最後になりましたが、本セッションを開催するにあたり、優秀プレゼンテーション賞の審査員の先生方、名古屋大学 上野藍 先生学生会委員会幹事をはじめとする学生会委員会委員の先生方、伝熱シンポジウム実行委員会の先生方に大変お世話になりました。この場をお借りして篤く御礼を申し上げます。(春木 直人)

7. 一般セッション

一般セッションでは合計 145 件のご発表を頂戴しました。講演会場の様子を図 7-1 に、セッションの内訳を表 7-1 に示します。

また、今回から一般セッションに編集委員会委員を設置することとなり、実行委員会の負荷軽減とプログラム編成を円滑に進めることができました。表 7-2 に委員のお名前 (敬称略) を記載させていただきます。

皆様の温かいご支援により、一般セッションを無事終えることができましたこと心よりお礼申し上げます。

(木村 文義)



図 7-1 一般セッション会場の様子

表 7-1 一般セッションの内訳

| | |
|----------------------------------------------------|----|
| 沸騰・凝縮 (Boiling and condensation) | 30 |
| 電子機器の冷却 (Cooling of electronic equipment) | 21 |
| 強制対流 (Forced convection) | 9 |
| ヒートパイプ (Heat pipe) | 6 |
| 多孔質内の伝熱 (Heat transfer in the porous media) | 4 |
| 物質移動 (Mass transfer) | 4 |
| 計測技術 (Measurement technology) | 6 |
| 融解・凝固 (Melting and solidification) | 11 |
| 分子動力学 (Molecular dynamics) | 14 |
| 混相流 (Multiphase flow) | 3 |
| 自然対流 (Natural convection) | 5 |
| 自然エネルギー (Natural energy) | 4 |
| 空調・熱機器 (Air conditioning and Thermal equipment) | 7 |
| 熱物性 (Thermophysical properties) | 3 |
| ナノ・マイクロ伝熱 (Nano and micro heat transfer) | 18 |

表 7-2 一般セッション編集委員会委員

| | |
|-----------|----------------|
| 沸騰・凝縮 | 梅川 尚嗣 (関西大) |
| 電子機器の冷却 | 河南 治 (兵庫県立大) |
| 強制対流 | 稲岡 恭二 (同志社大) |
| ヒートパイプ | 杉本 勝美 (神戸大) |
| 多孔質内の伝熱 | 桑田 祐丞 (大阪公立大) |
| 物質移動 | 堀江 孝史 (大阪公立大) |
| 計測技術 | 栗山 怜子 (京都大) |
| 融解・凝固 | 岡野 泰則 (大阪大) |
| 分子動力学 | 芝原 正彦 (大阪大) |
| 混相流 | 塩見 洋一 (龍谷大) |
| 自然対流 | 金田 昌之 (大阪公立大) |
| 自然エネルギー | 松本 亮介 (関西大) |
| 空調・熱機器 | 浅野 等 (神戸大) |
| 熱物性 | 木下 進一 (大阪公立大) |
| ナノ・マイクロ伝熱 | 巽 和也 (京都工芸繊維大) |
| 熱音響 | 田中 誠一 (明石高専) |

8. 機器展示・広告

機器展示・カタログ展示・プログラム冊子への広告掲載を募集し、多くの企業から申し込みを頂きました。以下にご協力頂いた企業をご紹介します(敬称略)。

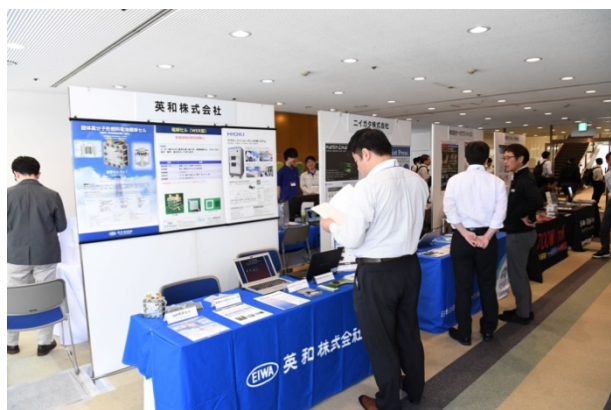


図 8-1 機器展示の様子

【機器展示】

英和株式会社, ニイガタ株式会社, 株式会社サーモグラフィティクス, 西華デジタルイメージ株式会社, サイエンスエッジ株式会社, 九州計測器株式会社, 株式会社テクトロニクス&フルーク, 日本カノマックス株式会社, ダンテック・ダイナミクス株式会社, 株式会社フォトロン, 株式会社 JSOL JMAG ビジネスカンパニー

【カタログ展示】

株式会社ベテル

【広告】

大阪ガス株式会社, 川崎重工業株式会社

【協賛】

華為技術日本株式会社

(菰田 悦之, 河南 治)

9. 意見交換会

意見交換会は、本シンポジウム 2 日目の 18 時 15 分から 20 時 15 分まで、講演会場に隣接する「神戸ポートピアホテル」の大輪田の間で開催されました。直前まで当日参加を受け付けることもあり、参加人数の増減にも対応が容易な立食ビュッフェ形式で意見交換会を実施しました。関西地区が前回担当した 2016 年の第 53 回日本伝熱シンポジウムでは、国の重要文化財である大阪市中央公会堂で実施したこともあり、火気使用の制限があるなど各種手配が大変だった記憶がありますが、今回はホテル宴会場での開催であり、事前の打ち合わせから当日の運営まで大変スムーズに行うことができました。

会場としては合計で 1343 m²になる二間を貸し切り、270 名程度の参加者を想定した料理とフリードリンクを準備しました。また日本三大酒処の灘を擁する神戸での開催ということで、地元で人気の酒屋に選定を依頼して兵庫、滋賀、奈良、大阪、和歌山の銘酒 15 本を実行委員会準備し、参加者の皆様にお楽しみいただきました。日本酒の前日持ち込みから適温での保管、当日サービスまで快く引き受けて頂いた神戸ポートピアホテルのご厚意に感謝する次第です。当日までに受け付けた参加者の人数は 278 名でした。意見交換会の流れとして、まず初めに集合写真の撮影を行いました(図 9-1)。撮影を担当した松本亮介氏(関西大)の掛け声もあり、参加者の皆様が良い笑顔をされているのが印象的です。会は実行委員長の鈴木洋氏(神戸大)のご挨拶からはじまり、続いて第 62 期日本伝熱学会会長の平井秀一郎氏(東工大)よりご挨拶と乾杯のご発声を頂きました。伝熱シンポジウムの参加者は食欲旺盛であることをホテル側に事前に伝えていたこともあり、途中で料理が切れることもなく会の終盤まで参加者同士の活発な交流が続きました(図 9-2)。なお、参加者同士の交流に多くの時間を費やしたいとの思いを引き継ぎ、昨年度と同様に出し物や受賞者に

よるスピーチは実施しませんでした。

閉会にあたり第 63 期日本伝熱学会会長の須賀一彦氏（大阪公大）からご挨拶と共に学会運営に対する抱負が語られました。最後に、来年度に沖縄で開催予定の第 62 回日本伝熱シンポジウムの実行委員長である店橋護氏（東工大）から開催概要についてご案内を頂き、会は終了しました。

最後になりましたが、ご参加頂いた皆様のご協力により、意見交換会を無事に終えることができましたことを心よりお礼申し上げます。

（小田 豊）



図 9-1 意見交換会での集合写真



図 9-2 歓談の様子

10. 実行委員会

実行委員は、神戸大学を中心とした関西圏の大学、伝熱学会関西支部に縁の深い企業から選出されたメンバーが担当しました。

実行委員会の新しい取り組みとして、これまでよりも伝熱学会本部事務局と業務を分担するように努めましたが、実行委員の負担は依然として大きく、今後のためにも改善が望まれます。

これまでの項目に記載のなかった実行委員の業務としては、受付や当日運営がありました。これら

の業務は参加者のご協力、アルバイト学生の協力もあり、大きな問題はなく進みました。

第 61 回日本伝熱シンポジウム実行委員会

顧問

小澤 守（関西大学）

片岡 邦夫（関西化学機械）

藤岡 恵子（ファンクショナル・フルイッド）

委員長

鈴木 洋（神戸大学）

副委員長

浅野 等（神戸大学）

芝原 正彦（大阪大学）

幹事

村川 英樹（神戸大学）

委員

朝熊 裕介（関西大学）

網 健行（関西大学）

有澤 秀則（川崎重工業）

石田 駿一（神戸大学）

今井 陽介（神戸大学）

伊與田 浩志（大阪公立大学）

梅川 尚嗣（関西大学）

大村 直人（神戸大学）

岡野 泰則（大阪大学）

小田 豊（関西大学）

金田 昌之（大阪公立大学）

河南 治（兵庫県立大学）

木下 進一（大阪公立大学）

木村 文義（兵庫県立大学）

熊野 智之（神戸市立工業高等専門学校）

栗本 遼（神戸大学）

栗山 怜子（京都大学）

桑田 祐丞（大阪公立大学）

菰田 悦之（神戸大学）

篠崎 健（三菱電機）

杉本 勝美（神戸大学）

鈴木 崇弘（大阪大学）

高垣 直尚（兵庫県立大学）

巽 和也（京都工芸繊維大学）

田中 誠一 (明石工業高等専門学校)
寺井 航 (ダイキン工業)
寺西 一浩 (積水ハウス)
西田 耕介 (京都工芸繊維大学)
羽田 哲 (三菱重工)
林 公祐 (神戸大学)
日出間 るり (名古屋大学)
廣川 智己 (兵庫県立大学)
廣津 誠 (ノーリツ)
藤澤 亮 (神戸製鋼所)
藤原 邦夫 (大阪大学)
細川 茂雄 (関西大学)
堀 司 (大阪大学)
堀江 孝史 (大阪公立大学)
増田 勇人 (大阪公立大学)
松本 亮介 (関西大学)
山口 恭平 (Hitachi 日立造船)
山口 義幸 (兵庫県立大学)
若林 努 (大阪ガス)

IWSEC2024 実行委員会

岩井 裕 (京都大学)
津島 将司 (大阪大学)

(村川 英樹, 日出間 るり)

1.1. あとがき

第 61 回日本伝熱シンポジウムは前回に引き続き、全面対面で行うことが出来ました。ご参加いただきました皆様には大変感謝しております。また現地実行委員会の方々のみならず、オーガナイ

ズドセッションや特別セッションのお世話をいただきました方々にも、大変お世話になりました。従来これらのセッションのご報告は、会誌「伝熱」にすべては記載しておりませんでした。今回、OS の紹介も兼ねて、記事の執筆をご依頼させていただきました。各オーガナイザーの方には、快くお引き受けいただき、ありがとうございます。また、今回から伝熱学会事務局の方には経理面を含めて、全面的な協力体制をとっていただきました。ご協力感謝致します。また前前回の岐阜および前回福岡でのシンポジウムをご担当いただきました先生方には、様々な点で、有益なアドバイスいただきました。大変感謝しております。また学生委員会、広報委員会、産学連携委員会、さらに企画部会の委員の皆様にも多大なご協力をいただきました。さらに一般セッションの講演プログラム作成に関しては、実行委員会以外の関西支部の先生方にもご協力いただきました。加えて今回は国際セッション (IWSEC2024) を行いましたが、中国・韓国および日本の先生にご講演をいただきました。大変貴重なご講演ありがとうございました。最後に本当に急なお願いをさせていただいたにもかかわらず、素晴らしい特別講演を賜った小池淳司先生に、深く感謝いたします。

以上のように本シンポジウムを支えてくださった皆様に感謝するとともに、今後とも素晴らしい伝熱シンポジウムが継続されることを祈念いたします。

(鈴木 洋)

優秀プレゼンテーション賞 受賞者
— 第 61 回日本伝熱シンポジウム —
Best Presentation Award
- 61st National Heat Transfer Symposium of Japan -

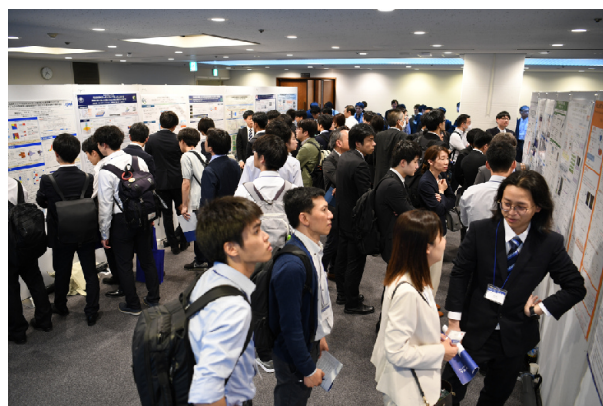
学生会委員会幹事
上野 藍 (名古屋大学)
Ai UENO (Nagoya University)
e-mail: ueno.ai.b4@f.mail.nagoya-u.ac.jp

令和 6 年 5 月 29 日に神戸市 (神戸国際会議場) で開催された日本伝熱学会総会において、第 61 回日本伝熱シンポジウム優秀プレゼンテーション賞 (Best Presentation Award: BPA) セッションで発表を行い、優秀プレゼンテーション賞を受賞された方々の表彰式が行われました。受賞者および優秀プレゼンテーション賞セッションと表彰式の様子をご紹介します。

2024 年度 受賞者

- ◆ 高橋 諒旭【京都大学】
高純度半導体型カーボンナノチューブ薄膜における励起子熱放射の計測
- ◆ 高橋 匠【山形大学】
PNIPAM ゲルを用いた自律型スペクトルスイッチングコーティングの解析による最適設計
- ◆ ランザトウソン メッシー【九州大学】
BaSO₄ スクリーン印刷塗布膜の放射スペクトル
- ◆ 畑中 健太【九州工業大学】
蛍光熱顕微鏡と干渉計を用いた三相界線における蒸発熱輸送特性の研究
- ◆ 王 曉晗【東京工業大学】
三種類の骨格異性体を発現する共有結合性有機骨格の創出
- ◆ 川合 晃生【東京大学】
短波長赤外顕微分光による氷点下水溶液中の水分子の水素結合状態と回転緩和時間の測定
- ◆ 高木 松誠【東北大学】
自然対流伝熱促進への応用を目的とした音響ストリーミング流が熱・物質伝達促進に与える影響の評価

(順不同)



BPA ポスター会場風景



鈴木実行委員長との記念撮影

今回の BPA セッションは昨年の第 60 回伝熱シンポ (福岡) 同様に完全対面開催となり過去最多となる 53 件のポスター発表がありました。審査は今年からアピールスライドが廃止され、ポスター発表 (質疑応答含む) を評価対象として行われました。

ポスター発表会場は終始盛況であり、発表者は日ごろの研究成果に対する参加者からの多岐にわたる質問に対し、様々な趣向を凝らしながら積極的な議論がなされていました。

特集「熱輸送のスペクトル学的理解」にあたって

Preface to "Thermal Science for Spectral Energy Transport"

志賀 拓磨 (産業技術総合研究所)

Takuma SHIGA (National Institute of Advanced Industrial Science and Technology, AIST)

e-mail: takuma.shiga@aist.go.jp

本特集「熱輸送のスペクトル学的理解」は、花村克悟研究総括のもと、2017年から2023年にわたって展開された科学技術振興機構 (JST) のさきがけ「熱制御のスペクトル学的理解と機能的制御 (略称：熱制御)」に基づいています。本特集では、全26名のさきがけメンバーの熱制御に関する研究の中から、「スペクトル学的理解」に関わる研究トピックを紹介します。

エネルギーハーベスティングや電子デバイスの放熱など、熱制御の需要はブロードですが、拡散性の強い熱を制御することは容易ではありません。

(私なりの解釈ではありますが) さきがけ熱制御の「スペクトル学的理解」のメッセージは、これまでに諸先輩方が培った熱輸送の理解をさらに深め、熱輸送の原理原則に立脚したロバストな熱制御メカニズムを創発せよ、ということだと考えています。そのためには、理論・数値解析、計測、観測の3つの要素を用いて、熱輸送を包括的に理解することが大切です。本特集では理論・数値解析、材料と計測、そして観測の3つのテーマにおいて、先端研究をリードする4名の先生に記事を執筆していただきました。

大阪大学の南谷英美氏からは、第一原理の枠組みで、ボルツマン輸送の描像に基づいた電子・格子相互作用によるジュール発熱の素過程を計算する手法と、その応用例としてシリコン中の電子とホールジュール発熱過程の違いを紹介いただきました。運動量およびエネルギー空間における電子 (ホール) とフォノンの散乱の知見は、今後、ますます重要となる電子デバイスの放熱にアプローチすることに役立ちます。

名古屋大学の原田俊太氏からは、酸素欠損量を調整することで面欠陥の周期配列を変化させた酸化チタン自然超格子の界面構造の完全性と、周期的な界面におけるフォノン熱輸送の波動性—粒子性クロスオーバー発現を紹介いただきました。フ

オノンの波動性を利用して熱制御を行うフォノンエンジニアリングでは、精密な構造周期制御とバルク化が重要になります。自然超格子はバルク結晶中にコヒーレントな界面を形成することが可能であり、高度なフォノンエンジニアリングにおいて有用です。

物質・材料研究機構の吉川純氏からは、電子エネルギー損失分光法でフォノンを計測する手法と、異種材料界面に現れるフォノンモード観測、さらにナノメートルオーダーの局所空間の温度計測の応用を紹介いただきました。電氣的または光学的な熱物性計測手法が一般的になる中で、フォノン輸送を空間的に可視化する本技術はフォノン熱輸送を立体的に理解するために必要です。測定結果は身の回りの界面における複雑なフォノン輸送のモデリングにも役立ちます。

大阪大学の藤原邦夫氏からは、オイラー型の場の物理量として熱流束を解析・可視化する技術の解説と、固体—液体界面における熱輸送メカニズム解明への応用を紹介いただきました。時間や空間スケールが熱輸送特性のスケールと同程度になると、原子スケールで輸送量を定義し直す必要があります。構築された解析技術により得られる熱流束場の描像は固液界面の熱輸送を理解するのに有用です。

本特集号で取り上げた「スペクトル学的理解」に関わる理論・数値解析、材料合成、熱物性計測、熱輸送観測の先端研究が有機的に結びつくと、時間や空間において熱を自在に操る技術の開発につながります。このような多彩な研究が創出されたのも、ひとえに総括の花村先生をはじめ、領域アドバイザーのおかげです。

最後に4名の先生にはご多忙のところ本特集号の執筆をお引き受けいただきました。この場を借りて感謝申し上げます。

単色化電子顕微鏡を用いたフォノン計測

Phonon measurements using a monochromated electron microscope

吉川 純 (物質・材料研究機構)

Jun KIKKAWA (National Institute for Materials Science)

e-mail: kikkawa.jun@nims.go.jp

1. はじめに

熱輸送をナノメートル・スケールで制御する技術開発が重要な課題となっている。そのためには、絶縁体や半導体における熱キャリアであるフォノン（格子振動）のヘテロ界面や粒界での輸送機構をナノメートル・スケールで理解することが重要であり、フォノン輸送を計測する技術の開発も必要である。著者は JST さきがけ「熱輸送のスペクトル学的理解と機能的制御」に採択された 2018 年から、直径 nm 以下の電子プローブでフォノンを波数分解して計測する技術の開発に取り組んできた [1]。フォノンの輸送機構を理解するうえで、波数分解したフォノンの数（強度）や進行方向、振動モードなどを界面近傍で計測する必要があると考えた。具体的には、透過電子顕微鏡内で直径約 1-3 nm の単色化された電子ナノプローブを試料上で走査し、電子エネルギー損失分光（electron energy loss spectroscopy: EELS）でフォノンを計測する手法を用いる。試料を透過した電子を用いた EELS は 1940 年代に開発されたが [2]、電子顕微鏡で振動分光が報告されたのは 2014 年である [3]。10 年たった今でも、フォノンや分子振動に関して何をどこまで計測できるか、どうやって計測すれば良いか、など十分に理解されているとは言いがたい。本稿では、フォノンの輸送を計測する技術開発の観点から、装置構成や計測原理、計測例について説明する。

2. 計測装置の構成

装置の主な構成は、透過電子顕微鏡をベースとして、電子分光器（モノクロメーターと EELS 分光器）と EELS 検出器である。図 1 に装置写真と模式図を示す。通常の透過電子顕微鏡の電子銃のエネルギー広がり（半値幅）は 0.3~1 eV 程度であり、振動分光は難しい。EELS は通常、数 eV~2 keV の範囲で吸収端やプラズモン、バンド間遷

移を分光して、元素や化学結合状態、誘電特性などを評価する手法である [2]。電子銃直下にモノクロメーターを設置してエネルギー広がりを 1/30 以下にすることで、振動分光が可能になる。あとは検出時に分解能が落ちないように、検出器が高感度で低ノイズであることや、同一のエネルギーと運動量を持つ電子が検出器にヒットする位置がブレないように装置への外乱（機械振動、電磁場、電気ノイズ）を抑えることも重要である。著者が使用している装置（図 1）は最高で約 12 meV のエネルギー分解能を達成しており、実用上も約 20 meV が可能である。X 線や中性子を用いた非弾性散乱や同じ EELS でも反射型 EELS [4]と比べると、透過電子顕微鏡での EELS はエネルギー分解能の点で劣るが位置分解能が高いのが最大の利点である。

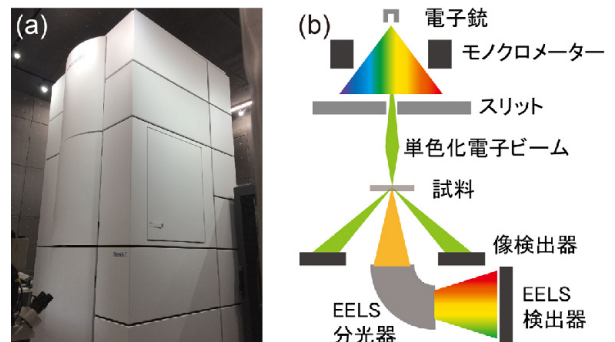


図 1 装置外観の(a)写真と(b)模式図。

3. 入射電子のフォノンによる散乱機構

3.1 計測の原理

試料に入射した電子は、フォノンを生成（励起）してエネルギーを失って（energy loss）散乱される場合に加えて、すでに熱励起されているフォノンを消滅させてエネルギーを得て（energy gain）散乱される場合があり、その割合は温度に依存する [5]。簡単のため、1 個の入射電子が 1 個のフォノンを生成または消滅して試料から出射する場合

を考える．図2に入射電子の散乱ダイアグラムを示す．1個の入射電子と1個のフォノンの間で、エネルギーと結晶運動量が保存される．入射電子のエネルギー (E_0)、散乱後の電子のエネルギー (E')、エネルギー損失量 (ΔE)、散乱ベクトル (\mathbf{q})、フォノンのエネルギー (E_{ph})、波数ベクトル (\mathbf{p}) とすると、エネルギー保存則より $E_0 - E' = \Delta E = E_{ph}$ 、結晶運動量保存則より $-\mathbf{q} = \mathbf{G} + \mathbf{p}$ となる．ここで、 \mathbf{G} は結晶の逆格子ベクトルであり、 \mathbf{p} はブリルアンゾーン内で定義される． $\Delta E = E_{ph}$ はフォノンが生成する場合は正、消滅する場合は負の値になるので、フォノン消滅はEELSスペクトルの負側で観測される．散乱ベクトル \mathbf{q} を通してフォノンの波数ベクトル \mathbf{p} がわかるので、EELSの \mathbf{q} 依存性を計測すれば、フォノンのエネルギーと波数ベクトルの関係（分散関係）を測定できる [6]．実際に透過電子顕微鏡で測ることができるのは、電子の入射方位に対して垂直方向の \mathbf{q} 成分 (\mathbf{q}_\perp) 依存性である．垂直成分についての結晶運動量保存則は、 $-\mathbf{q}_\perp = \mathbf{G}_\perp + \mathbf{p}_\perp$ と書け、つまり測ることのできるフォノンの波数ベクトルは垂直成分 (\mathbf{p}_\perp) である．このとき、 \mathbf{G}_\perp は二次元の逆格子ベクトルとなり、そのベクトル座標は電子回折パターンからわかる．図2では、111点を \mathbf{g} と表記している．所望の逆空間方向のフォノン計測するには、入射電子方位に対して試料を傾斜する．

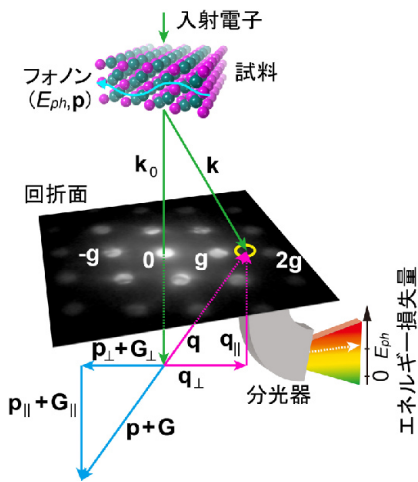


図2 EELSによるフォノン計測の原理.

典型的なフォノンの寿命はピコ (10^{-12}) 秒であり、入射電子ビームの電流密度が小さいときは、1個の入射電子がフォノンを生成して次の入射電子が来るまで (数ピコアンペアで 10^{-8} 秒) にはフォ

ノンは緩和している．この場合、入射電子によるフォノン生成のみによってフォノンの数が増える、つまり試料温度が上昇することはないと考えられる．通常のEELSの実践的な時間分解能はミリ秒であり、平衡系のフォノン計測していることになる．フォノンの生成や輸送、消滅、電子系との相互作用などのダイナミクスを捉えるにはフェムト秒の時間分解能が必要になる．ミリ秒では動的過程は捉えられないが、非弾性散乱電子を通してフォノンの生成・消滅を数え上げることはできる．

3.2 散乱機構：双極子散乱と衝突散乱

図3に示すように、入射電子のフォノン生成・消滅を伴う散乱機構は、双極子散乱 (dipole scattering) と衝突散乱 (impact scattering) に分類できる [4]．双極子散乱は、電気双極子場の生成・消滅、すなわち光学フォノンの生成・消滅を伴い、入射電子の散乱角度がゼロ (\mathbf{q}_\perp がゼロ) において微分散乱断面積 (=EELS強度) が大きくなる．このとき、生成・消滅するフォノンの波数ベクトルはゼロ、波長は無限に長い (長波長極限)．電気双極子場の変動は、異種原子間に電荷の偏りを持つ極性材料で生じやすく、双極子散乱の微分散乱断面積は非極性材料に比べて極性材料で著しく大きくなる．本稿では、ダイヤモンド (非極性) と立方晶窒化ホウ素 (c-BN) (極性) を例に紹介する [1]．両結晶ともに、縦波音響 (longitudinal acoustic: LA)、横波音響 (transverse acoustic: TA)、縦波光学 (longitudinal optical: LO)、横波光学 (transverse optical: TO) の4つの振動モードを持つ．ダイヤモンドとc-BNは、結晶構造や熱伝導率、硬度など良く似た物性を持つが、ダイヤモンド

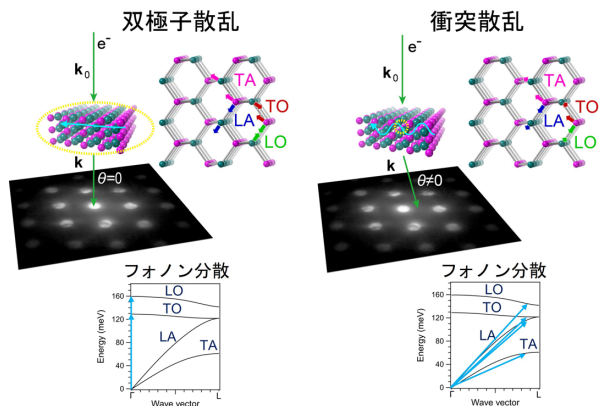


図3 入射電子とフォノンの散乱機構.

ドは極性が無いのに対して c-BN は極性がある点で異なる。したがって、フォノン分散曲線も似ているが、極性のある c-BN では TO と LO モードのエネルギー差が大きくなる [7,8]。図 4 は、電子プローブ条件 (加速電圧, 電流密度, 収束角), 検出条件 (取り込み角, 露光時間), 試料条件 (厚さ, 結晶方位) 等の条件を揃えて両単結晶から EELS を比較したものである。 $q_{\perp} \sim 0$ (Γ 点) の条件では、ダイヤモンドでは光学フォノンが視認できないのに対して、c-BN では鋭いピークとなって観測される。c-BN では、単位胞内の B 原子と N 原子の逆方向運動によって生じる大きな分極場が入射電子と強く相互作用することを示している。

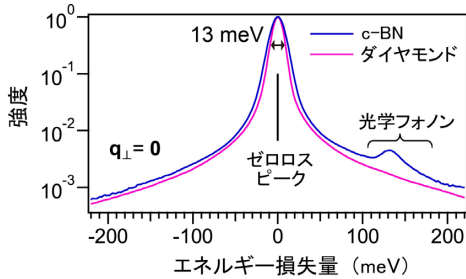


図 4 双極子散乱による光学フォノン生成の EELS 強度の比較.

一方、衝突散乱は、原子核と内殻電子から成るイオン芯によるクーロン散乱であり、入射電子の散乱角度は有限の値となる。このとき、生成・消滅するフォノンの波数ベクトル垂直成分は $p_{\perp} = -q_{\perp} - G_{\perp}$ で、その波長は双極子散乱と違って短くなる。衝突散乱は、短波長の光学フォノンに加えて、音響フォノンを生成・消滅する。衝突散乱では、極性の有無は重要でなくその微分散乱断面積 (=EELS 強度) はダイヤモンドと c-BN で同程度となる。EELS で計測したフォノン生成の微分散乱断面積は各モード (TA, LA, TO, LO) で総和すると、ともに $\sim 10^{-5} \text{ nm}^2$ の大きさであった [1]。双極子散乱の微分散乱断面積は大きい ($q_{\perp} = 0$ で最大) のに対して、衝突散乱のそれは小さい。

EELS の位置分解能は、衝突散乱では電子ナノプローブ直径と同等になりうるが、双極子散乱では悪くなる [9,10]。これは前者が空間的に広がった電気双極子場とのクーロン相互作用、後者が空間的に局在しているイオン芯とのクーロン相互作用による散乱のためである (図 3)。双極子散乱は、入射電子が試料内部を通過せずに試料外部の真空

中を通過しても起こる。例えば極性を持つ試料の場合、その端から数百 nm 離れた位置を電子が通過しても光学フォノンの生成・消滅が起きる。フォノンのエネルギーが小さいほど、遠方までクーロン相互作用がはたらき、生成・消滅が起きる。

4. フォノン計測の例

4.1 分散関係の計測

エネルギーと波数ベクトルの分散関係は、散乱ベクトル依存 (運動量移送依存、もしくは角度分解) EELS によって計測できる [6]。フォノンの場合は、meV のエネルギー分解能と波数ベクトル分解能を両立させる点に難しさがある。EELS では、エネルギー分解能を高めることも波数ベクトル分解能を高めることも、ともに入射電子ビームの電流密度を小さくすることになる。そのため検出器の信号/ノイズ比を高めようと露光時間を長くすると、装置が非常に安定でない限り、1 回の露光時間内にゼロ点 (=弾性散乱ピーク, ゼロス・ピーク) が動いてしまい、エネルギー分解能が逆に悪くなる場合がある。エネルギー分解能と波数ベクトル分解能に加えて、さらに位置分解能も高めようとする、さらに電流密度を小さくすることになる。EELS でのフォノン分散計測においては、エネルギー分解能と波数ベクトル分解能、位置分解能は、計測対象に応じて最適なバランスで高め、最終的な電流密度ができるだけ大きくなるよう設定するのが望ましい。図 5(a) は、直径約 2 nm の電子プローブを用いてダイヤモンド結晶の Γ 点 \sim L 点のフォノン分散関係を計測した例である [1]。一連の EELS スペクトルは、図 2 の電子回折パターンの 1.5g (L 点) \sim 2g (Γ 点) 間の範囲における散乱ベクトル q_{\perp} 依存性を示している。図 5(a)

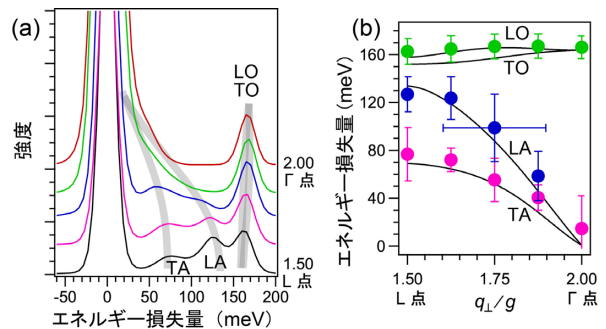


図 5 ダイヤモンド結晶の(a)散乱ベクトル依存 EELS スペクトル (RLD 処理後) と(b)フォノン分散関係のプロット (実線は理論計算 [7])。

の各スペクトルは Richardson-Lucy デコンボリューション (RLD) によって、真のスペクトルを復元したものである。TA, LA, LO+TO モードに由来する強度が q_{\perp} に依存して変化していて、これは分散関係を反映している。実際に、図 5(a) で各フォノンモードをガウス関数でフィッティングし、その位置 (E_{ph}) と $q_{\perp}(=p_{\perp})$ の関係をプロットすると、図 5(b) のような分散関係をプロットできる。理論計算による分散曲線 (実線) [7] と良く一致し、直径約 2 nm の電子プローブでバルクのフォノン分散情報が得られることがわかった。

4.2 フォノンモードの可視化

電子ナノプローブを用いた EELS の利点は、局所領域の分光や高位置分解能での分光イメージングが可能なことであり、フォノンの生成・消滅数の空間分布可視化や、粒界やヘテロ界面、点欠陥などの格子欠陥位置の振動計測が可能になる。図 6 は、c-BN 単結晶とダイヤモンド単結晶のヘテロ接合界面付近のフォノン生成数を分光イメージングしたものである [1]。具体的には、115–130 meV 域の EELS 強度分布を表示したもので、単位ピクセルあたり 70 ミリ秒間に入射電子 (プローブ電流 4.6 pA) で生成された L 点の LA+TO フォノン (c-BN) と LA フォノン (ダイヤモンド) の数を表している。c-BN では L 点で LA フォノンと TO フォノンのエネルギーが同じになるため、LA フォノンに加えて TO フォノンの数を足したものとなっている。この視野内で平均すると、70 ミリ秒間に c-BN では 4.7 ± 2.2 個、ダイヤモンドでは 3.2 ± 1.8 個のフォノンが生成されたことになる。標準偏差は大きく、実際に同じダイヤモンド内で、界面から離れたバルク単結晶とみなせる領域でも、ピクセル毎に生成数がばらついている。各ピクセルで十分に露光時間を長くすれば観測時間内のばらつきは小さくなり、フォノン数の空間的な違いを議論できるようになるといえる。

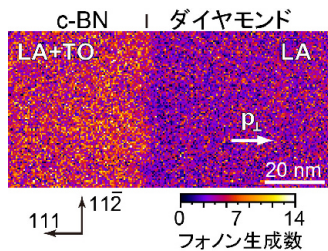


図 6 界面付近のフォノン生成数の分光イメージ。

4.3 ヘテロ界面の振動モード

粒界やヘテロ界面、格子欠陥位置では、原子配列がバルクと異なるため、バルクの格子振動とは異なる振動モードが存在する。図 7 は、図 6 の c-BN 領域からヘテロ界面を介してダイヤモンド領域にいたる L 点の EELS スペクトル変化を示している [1]。ヘテロ界面位置から両側に 5 nm 程度離れれば、バルクと同じフォノンモードになる。一方で図 7 の矢印で示すように、界面位置ではバルク結晶域とは異なる振動モードが現れている。この位置での EELS スペクトルが、単なる両バルク単結晶域で得られる EELS スペクトルの線形結合では説明できないことから、界面位置に局在した固有の振動モードであるといえる。ヘテロ界面でのフォノンの輸送を理解するうえで重要な結果である。ここでは界面垂直方向の振動を検出したが、界面平行方向には周期的な界面構造を反映したフォノン分散が存在すると予想される。このように空間的に局在した振動モードを検出できるのが、本手法の特徴である。

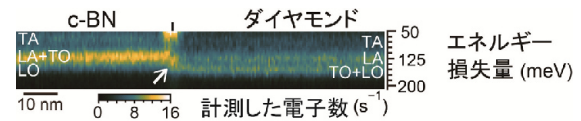


図 7 界面付近の L 点に関するフォノンモード分布。矢印は界面位置に局在した振動モードを示す。

5. フォノンの生成・消滅比を用いた温度計測

5.1 温度計測の原理と特徴

ラマン分光でストークス散乱とアンチストークス散乱の強度比から絶対温度を計測できるのと同様に、EELS で絶対温度を計測できる。計測には、電流密度が十分に小さな電子ナノプローブを用いる。すなわち、1 個 1 個の入射電子はフォノンの緩和時間よりも十分長い時間間隔で飛来して試料に入射する条件とする。熱平衡状態において、入射電子が結晶格子にエネルギーを与えてフォノンを生成する確率 (強度) I_{loss} と、逆に結晶格子が入射電子にエネルギーを与えてフォノンが消滅する強度 (確率) I_{gain} の比は、次の詳細釣り合いの式で関係づけられる [5]。

$$I_{gain}/I_{loss} = \exp(-E_{ph}/k_B T_{ph})$$

k_B はボルツマン定数、 E_{ph} はフォノンのエネルギー、 T_{ph} は温度である。電子ナノプローブ位置から得られる EELS スペクトル

から、 I_{gain} , I_{loss} , E_{ph} を評価し、温度 T_{ph} が求まる。

ラマン分光と比べて、EELS は位置分解能が高いという利点や音響フォノンを用いた温度測定も可能という特徴があるが、現状の EELS では信号／ノイズの比が小さいために温度精度はラマン分光に劣る。また同じ電子線を用いた温度評価方法として、電子回折やプラズモンに着目する方法があるが [11,12], これらは熱膨張係数などの換算変数を必要とする。一方で、フォノンを用いた温度評価方法では、詳細釣り合いの式を通して実験スペクトルのみから絶対温度を決定できる。これはダイヤモンドなどの熱膨張係数の小さな材料でも絶対温度を評価できることを意味する。

5.2 温度計測の実証

実際に、直径約 1 nm の電子ナノプローブとフォノン生成・消滅の詳細釣り合いの式を用いて、単結晶ダイヤモンドの温度計測が可能か、実証実験を行った [13]。電圧を印加して約 $10^4 \mu\text{m}^2$ 域を一樣に加熱できるセラミックス膜上に、ダイヤモンド結晶の薄片を固定した。電圧値のセラミックス膜温度（以下、公称温度と呼ぶ）への換算係数は既知で、303 K~1473 K の範囲で温度を変えながら、 Γ 点 (2g) 位置から EELS スペクトルを取得した。図 8(a)に示すように、164 meV 位置の光学 (TO+LO) フォノン励起強度 I_{loss} で規格化すると、Gain 側の光学 (TO+LO) フォノン消失強度 I_{gain} が公称温度の上昇とともに、大きくなっている。500 K を超えてから消失強度 I_{gain} が明確に現れた。図 8(b)は、公称温度を x 軸に、強度比 $I_{\text{gain}}/I_{\text{loss}}$ と詳細釣り合いの式から求まるフォノン温度 T_{ph} を y 軸にプロットしたものである。公称温度と計測したフォノン温度は、およそ $y=x$ の関係があり、直径約 1 nm の電子線プローブで局所温度計測が可能であることが実証された。ただし、500 K 以下では温度精度が悪くなった。これは、低温ほど熱励起フォノンの数が小さいため I_{gain} の信号／ノイズの比が小さくなり、 I_{gain} の積分強度の誤差が大きくなるためである。この問題は、音響フォノンを温度測定に用いることで改善できる。音響フォノンは光学フォノンよりエネルギーが小さく低温でも熱励起されるため、 I_{gain} の信号／ノイズの比が光学フォノンの場合より大きくなる。実際に TA モードを用いて、室温付近で温度精度が向上する

ことを確認した [13]。

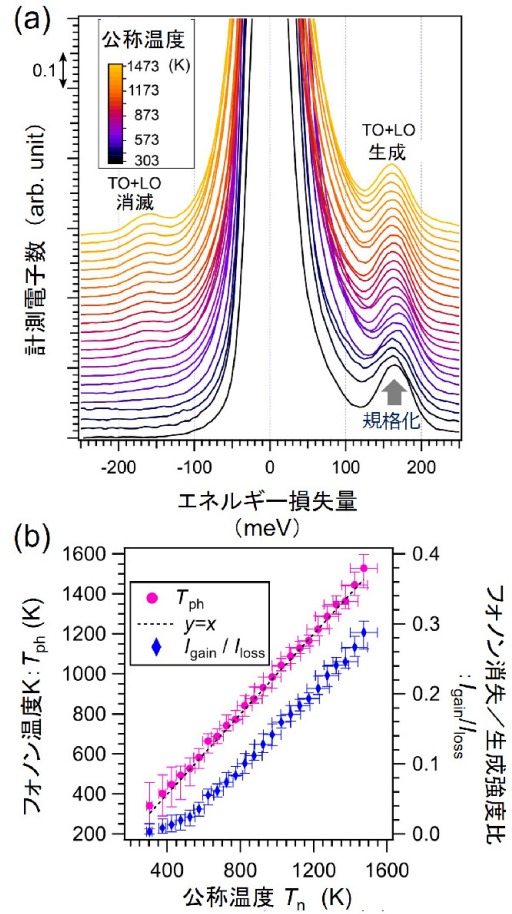


図 8 (a)フォノンの生成・消滅比を用いた温度計測の実証実験。(b)公称温度に対する強度比 $I_{\text{gain}}/I_{\text{loss}}$ とフォノン温度 T_{ph} の関係。

5.3 温度計測の応用

実際に本手法を用いて、図9(a)に示すように、ジュール加熱中のダイヤモンド・ナノワイヤの温度勾配を測定した [13]。図9(b)は、電圧20 Vをナノワイヤ両端に印加しながら図9(a)の枠線内からEELSスペクトルを取得して解析したものである。検出するフォノンの波数ベクトル域はL点 (1.5 g) を中心とした。RLD処理をしたスペクトルを、ゼロロス・ピーク (ZLP) と各フォノンモード (TA, LA, TO+LO) でGaussianフィッティングした。TAフォノンの生成と消滅、すなわち $I_{\text{TA,gain}}$ と $I_{\text{TA,loss}}$ の強度比から、温度は 613 ± 5 K と評価できた。ナノワイヤ軸に沿って同様な測定を行った結果、ナノワイヤの中心で温度が高く温度勾配が両端に向かって $\pm 0.1 \text{ K nm}^{-1}$ であり、熱流束は $10^{-7} \text{ W nm}^{-2}$ と評価できた。今後、各

計測位置（各ピクセル）での信号／ノイズの比が大きくできれば、数nmの位置分解能で温度分布を可視化できるようになる。

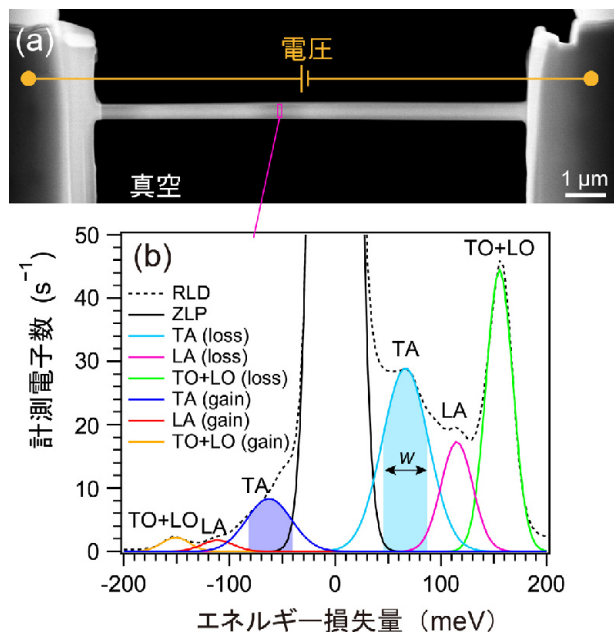


図9 (a)ダイヤモンド・ナノワイヤの電子顕微鏡像。(b)電圧20 V印加時に中央付近から取得したEELSスペクトル。

6. おわりに

本稿では、透過電子顕微鏡における EELS を利用したフォノン計測について紹介した。直径数 nm の電子ナノプローブを用いて、フォノンの分散関係や振動モードのマッピング、温度測定などができるとを示した。基本的な計測ができるようになってきたので、今後はフォノン輸送の解析につなげたい、と考えている。一方で、装置（図 1）の性能の限界や改良すべき点も見えた。将来的に、電子ナノプローブ直径 1 nm で、エネルギー分解能 1 meV 以下、エネルギー揺らぎ $\pm 1 \text{ meV}/0.1 \text{ s}$ 以下を実現できれば、より低エネルギー励起を検出できるため、種々の材料でフォノン計測が可能になると思う。

謝辞

本研究は、JST さきがけ (Grant No. JPMJPR18I4) と科研費・基盤 B (Grants No. 22H01959) の助成を受けた。特に JST さきがけでは、花村克悟先生

をはじめアドバイザーや研究者の皆様方には貴重なアドバイスを頂いた。装置仕様から導入に関して、NIMS の木本浩司 氏に諸々のアドバイスを頂いた。試料の提供と作製に関して、NIMS の谷口尚、諸永拓、諸永友美、中山佳子、下村周一 各氏にご協力頂いた。関係者の皆様方に感謝申し上げます。

参考文献

- [1] J. Kikkawa, T. Taniguchi, and K. Kimoto, *Phys. Rev. B* **104**, L201402 (2021).
- [2] R. F. Egerton, *Electron energy-loss spectroscopy in the electron microscope*, 3rd ed. (Springer, New York, 2011).
- [3] O. L. Krivanek *et al.*, *Nature* **514**, 209 (2014).
- [4] H. Ibach and D. L. Mills, *Electron Energy Loss Spectroscopy and Surface Vibrations* (Academic Press, 1982).
- [5] D. Pines and P. Nozieres, *The Theory of Quantum Liquids* (Benjamin Inc., New York, 1966).
- [6] J. Kikkawa, T. Mizoguchi, M. Arai, T. Nagai, and K. Kimoto, *Phys. Rev. B* **98**, 075103 (2018).
- [7] P. Pavone, K. Karch, O. Schütt, D. Strauch, W. Windl, P. Giannozzi, and S. Baroni, *Phys. Rev. B* **48**, 3156 (1993).
- [8] K. Karch and F. Bechstedt, *Phys. Rev. B* **56**, 7404 (1997).
- [9] K. Kimoto, in *Scanning Transmission Electron Microscopy of Nanomaterials: Basics of Imaging and Analysis*, edited by N. Tanaka (Imperial College Press, London, 2014).
- [10] C. Dwyer, T. Aoki, P. Rez, S. L. Y. Chang, T. C. Lovejoy, and O. L. Krivanek, *Phys. Rev. Lett.* **117**, 256101 (2016).
- [11] F. Niekiel, S. M. Kraschewski, J. Muller, B. Butz, and E. Spiecker, *Ultramicroscopy* **176**, 161 (2017).
- [12] M. Mecklenburg, W. A. Hubbard, E. R. White, R. Dhall, S. B. Cronin, S. Aloni, and B. C. Regan, *Science* **347**, 629 (2015).
- [13] J. Kikkawa and K. Kimoto, *Phys. Rev. B* **106**, 195431 (2022).

酸化チタン自然超格子結晶の構造と熱輸送特性

Atomic Structure and Thermal Conduction and in Titanium Oxide Natural Superlattices

原田 俊太 (名古屋大学)

Shunta HARADA (Nagoya University)

e-mail: harada.shunta.i5@f.mail.nagoya-u.ac.jp

1. はじめに

ナノスケールの周期構造によるフォノンの干渉を利用することで、フーリエの法則に従う拡散的な描像とは異なる、高度な熱輸送が期待されている[1-3]. 微細加工を利用して作製されるフォノンニック結晶や、ナノドット、ナノロッド、人工超格子など、様々なナノ構造における熱輸送特性の研究が行われているが[4-9], フォノンの干渉効果を得るためには、異なる界面で反射されたフォノンがコヒーレントである必要がある[10]. このためには、周期構造がフォノンのコヒーレンス長よりも短く、界面でフォノンが位相を保って反射されることが条件となる. したがって、室温でフォノンの干渉効果を利用したコヒーレントな熱輸送を実現するためには、原子レベルで平滑な界面をナノ~サブナノメートルスケールの周期構造で配列させることが必要となる. 人工超格子は、高い自由度で1次元のナノ周期構造を作製することが可能であるが、分子線エピタキシー (Molecular beam epitaxy: MBE) 法や、化学気相堆積 (Chemical vapor deposition: CVD) 法など非平衡な結晶成長法で作製された人工超格子において、原子レベルで平滑な界面を得ることは困難である. 最近の研究において、高度な薄膜成長技術によって作製された完全性の高い界面を有する人工超格子薄膜の熱輸送が報告されている. Ravichandran らは、MBE 法により周期の異なる SrTiO₃/CaTiO₃ 人工超格子薄膜を作製し、界面密度の増加とともに熱伝導率が減少した後に増加に転じる、"Incoherent-coherent crossover"を報告し、コヒーレントな熱輸送が顕在することを明確に示した[11]. その後もいくつかの人工超格子薄膜において、コヒーレントな熱輸送について報告はあるが[12-14], 熱は示量変数であり、コヒーレントな熱輸送を熱制御に用いる場合にはバルク材料でその機能が発現することが好ましい. そこで我々は、熱力学的安定相として自発的にナノ構造が形成する酸化チ

タン自然超格子に着目して研究を行っている.

光触媒材料としてよく知られているルチル型二酸化チタン (TiO₂) は、還元や Cr³⁺との置換などにより酸素欠陥が生じると、酸素欠損を含む面欠陥が周期的に配列する構造となる[15-19]. 面欠陥の部分では原子配列をずらした構造となるため、シア構造と呼ばれる. 酸化チタンのシア構造では、面欠陥部分の組成は Ti₂O₃ となるため、図 1 のように TiO₂ に周期的に Ti₂O₃ が挿入された構造をとることが知られている. シア構造を有する酸化チタンの化学量論組成は、Ti_nO_{2n-1} と表され、面欠陥は n 層に1層導入される. 酸素欠損量を制御することによって、面欠陥の周期を変調させることも可能である.

本稿では、面欠陥の周期配列を含む酸化チタン自然超格子の界面構造の完全性とその熱輸送特性について紹介する[20-23]. 二元系の酸化チタン自然超格子 (Ti_nO_{2n-1}) では、酸素欠損量が多くなる、すなわち n が小さくなるにつれて、金属的な電気伝導を示すようになることが知られている. 一方で、Cr

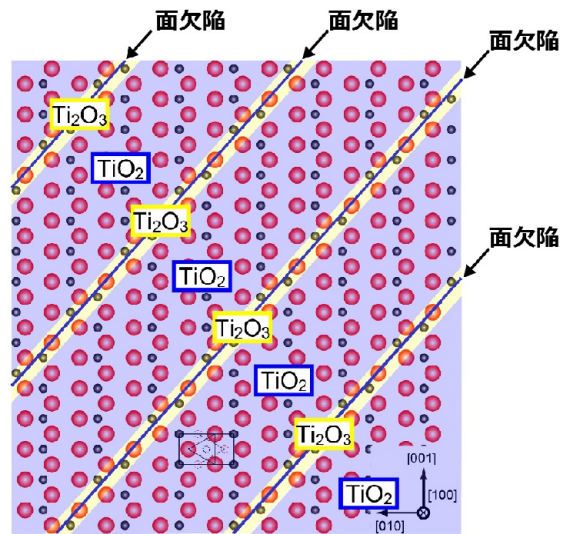


図 1 シア構造を有する酸化チタン自然超格子の原子配列の模式図.

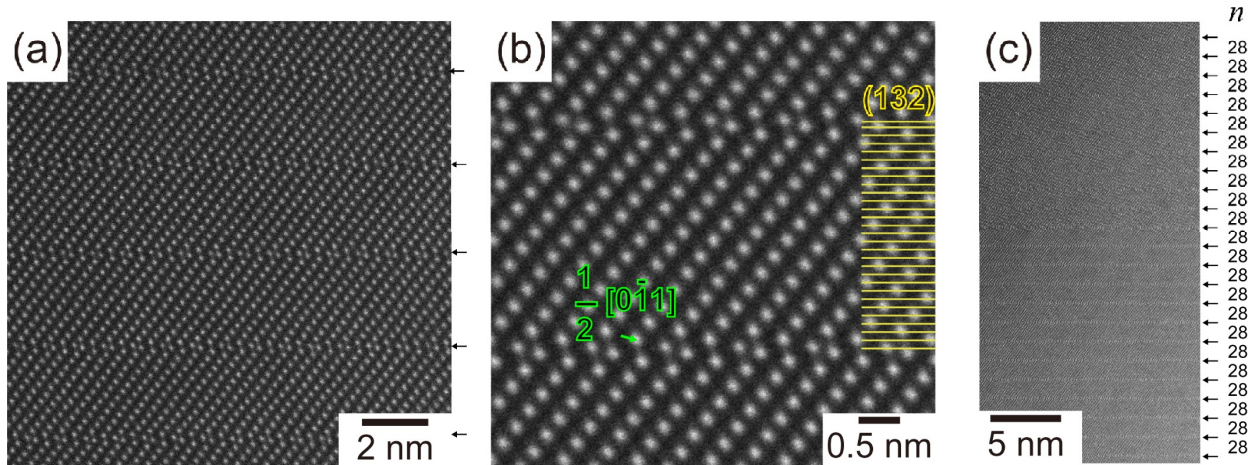


図2 ルチル型二酸化チタンの真空中での高温熱処理による還元によって作製された $\text{Ti}_n\text{O}_{2n-1}$ 結晶の広角度環状暗視野 (HAADF) 走査透過電子顕微鏡 (STEM) 像.

添加酸化チタン自然超格子 ($\text{Cr}_2\text{Ti}_{n-2}\text{O}_{2n-1}$) では、長周期の構造は熱力学的には不安定であることが知られている. このため、長い (~3 nm) 周期の構造として、電子熱伝導率が無視できるほど小さいと考えられる $\text{Ti}_n\text{O}_{2n-1}$ を、短い (~1 nm) 周期の構造として $\text{Cr}_2\text{Ti}_{n-2}\text{O}_{2n-1}$ を取り上げる.

2. 自然超格子酸化チタンの面欠陥周期配列構造

図2は、真空中での高温熱処理による還元によって作製された $\text{Ti}_n\text{O}_{2n-1}$ 結晶の広角度環状暗視野 (HAADF) 走査透過電子顕微鏡 (STEM) 像を示している. 輝点が Ti の原子コラムを表しており、Ti の配列が矢印で示した位置においてずれており、面欠陥が位置していることが分かる. 面欠陥は母構造であるルチル構造の $(132)_{\text{rutile}}$ 面に平行であり、面欠陥におけるずれの方向は $1/2[0-11]$ であることもわかる. さらに、面欠陥の間に存在する $(132)_{\text{rutile}}$ 面の数を数えることによって、 $n=28$ であることが分かり、この結晶の化学量論組成は、 $\text{Ti}_{28}\text{O}_{57}$ と決定することができる. 面欠陥の間隔は 2.9 nm であり、広い視野での観察像 (図2(c)) から、全てが $n=28$ であり周期の乱れはほとんどないことが分かる. より広い視野において、面欠陥の間隔を調べた結果、 n の標準偏差は 0.35 ($N=173$) であり、これを長さに変換すると、36 pm と極めて小さな値となった. また、界面の完全性についても、図2(a)に示した視野では、構造の乱れは観察されなかった. しかし、結晶をよく観察すると一部の視野において構造の乱れが観察された.

図3に原子コラムの配列の乱れを含む視野の HAADF-STEM 像を示す. 図3(a)の破線で囲った位置の拡大像が図3(b)であり、同一の原子位置における正常な原子配列の視野 (図3(c)) と比較すると、面欠陥上の Ti のコラムが分裂していることが分かる. 図3(b)および図3(c)における X-Y の線上の強度のプロファイル (図4) を見ても、明らかに、X-Y 間の Ti コラムの A サイトが、A サイトと B サイトに分裂していることが分かる.

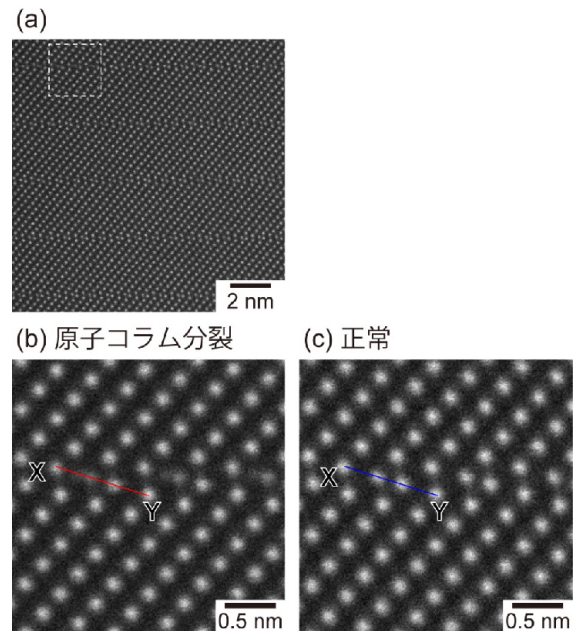


図3 原子コラムの配列の乱れを含む視野の HAADF-STEM 像. (b)は破線の部分の拡大像, (c)は正常な視野での拡大像である.

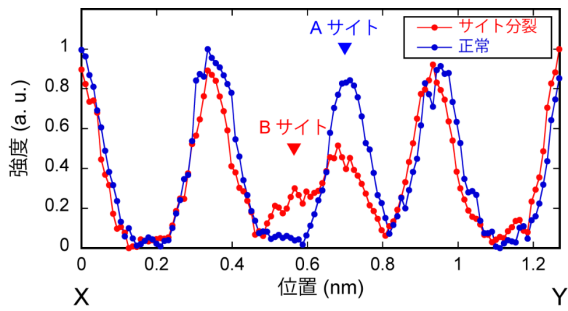


図4 図3(b)および3(c)のX-Y間の強度プロファイル。

図5のようにこれら2つのTiサイトを別々に示すことで、HAADF-STEM像においてTiサイトが分裂する原因を理解することができる。Aサイトのみを示した原子配列とBサイトのみを示した原子配列を比較すると、面欠陥の位置が(132)_{rutile}面1層分だけ異なることが分かる。HAADF-STEM法による観察は透過の観察であるため、電子線の入射方向に異なる構造が重なっている場合、サイトが分裂するように観察される。入射方向にどのように図5(b)と5(c)の構造が配置しているかは不明であるが、入射方向に面欠陥の配列の乱れが存在していることが分かる。また、広い視野で観察を行った結果から、このようにサイトの分裂を含む面欠陥の割合は表1に示すように全体の7%程度であることが分かった。

次に、HAADF-STEM像による観察結果から、面欠陥の平均粗さ R_a を下記の手順で見積もった。同じジグザグ形状が繰り返される場合、最大高さ R_z と平均粗さ R_a の間には下記の関係が成り立つ[24]。

表1 サイト分裂を含む面欠陥の割合と面欠陥の平均粗さ R_a 。

| | 割合 (%) | R_a (pm) |
|-------|--------|------------|
| 正常 | 93 | 13 |
| サイト分裂 | 7 | 39 |
| 平均 | | 15 |

$$R_a = 4R_z \quad (1)$$

(132)_{rutile}の面欠陥が、(121)_{rutile}と(011)_{rutile}が交互に配列した構造になっていることから、正常な面欠陥とサイト部の分裂を含む面欠陥の R_z は、それぞれ $0.5d_{(132)}$ 、 $1.5d_{(132)}$ となる。式(1)により R_a を求め、全体における平均粗さを見積ると、15 pmと推定される。

界面のコヒーレンスは、鏡面反射パラメータ p を用いてしばしば議論される。 $p = 1$ の時に、入射フォノンはコヒーレントに反射され、 $p = 0$ では、入射フォノンが完全に散乱されることになる。鏡面反射パラメータは周波数 f の関数として下記のように表される[25]。

$$p(f) = \exp(-16\pi^2(\frac{Rf}{v})^2) \quad (2)$$

ここで、 v はフォノンの群速度、 R は二乗平均平方根粗さを表している。ここでは、界面の粗さ σ に加えて周期の乱れなども考慮に入れた実効表面粗さ R_{eff} を用いて[5]、酸化チタン自然超格子結晶の鏡面反射パラメータを見積もる。

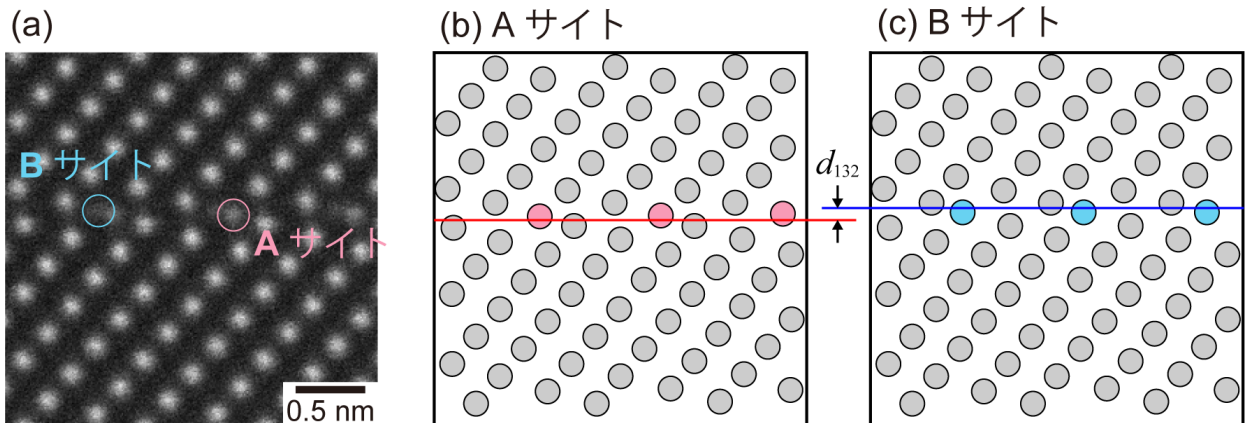


図5 (a)Ti コラムの分裂を含む視野の HAADF-STEM 像の拡大像 (図3(c)再掲) と、(b)A サイト、(c)B サイトの Ti コラムのみを模式的に示した図。(b)と(c)の原子配列は面欠陥の位置が、(132)面1層だけ異なる。

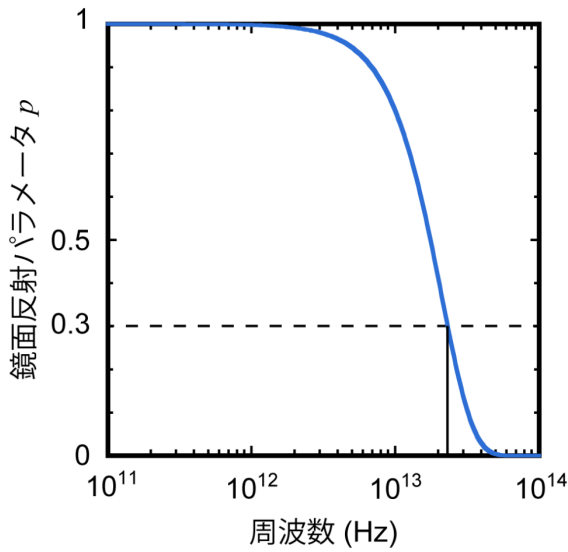


図 6 酸化チタン自然超格子の鏡面反射パラメータ.

$$R_{eff} = \sqrt{\sigma^2 + (0.5\xi)^2} \quad (3)$$

HAADF-STEM 観察の結果から $\sigma = 15$ pm, $\xi = 36$ pm と見積もられ, 式(2)と式(3)から鏡面反射パラメータを計算すると図 6 のようになる. Wagner らは, $p > 0.3$ をフォノンの干渉効果が顕在化するコヒーレント界面の基準値としており[4], この基準に従うと, 酸化チタン自然超格子における面欠陥は, 23 THz 以下のフォノンにおいてコヒーレントな界面となっていると考えられる. ルチル型二酸化チタンの振動モードは最大で 25 THz であることを考えると, 結晶中のほとんどすべてのフォノンに対してコヒーレントな界面であることが示唆される.

3. 自然超格子酸化チタンの熱輸送特性

前節で述べた通り, 自然超格子酸化チタンの面欠陥はピコスケールで平坦であり, コヒーレントな熱輸送が期待される. 本節では, コヒーレントな界面を含む自然超格子酸化チタンにおいて面欠陥の密度と熱輸送特性の関係について紹介する[22].

図 7 に面欠陥周期が 2.9 nm の二元系酸化チタン自然超格子と 0.9 nm の Cr 添加酸化チタン ($\text{Cr}_2\text{Ti}_5\text{O}_{13}$) の熱伝導率を示す. 熱伝導率の測定は, 時間領域サーモリフレクタンス (TDTR) 法によって行った. どちらの面欠陥周期の自然超格子もルチル型二酸化チタンよりも熱伝導率が低く, その低下は, 室温以下の低温において顕著であった. また, 熱伝導率の面欠陥密度依存性を見ると図 7(b)に示

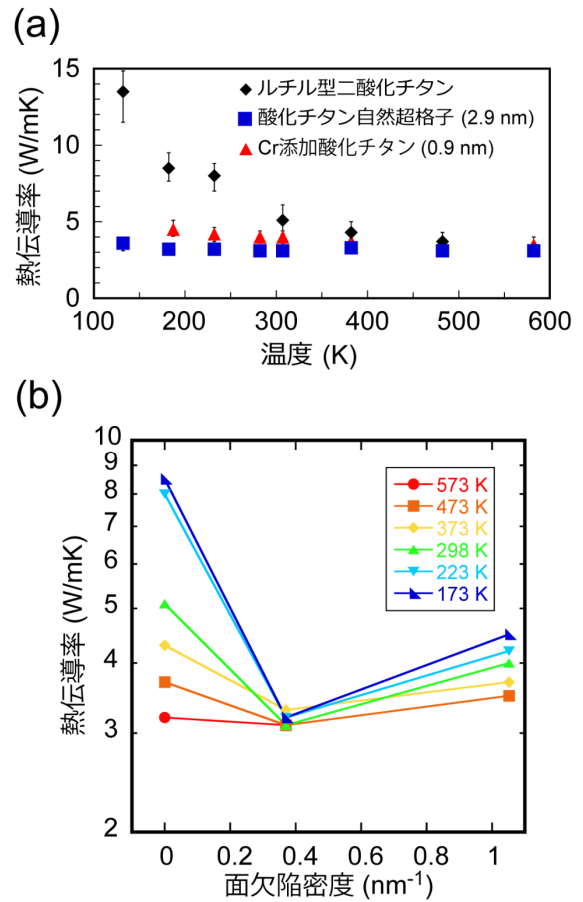


図 7 ルチル型二酸化チタン, 2.9 nm の周期で面欠陥が配列した酸化チタン自然超格子, 0.9 nm 周期で面欠陥が配列した Cr 添加酸化チタン自然超格子の熱伝導率の温度依存性. (a) 熱伝導率の温度依存性と, (b)熱伝導率の界面密度依存性.

す通り, 面欠陥の導入によって熱伝導率が低下し, 面欠陥密度の増加とともに熱伝導率が増加する, いわゆる, "Incoherent-coherent crossover"の傾向がみられる. また, この傾向は, 低温においてより顕著である. 面欠陥密度の増加に対する熱伝導率の増加は, 面欠陥においてフォノンが散乱されると考えるフォノンの拡散的な描像だけでは説明できない現象であり, 完全性の極めて高い面欠陥の周期配列によって発現する現象であると考えられる. 面欠陥がインコヒーレントな界面であり, フォノンが散乱される場合, 熱伝導率は面欠陥密度の増加とともに減少する. 一方, 面欠陥がコヒーレントな界面である場合には, ブリルアンゾーンの折り返し (ゾーンフォールディング) によって, フォノンバンドギャップ

が導入され、群速度が低減し熱伝導率が減少する。ゾーンフォールディングの効果は、面欠陥の周期が長いほど大きくなるため、面欠陥密度の増加とともに、熱伝導率は増加すると考えられる。実際の結晶中では、これら二つの現象が同時に起こり、面欠陥の完全性が高いと、ゾーンフォールディングの効果が顕在化する。この場合、面欠陥の周期が短いとゾーンフォールディングの効果が表れ、“Incoherent-coherent crossover”の傾向が観察されることになる。また、高温になるほど、熱伝導率の面欠陥密度依存性は小さくなり、573 K ではほぼ一定の値となっているが、これは、温度の増加とともに、フォノン・フォノン散乱の頻度が上がった結果、フォノンの自由行程距離が短くなり、ゾーンフォールディングの効果があらわれなくなったためだと考えられる。実際に、ルチル型二酸化チタンの平均自由行程距離を、熱伝導率と比熱、音速から見積もると、173 K では 3.9 nm と面欠陥周期よりも長いのに対して、573 K では 0.7 nm と面欠陥の周期よりも短くなっている。

4. まとめと今後の展望

自然超格子酸化チタンの面欠陥は、透過電子顕微鏡法による原子構造解析の結果から極めて高い完全性を有することが明らかとなった。また、熱輸送特性の測定結果も、コヒーレントな界面であることが明らかとなっている。本稿では詳細について述べなかったが、Debye-Callaway モデルを用いた熱輸送特性の解析から、面欠陥の界面粗さを見積もったところ、電子顕微鏡の観察結果とよく一致する結果であることが明らかとなっており、シア構造による面欠陥のコヒーレンスは、電子顕微鏡での観察から見積もることができることが示唆されている[23]。

また、最近の研究において、酸化チタンの面欠陥配列は、結晶成長後の熱処理条件によってその規則性をある程度制御することができることが分かっており、例えば、面欠陥を不規則に配列させることも可能である。コヒーレントな界面が不規則に配列すると、フォノンのアンダーソン局在によって熱伝導率が大きく低下することが示唆されており、酸化チタン結晶における面欠陥不規則配列によってフォノンのアンダーソン局在を実験的に実証できる可能性があり、現在、その研究に取り組んでいる[26]。

自然超格子は、人工超格子よりも簡単にバルク結

晶中にコヒーレントな界面を形成することが可能であり、上手く材料系を選択することによってある程度周期構造を制御することが可能である。今後の研究では、バルク結晶中において、コヒーレントフォノンによる特徴的な熱輸送現象を、自然超格子を用いて解明していくとともに、高度な熱輸送を実現する自然超格子材料の設計と実現を目指していきたいと考えている。

謝辞

本稿で紹介した研究は、科学技術振興機構さきがけ「熱輸送のスペクトル学的理解と機能的制御」(JPMJRP1818)の支援を受けて行われたものである。プロジェクト期間中には、総括の花村先生をはじめ、領域アドバイザーの先生方々や、領域メンバーの皆様と、領域会議や研究会を通して多くのディスカッションをさせて頂いたことに深く感謝いたします。

参考文献

- [1] Maldovan, M., *Nat. Mater.* 14 (2015) 667–674.
- [2] Maldovan, M., *Nature* 503 (2013) 209–217.
- [3] Nomura, M., Shiomi, J., Shiga, T., Anufriev, R., *Jpn. J. Appl. Phys.* 57 (2018) 080101.
- [4] Wagner, M.R., Graczykowski, B., Reparaz, J.S., El Sachat, A., Sledzinska, M., Alzina, F., Sotomayor Torres, C.M., *Nano Lett.* 16 (2016) 5661–5668.
- [5] Maire, J., Anufriev, R., Yanagisawa, R., Ramiere, A., Volz, S., Nomura, M., *Sci. Adv.* 3 (2017) e1700027.
- [6] Wingert, M.C., Chen, Z.C.Y., Dechaumphai, E., Moon, J., Kim, J.H., Xiang, J., Chen, R., *Nano Lett.* 11 (2011) 5507–5513.
- [7] Luckyanova, M.N., Garg, J., Esfarjani, K., Jandl, A., Bulsara, M.T., Schmidt, A.J., Minnich, A.J., Chen, S., Dresselhaus, M.S., Ren, Z., Fitzgerald, E.A., Chen, G., *Science* 338 (2012) 936–939.
- [8] Taniguchi, T., Terada, T., Komatsubara, Y., Ishibe, T., Konoike, K., Sanada, A., Naruse, N., Mera, Y., Nakamura, Y., *Nanoscale* 13 (2021) 4971–4977.
- [9] Koh, Y.K., Cao, Y., Cahill, D.G., Jena, D., *Adv. Funct. Mater.* 19 (2009) 610–615.
- [10] Chen, G., *Nat. Rev. Phys.* 3 (2021) 555–569.
- [11] Ravichandran, J., Yadav, A.K., Cheaito, R., Rossen, P.B., Soukiassian, A., Suresha, S.J., Duda, J.C., Foley, B.M., Lee, C.H., Zhu, Y., Lichtenberger, A.W.,

- Moore, J.E., Muller, D.A., Schlom, D.G., Hopkins, P.E., Majumdar, A., Ramesh, R., Zurbuchen, M.A., Nat. Mater. 13 (2014) 168–172.
- [12] Saha, B., Koh, Y.R., Feser, J.P., Sadasivam, S., Fisher, T.S., Shakouri, A., Sands, T.D., J. Appl. Phys. 121 (2017) 015109.
- [13] Choi, S., Hiroi, S., Inukai, M., Nishino, S., Sobota, R., Byeon, D., Mikami, M., Minamitani, E., Matsunami, M., Takeuchi, T., Phys. Rev. B 102 (2020) 104301.
- [14] Cho, H.J., Wu, Y., Zhang, Y., Feng, B., Mikami, M., Shin, W., Ikuhara, Y., Sheu, Y., Saito, K., Ohta, H., Adv. Mater. Interfaces 8 (2021) 2001932.
- [15] Andersson, S., Collén, B., Kuylenstierna, U., Magnéli, A., Acta Chem. Scand. 11 (1957) 1641–1652.
- [16] Andersson, S., Sundholm, A., Magnéli, A., Högberg, B., Kneip, P., Palmstierna, H., Acta Chem. Scand. 13 (1959) 989–997.
- [17] Le Page, Y., Strobel, P., J. Solid State Chem. 44 (1982) 273–281.
- [18] Kamiya, S., Yoshimura, M., Somiya, S., Mater. Res. Bull. 15 (1980) 1303–1312.
- [19] Harada, S., Tanaka, K., Inui, H., J. Appl. Phys. 108 (2010) 083703. [20] Harada, S., Kosaka, N., Tagawa, M., Ujihara, T., J. Phys. Chem. C 125 (2021) 11175–11181.
- [21] Harada, S., Sugimoto, S., Kosaka, N., Tagawa, M., Ujihara, T., J. Phys. Chem. C 125 (2021) 15730–15736.
- [22] Harada, S., Kosaka, N., Yagi, T., Sugimoto, S., Tagawa, M., Ujihara, T., Scr. Mater. 208 (2022) 114326. [23] Sugimoto, S., Kim, G., Takeuchi, T., Tagawa, M., Ujihara, T., Harada, S., J. Alloys Compd. 934 (2023) 167915.
- [24] Palasti-Kovasc, B., Sipos, S., Czifra, A., in: Proc. of International Conference on Tools (ICT-2012), 2012, pp. 237–244.
- [25] Ziman, J.M., Electrons and Phonons, Clarendon, Oxford, 1960.
- [26] Harada, S., Hattori, T., Ito, M., Sugimoto, S., Inden, M., Tagawa, M., Ujihara, T., J. Appl. Crystallogr. Accepted.

第一原理計算による電子フォノン相互作用の精密解析とジュール熱発生素過程への応用

Ab Initio Analysis of Electron-phonon Coupling and Its Application for Initial Process of Joule Heating

南谷 英美 (大阪大学 産業科学研究所)
Emi MINAMITANI (SANKEN, Osaka University)
e-mail: eminamitani@sanken.osaka-u.ac.jp

1. はじめに

絶縁体結晶中での熱輸送は主に格子振動の量子、フォノンによって担われる。このフォノン描像による熱輸送の理論は伝熱分野でも馴染み深いものである。固体における熱伝導率の理論では、非調和効果によって生じるフォノンとフォノンの相互作用が中心的な役割を果たしている。フォノンが相互作用し得るもう一つの代表的な対象が電子である。

電子とフォノンの相互作用は電気抵抗、ポーラロン形成、電荷密度波、熱電効果から超伝導に至るまで固体物理の随所にあられる最も基本的な相互作用の一つである。電子とフォノンが相互作用する仕組みは、直感的には格子が揺れることで電子が感じるイオンからのポテンシャルが変化し、その結果、電子状態が変調するという説明で理解できる。だが、それぞれの電子状態が、どのフォノンとどの程度の強さで相互作用するかを定量的に見積もることは簡単ではない。

定性的なモデルによる理解を超えて、様々な物質における電子フォノン相互作用を定量的に予測する方法が密度汎関数理論を応用した電子フォノン相互作用の計算である。近年の計算機能力や、各種パッケージの発達により、今では各フォノンモードが各電子状態と相互作用する強度を直接的に見積もることができる。

密度汎関数理論に基づく第一原理計算による電子フォノン相互作用の精密解析は、これまで主に超伝導転移温度[1]や、半導体における輸送特性の予測[2,3]に応用されてきた。伝熱分野における応用は限られているが、その一つが、著者の取り組んでいるジュール熱の発生素過程の解析である。これまでの研究[4]で、例えば Si 結晶内でのジュール熱生成過程が実は電子キャリアとホールキャリアでは異なるのではないかなど、第一原理計算による精密解析を行うことで、初めて見出された結果が得られつつある。このような解析は今後、熱の問題にミクロ

の観点から取り組む際に有用になると考えられるため、本稿では電子フォノン相互作用の第一原理計算の理論と、その応用事例として、前述のジュール熱発生素過程の研究内容を紹介する。

2. 電子フォノン相互作用に対する第一原理計算

2.1 電子フォノン相互作用

電子フォノン相互作用は、振動に伴うポテンシャルの変調が電子状態に影響を与えることで生じているが、この量子力学的効果をどのように定式化すればよいだろうか。一般に、電子系、イオン、そしてイオンの振動（フォノン）からなるハミルトニアンは

$$H = H_{ph} + H_e + H_{ei} \quad (1)$$

$$H_{ph} = \sum_{\mathbf{q}\nu} \hbar\omega_{\mathbf{q}\nu} a_{\mathbf{q}\nu}^\dagger a_{\mathbf{q}\nu} \quad (2)$$

$$H_e = \sum_i \left\{ \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m} + \frac{e^2}{2} \sum_{j \neq i} \frac{1}{r_{ij}} \right\} \quad (3)$$

$$H_{ei} = \sum_{ij} V_{ei}(\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_j) \quad (4)$$

のように定義される。ここで、 H_{ph} はフォノンのハミルトニアン、 H_e は電子系のハミルトニアン、 H_{ei} は位置 \mathbf{r}_i にある電子と位置 \mathbf{R}_j にあるイオンの間の相互作用を表すハミルトニアンである。 $a_{\mathbf{q}\nu}^\dagger$ ($a_{\mathbf{q}\nu}$)は第一ブリルアンゾーン内の波数 \mathbf{q} 、モード ν 、エネルギー $\hbar\omega_{\mathbf{q}\nu}$ のフォノンを生成・消滅する演算子である。 H_e 中の第一項は電子の運動エネルギーに対応しており、 \mathbf{p}_i は i 番目の電子が持つ運動量、 m は電子の質量に対応している。第二項は電子間の相互作用に対応しており、 e は電荷素量、 r_{ij} は電子間の距離である。

電子フォノン相互作用は、原子が動くことによって生じるポテンシャル V_{ei} の微小変化として捉える

ことができる．平衡状態での原子の座標を \mathbf{R}_j^0 として，原子の座標 \mathbf{R}_j をモード ν のフォノンによる変位 \mathbf{Q}_j^ν を用いて $\mathbf{R}_j = \mathbf{R}_j^0 + \mathbf{Q}_j^\nu$ であらわす．変位が小さいものとして，テイラー展開を行うと，

$$\begin{aligned} V_{ei}(\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_j^0 - \mathbf{Q}_j^\nu) \\ = V_{ei}(\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_j^0) - \mathbf{Q}_j^\nu \cdot \nabla V_{ei}(\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_j^0) \\ + O(Q^2) \quad (5) \end{aligned}$$

が得られる．この第二項が電子フォノン相互作用に相当する．以後， $V_{ep}^\nu(\mathbf{r}) = \mathbf{Q}_j^\nu \cdot \nabla V_{ei}(\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_j^0)$ のように表記する．

電子フォノン相互作用のハミルトニアンを H_{ph} と同様に第二量子化形式で表記するには，場の演算子を用いて，

$$H_{ep} = - \sum_{\nu} \int d\mathbf{r} \psi^\dagger(\mathbf{r}) V_{ep}^\nu(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) \quad (6)$$

とすればよい．ここで，場の演算子は

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}) &= \sum_{\mathbf{k}, \eta} c_{\mathbf{k}\eta} \phi_{\mathbf{k}\eta}(\mathbf{r}) \\ \psi^\dagger(\mathbf{r}) &= \sum_{\mathbf{k}, \eta} c_{\mathbf{k}\eta}^\dagger \phi_{\mathbf{k}\eta}^*(\mathbf{r}) \quad (7) \end{aligned}$$

で定義される． $\phi_{\mathbf{k}\eta}(\mathbf{r})$ は第一ブリルアンゾーン内の波数 \mathbf{k} を持つバンド η の電子状態のブロッホ波動関数であり， $c_{\mathbf{k}\eta}$ はその電子状態に対する消滅演算子を指す．ブロッホ波動関数は $\phi_{\mathbf{k}\eta}(\mathbf{r}) = u_{\mathbf{k}\eta} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$ で表されるものとする．

式(7)に場の演算子の定義を代入し，さらに変位 \mathbf{Q}_j^ν をフォノンの生成消滅演算子で書き換え，ポテンシャルをフーリエ変換すると，最終的に

$$\begin{aligned} H_{ep} \\ = -i \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}', \eta, \eta'} \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{G}} \int d\mathbf{r} u_{\mathbf{k}\eta'}^* e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}'+\mathbf{q}+\mathbf{G}) \cdot \mathbf{r}} \xi_{\mathbf{q}\nu} \\ \cdot (\mathbf{q} + \mathbf{G}) V_{ei}(\mathbf{q} + \mathbf{G}) \\ \cdot \left(\frac{\hbar}{2MN\omega_{\mathbf{q}\nu}} \right)^{\frac{1}{2}} u_{\mathbf{k}\eta} c_{\mathbf{k}\eta'}^\dagger c_{\mathbf{k}\eta} (\alpha_{\mathbf{q}\nu} + \alpha_{-\mathbf{q}\nu}^\dagger) \quad (8) \end{aligned}$$

の形のもの得られる． \mathbf{G} は逆格子ベクトル， M はイオンの質量， N は結晶に含まれる単位胞の数，

$\xi_{\mathbf{q}\nu}$ は各フォノンモードにおける原子の変位方向を指し示す3次元の偏極ベクトルである．ポテンシャルの微分とブロッホ波動関数から得られる電子フォノン相互作用行列要素を $M_{\mathbf{k}\mathbf{q}}^{\eta\eta'\nu}$ としてまとめると，電子フォノン相互作用のハミルトニアンは，

$$H_{ep} = \sum_{\mathbf{k}\eta\eta'} \sum_{\nu\mathbf{q}} M_{\mathbf{k}\mathbf{q}}^{\eta\eta'\nu} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\eta'}^\dagger c_{\mathbf{k}\eta} (\alpha_{\mathbf{q}\nu} + \alpha_{-\mathbf{q}\nu}^\dagger) \quad (9)$$

のような形に書き表すことができる．これは，ちょうど波数 \mathbf{k} バンド η の電子が波数 \mathbf{q} ($-\mathbf{q}$)モード ν のフォノンを吸収(放出)することで波数 $\mathbf{k} + \mathbf{q}$ バンド η' の電子が生じるプロセスに対応している．

2.2 第一原理計算による電子フォノン相互作用の計算

前節での電子フォノン相互作用行列要素， $M_{\mathbf{k}\mathbf{q}}^{\eta\eta'\nu}$ は，どのようにすれば第一原理計算で求めることができるだろうか．第一原理計算の基盤理論，密度汎関数理論では，ハミルトニアンはコーン・シヤムハミルトニアン

$$H^{KS} = - \frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 + V^{KS}(\mathbf{r}, \{\mathbf{Q}_j^\nu\}) \quad (10)$$

の形で表される． V^{KS} はイオンと電子の相互作用によって生じるポテンシャル V^{en} ，ハートリーポテンシャル V^H ，および交換相関ポテンシャル V^{xc} の和によって

$$V^{KS} = V^{en} + V^H + V^{xc} \quad (11)$$

と定義される．また，コーン・シヤムハミルトニアンは

$$H^{KS} \phi_{\mathbf{k}\eta}(\mathbf{r}) = \epsilon_{\mathbf{k}\eta} \phi_{\mathbf{k}\eta}(\mathbf{r}) \quad (12)$$

で表されるコーン・シヤム方程式を満たす．コーン・シヤム波動関数はブロッホ関数の性質を満たす．

2.1節での手続きと同様に，変位 \mathbf{Q}_j^ν によって生じるポテンシャルの変分を考え，それをフォノンの生成消滅演算子によって書き換えると，

$$\begin{aligned}
 H_{ep} &= \sum_{\mathbf{k}'\eta'\mathbf{k}\eta\nu} \langle \phi_{\mathbf{k}'\eta'} | V^{KS}(\mathbf{r}, \{\mathbf{R}_j, \mathbf{Q}_j^v\}) - V^{KS}(\mathbf{r}, \{\mathbf{R}_j\}) | \phi_{\mathbf{k}\eta} \rangle \\
 &= c_{\mathbf{k}'\eta'}^\dagger c_{\mathbf{k}\eta} \\
 &= \sum_{\mathbf{k}\mathbf{q}\eta'\eta\nu} M_{\mathbf{k}\mathbf{q}}^{\eta'\eta\nu} c_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\eta'}^\dagger c_{\mathbf{k}\eta} (\alpha_{\mathbf{q}\nu} + \alpha_{-\mathbf{q}\nu}^\dagger) \quad (13)
 \end{aligned}$$

が得られる。ここで、変位によって生じるポテンシャルの変分をテイラー展開の 1 次まで取ることを考えると、電子フォノン相互作用行列要素は

$$\begin{aligned}
 M_{\mathbf{k}\mathbf{q}}^{\eta'\eta\nu} &= \langle u_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\eta'} | \Delta_{\mathbf{q}\nu} v^{KS} | u_{\mathbf{k}\eta} \rangle \quad (14) \\
 \Delta_{\mathbf{q}\nu} v^{KS} &= \sum_{\mathbf{k}} \left(\frac{\hbar}{2MN\omega_{\mathbf{q}\nu}} \right)^{\frac{1}{2}} \xi_{\mathbf{q}\nu}^{\mathbf{k}} \sum_p \exp\{-i\mathbf{q}(\mathbf{r} \\
 &\quad - \mathbf{R}_p)\} \left. \frac{\partial V^{KS}}{\partial \boldsymbol{\tau}_{\mathbf{k}}} \right|_{\mathbf{r}=\mathbf{R}_p} \quad (15)
 \end{aligned}$$

となる。ここで、 \mathbf{R}_p と $\boldsymbol{\tau}_{\mathbf{k}}$ はそれぞれ、各原子が含まれているユニットセルの位置を表すベクトルと、ユニットセル内での原子位置を表すベクトルである。原子の座標は $\mathbf{R}_j = \mathbf{R}_p + \boldsymbol{\tau}_{\mathbf{k}}$ で表される。この表式中の $\frac{\partial V^{KS}}{\partial \boldsymbol{\tau}_{\mathbf{k}}}$ を計算する方法として、代表的なものが摂動論を応用し、 V^{KS} の微分が満たす Sternheimer 方程式

$$\begin{aligned}
 (e^{-i(\mathbf{k}+\mathbf{q})\cdot\mathbf{r}} H^{KS} e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{q})\cdot\mathbf{r}} - \epsilon_{\mathbf{k}\eta}) \partial u_{\mathbf{k}\eta,\mathbf{q}} \\
 = - \sum_p \exp\{-i\mathbf{q}(\mathbf{r} \\
 - \mathbf{R}_p)\} \left. \frac{\partial V^{KS}}{\partial \boldsymbol{\tau}_{\mathbf{k}}} \right|_{\mathbf{r}=\mathbf{R}_p} u_{\mathbf{k}\eta} \quad (16)
 \end{aligned}$$

を自己無撞着に解く、密度汎関数摂動理論 (density functional perturbation theory: DFPT) である[5]。ここで $\partial u_{\mathbf{k}\eta,\mathbf{q}}$ はコーン・シヤム波動関数の格子周期部分において生じる変化を表している。

DFPT 法を用いると、任意の波数に対して電子フォノン相互作用行列要素を求めることが可能であ

るが、精度の向上のために稠密な波数空間のサンプリングを行うと、計算時間が現実的ではなくなる。この、精度と計算時間のトレードオフを解決する一つの方法として DFPT 法と最大局在化ワニエ関数 (maximally localized Wannier function: MLWF) [6] を組み合わせる手法が提案されている[7,8]。

3. 第一原理計算によるジュール熱発生素過程解析

2 章で述べた第一原理計算による電子フォノン相互作用を伝熱分野に応用した研究事例として、ここでは参考文献[4]の Si におけるジュール熱発生素過程の解析を紹介する。

3.1 ジュール発熱過程の定式化

ジュール発熱は、固体物理やデバイス工学における基本的な問題の一つである。ミクロな視点から考えると、半導体におけるジュール熱の発生過程は相互作用の時間スケールを考えると以下のような 3 段階のプロセスで記述できる。まず、電界によって加速された電子が、電子間相互作用や欠陥によるタイムスケールが短い散乱によって運動量の緩和を受ける。次に、緩和された電子のエネルギーがフォノン系に電子フォノン相互作用を通じて移行し、フォノンが励起される。そして最後に励起されたフォノンが遅い時間スケールを持つフォノン間相互作用によって熱キャリアとなるフォノンモードへ緩和し、最終的に熱浴に放熱される。

本研究では、2 段階目の電子フォノン相互作用によるフォノン励起をジュール発熱の素過程であると考え、この段階では、より早い段階で電子が受ける散乱によって、電子の持つ運動量は波数空間で等方的な分布を持っていると考えられる。すなわち、何らかの温度で特徴づけられるフェルミ分布で近似できる。このように、緩和を受けた電子系は格子系とは異なる温度を持っていると考えるモデルは 2 温度モデルとよばれ、光によって励起された電子の緩和過程を解析する用途によく用いられている[9,10]。

この近似のもとでは、ジュール熱の発生は、電子温度 T_e の「熱い電子」から、格子温度 T_l の「冷たい格子系」へのエネルギー移動であると考えられることができる。このエネルギー移動を定量化するために、以下のフォノンのボルツマン方程式を考える。

$$\frac{\partial n_{\mathbf{q}}}{\partial t} = \left. \frac{\partial n_{\mathbf{q}}}{\partial t} \right|_{diff} + \left. \frac{\partial n_{\mathbf{q}}}{\partial t} \right|_{coll} \quad (17)$$

$n_{\mathbf{q}}$ はフォノンの分布関数である． $\left. \frac{\partial n_{\mathbf{q}}}{\partial t} \right|_{diff}$ は温度勾配の存在による拡散項， $\left. \frac{\partial n_{\mathbf{q}}}{\partial t} \right|_{coll}$ は電子フォノン相互作用による衝突項である．ここでは温度勾配は無視できるほど小さい状況を考え，拡散項を無視する．電子フォノン相互作用による衝突項は，フォノンが生成される過程 $P_{\mathbf{q}\nu}^+$ とフォノンが消滅する過程 $P_{\mathbf{q}\nu}^-$ に分けることができる．それぞれ，

$$P_{\mathbf{q}\nu}^+ = 2 \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}} |M^{nmv}(\mathbf{k}, \mathbf{q})|^2 (n_{\mathbf{q}\nu} + 1) \delta(E_{n\mathbf{k}} - E_{m\mathbf{k}+\mathbf{q}} + \hbar\omega_{\mathbf{q}\nu}) (1 - f_{n\mathbf{k}}) f_{m\mathbf{k}+\mathbf{q}} \quad (18)$$

$$P_{\mathbf{q}\nu}^- = 2 \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}} |M^{nmv}(\mathbf{k}, \mathbf{q})|^2 n_{\mathbf{q}\nu} \delta(E_{m\mathbf{k}+\mathbf{q}} - E_{n\mathbf{k}} - \hbar\omega_{\mathbf{q}\nu}) (1 - f_{m\mathbf{k}+\mathbf{q}}) f_{n\mathbf{k}} \quad (19)$$

のように書ける．この2つを足し合わせ，整理すると，

$$\left. \frac{\partial n_{\mathbf{q}}}{\partial t} \right|_{coll} = \sum_{\nu} P_{\mathbf{q}\nu}^+ - P_{\mathbf{q}\nu}^-$$

$$= 2 \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}, \nu} |M^{nmv}(\mathbf{k}, \mathbf{q})|^2 \{n_{\mathbf{q}\nu} (f_{m\mathbf{k}+\mathbf{q}} - f_{n\mathbf{k}}) + f_{m\mathbf{k}+\mathbf{q}} (1 - f_{n\mathbf{k}})\} \delta(E_{n\mathbf{k}} - E_{m\mathbf{k}+\mathbf{q}} + \hbar\omega_{\mathbf{q}\nu}) \quad (20)$$

が得られる．フォノン系のエネルギーの増減は，フォノン状態の占有数変化にそれぞれのフォノンモードのエネルギーを乗ずることで得られるので，

$$\left. \frac{\partial E_{ph}}{\partial t} \right|_{coll} = 2 \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}, \nu} \hbar\omega_{\mathbf{q}\nu} |M^{nmv}(\mathbf{k}, \mathbf{q})|^2 \{n_{\mathbf{q}\nu} (f_{m\mathbf{k}+\mathbf{q}} - f_{n\mathbf{k}}) + f_{m\mathbf{k}+\mathbf{q}} (1 - f_{n\mathbf{k}})\} \delta(E_{n\mathbf{k}} - E_{m\mathbf{k}+\mathbf{q}} + \hbar\omega_{\mathbf{q}\nu}) \quad (21)$$

となる．これは定義から電子のエネルギーがジュー

ル熱に緩和するレートであると考えられる．式中の $M^{nmv}(\mathbf{k}, \mathbf{q})$ やフォノン分散，電子のバンドを第一原理計算から求めることでジュール熱発生過程をモードや波数に分解して解析できる．

3.2 Si 結晶での応用事例

前節の定式化に基づき，Si 結晶におけるジュール熱発生素過程を解析した結果を紹介する．フォノン分散，電子のバンド構造，電子フォノン相互作用の計算には Quantum Espresso パッケージ[11,12]及び，EPW パッケージ[8]による最大局在化ワニエ関数による補間法を用いている．擬ポテンシャルとしてはノルム保存型のもを用い，交換相関汎関数には一般化勾配近似を用いている．

本題のジュール熱発生素過程の議論に入る前に，Si 結晶において，2 温度近似を用いた定式化が妥当であるかを検証しておく．3.1 節で述べたように，この近似では電界で加速された電子が早い緩和過程を受けた後取る分布を，ある電子温度のフェルミ分布で置き換えている．まず，何度の電子温度(T_e)が何 kV/cm の電界強度(E)に相当するののかの変換則を決めなくてはならない．ここでは，マクロスコピックなジュール熱の定義が，移動度 μ と素電荷 e を用いて $e\mu E^2$ で表されることに着目する．前節で求めたジュール熱の発生レートはこれと合致する必要があるため，以下の等式が成り立つ必要がある．

$$e\mu_{avg}(T_e, T_l) E^2 = \frac{1}{N_c} \left. \frac{\partial E_{ph}}{\partial t} \right|_{coll} \quad (22)$$

ここで， $\mu_{avg}(T_e, T_l)$ は，電子温度と格子温度が異なる場合に拡張した移動度であり，緩和時間近似の下では以下のように定義される．

$$\mu_{\alpha\beta}(T_e, T_l) = -\frac{e}{N_c \Omega} \sum_n \int \frac{d\mathbf{k}}{\Omega_{BZ}} \frac{\partial f_{n\mathbf{k}}(T_e)}{\partial E_{n\mathbf{k}}} v_{n\mathbf{k},\alpha} v_{n\mathbf{k},\beta} \tau_{n\mathbf{k}}(T_e, T_l),$$

$$\frac{1}{\tau_{n\mathbf{k}}(T_e, T_l)} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{mv} \int \frac{d\mathbf{q}}{\Omega_{BZ}} |M^{nmv}(\mathbf{k}, \mathbf{q})|^2 \left[\{1 - f_{m\mathbf{k}+\mathbf{q}}(T_e) + n_{\mathbf{q}\nu}(T_l)\} \delta(E_{n\mathbf{k}} - E_{m\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \hbar\omega_{\mathbf{q}\nu}) + \{f_{m\mathbf{k}+\mathbf{q}}(T_e) + n_{\mathbf{q}\nu}(T_l)\} \delta(E_{n\mathbf{k}} - E_{m\mathbf{k}+\mathbf{q}} + \hbar\omega_{\mathbf{q}\nu}) \right] \quad (23)$$

$\mu_{avg}(T_e, T_l)$ も第一原理計算結果からもとめ、式(22)を解き、 T_e と E の対応関係をプロットしたものが図1である。電子キャリアとホールキャリアで比例係数は異なるものの、ほぼ線形の関係が成り立つことが見て取れる。

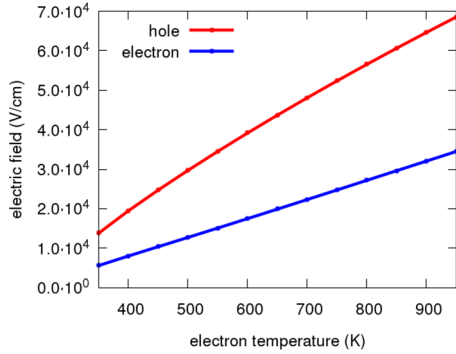


図1 電子温度と電界強度の対応関係

T_e と E の対応関係を用いると、 $\mu_{avg}(T_e, T_l)$ を $\mu_{avg}(E, T_l)$ の電界強度に関する量として書き換えることができる。Siにおいては、強電界下の移動度は

$$\mu_{avg}(E) = \frac{\mu_0}{\left[1 + \left(\frac{E}{E_c}\right)^\beta\right]^{\frac{1}{\beta}}} \quad (24)$$

のような現象論の式に従うことが知られている[13]。 μ_0 (cm²/Vs), E_c (kV/cm), そして β はフィッティングパラメータである。

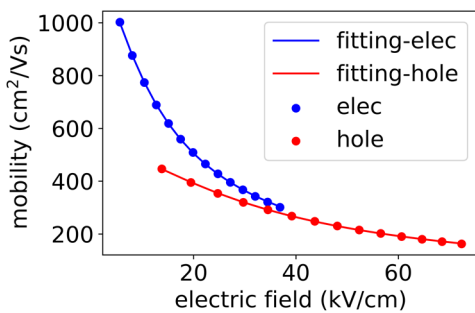


図2 第一原理計算から得られた移動度の電界強度依存性とそのフィッティング

第一原理計算結果から得られた $\mu_{avg}(E, T_l)$ と、その式(24)によるフィッティングを図2に示す。現象論の式によるフィッティングは計算結果とよく一致しており、このことは電界によって加速された電

子のエネルギー緩和を2温度近似で記述することがSiでは妥当であることを示している。

次に、式(21)のジュール熱発生レートの解析結果を紹介する。ここでは式(21)の値にどのフォノンモードが強く寄与しているかに着目する。まずSiでのフォノン分散を図3に示す。

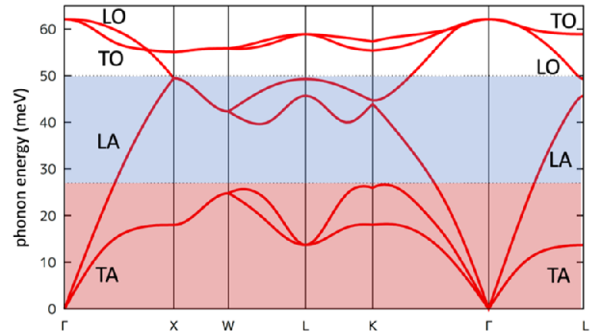


図3 Siにおけるフォノン分散

図3で示すように、ここではフォノンモードをエネルギーに応じて3つの領域に区分している。 <27 meV のエネルギーを持つフォノンは領域I, <27かつ <50 meV のものは領域II, そして >50 meV のモードは領域IIIに区分されるとしている。領域IはおもにTA(横波音響)モード, 領域IIはLA(縦波音響)モード, そして領域IIIは光学フォノンが占めている。

図4は、それぞれの領域に属するフォノンモードに対して、式(21)で定義される電子フォノン相互作用を介した電子のエネルギー緩和レート, すなわちジュール熱の発生レートを計算した結果である。Siはドーパントによって、n型にもp型にもなりうるため、電子キャリアが存在する場合とホールキャリアが存在する場合の両方に対して計算を行っている。

どちらのキャリアにおいても、エネルギー緩和の大半は、領域IIIに属するフォノンモードによって担われている。また、領域Iに属するフォノンモードの寄与は小さい。その一方、領域IIに属するフォノンモードの寄与は電子キャリアとホールキャリアでは大きく異なる。電子キャリアでは、電子のエネルギー緩和に対して、領域IIのフォノンモードは領域IIIのフォノンモードの約半分程度の寄与を有している。しかし、ホールキャリアではほとんどエネルギー緩和に寄与していないことが見て取れる。

このようなキャリアの種別による緩和プロセス

の違いは、バンド構造から理解できる。電子キャリアは伝導帯下端（CBM）に分布している。Si の場合、CBM は Δ_1 バレーと呼ばれ、ブリルアンゾーンの X 点近傍に存在する。ダイヤモンド構造の対称性により、6つの等価な Δ_1 バレーが存在し、バレー間の遷移は LO(縦波光学), LA, TO (横波光学) フォノンによって担われる[14,15]。 Δ_1 バレー内の遷移は、音響フォノンによって担われる。LA フォンは主に領域IIに存在しており、バレー間遷移に伴うエネルギー緩和過程の存在が電子キャリアの場合には領域IIのフォノンモードもエネルギー緩和に寄与する理由と考えられる。

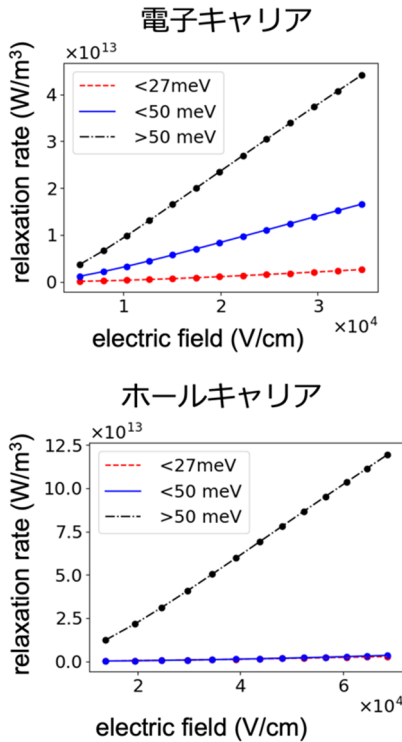


図4 電子キャリアとホールキャリアにおけるエネルギー緩和レート

一方で、ホールキャリアが分布する価電子帯上端（VBM）はブリルアンゾーンにおける Γ 点に存在しており、電子キャリアとは異なり、バレー間の遷移は存在しない。また図5に示すように、VBM 近傍で価電子バンドが作る等エネルギー面には波数空間で強い異方性がある。そのため、電子と相互作用しエネルギーを緩和させるフォノンモードの波数に強い制約が存在し、LA や TA モード

によるエネルギー緩和が生じにくくなっていると考えられる。

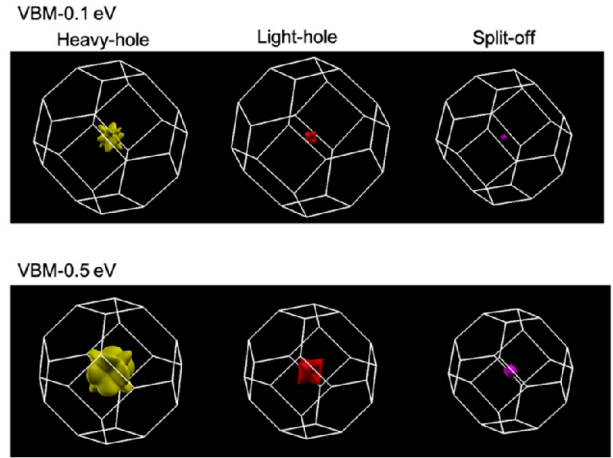


図5 VBM 近傍の価電子帯が作る等エネルギー面

4. まとめ

本稿では密度汎関数理論に基づく第一原理計算によって電子フォノン相互作用を精密に計算する方法とその応用事例を紹介した。格子振動によって生じるポテンシャルの変調が電子状態に及ぼす影響を摂動論によって取り扱い、電子状態・ポテンシャルのそれぞれの微小変化の間に成り立つ自己無撞着な方程式を解く密度汎関数摂動理論が、電子フォノン相互作用を様々な物質系で定量的に予測する基盤となっている。

著者らは電子フォノン相互作用が半導体におけるジュール熱の起源であることに着目し、Si におけるジュール熱発生素過程の精密解析を行った。その結果、電子キャリアとホールキャリアではジュール熱の発生に寄与するフォノンモードに違いがあることが判明した。Si のような良く知られた物質でも、このような熱発生の素過程はこれまで明らかになっていなかった。今回の知見や研究対象を広げていくことにより、ジュール熱によるエネルギー損失を根本的に改善する物質設計に結びつくことも期待される。

参考文献

- [1] E. R. Margine and F. Giustino, *Anisotropic Migdal-Eliashberg Theory Using Wannier Functions*, Phys. Rev. B, **87**, 024505 (2013).
- [2] S. Ponc , E. R. Margine, and F. Giustino, *Towards*

- Predictive Many-Body Calculations of Phonon-Limited Carrier Mobilities in Semiconductors*, Phys. Rev. B, **97**, 121201 (2018).
- [3] S. Poncé, D. Jena, and F. Giustino, *Route to High Hole Mobility in GaN via Reversal of Crystal-Field Splitting*, Phys. Rev. Lett., **123**, 96602 (2019).
- [4] E. Minamitani, *Ab Initio Analysis for the Initial Process of Joule Heating in Semiconductors*, Phys. Rev. B, **104**, 085202 (2021).
- [5] S. Baroni, S. de Gironcoli, A. Dal Corso, and P. Giannozzi, *Phonons and Related Crystal Properties from Density-Functional Perturbation Theory*, Rev. Mod. Phys., **73**, 515 (2001).
- [6] N. Marzari, A. A. Mostofi, J. R. Yates, I. Souza, and D. Vanderbilt, *Maximally Localized Wannier Functions: Theory and Applications*, Rev. Mod. Phys., **84**, 1419 (2012).
- [7] F. Giustino, M. L. Cohen, and S. G. Louie, *Electron-Phonon Interaction Using Wannier Functions*, Phys. Rev. B, **76**, 165108 (2007).
- [8] S. Poncé, E. R. Margine, C. Verdi, and F. Giustino, *EPW: Electron-Phonon Coupling, Transport and Superconducting Properties Using Maximally Localized Wannier Functions*, Comput. Phys. Commun., **209**, 116 (2016).
- [9] P. B. Allen, *Theory of Thermal Relaxation of Electrons in Metals*, Phys. Rev. Lett., **59**, 1460 (1987).
- [10] S. Dal Forno and J. Lischner, *Electron-Phonon Coupling and Hot Electron Thermalization in Titanium Nitride*, Physical Review Materials, **3**, 115203 (2019).
- [11] P. Giannozzi et al., *QUANTUM ESPRESSO: A Modular and Open-Source Software Project for Quantum Simulations of Materials*, J. Phys. Condens. Matter, **21**, 395502 (2009).
- [12] P. Giannozzi et al., *Quantum ESPRESSO toward the Exascale*, J. Chem. Phys., **152**, 154105 (2020).
- [13] D. M. Caughey and R. E. Thomas, *Carrier Mobilities in Silicon Empirically Related to Doping and Field*, Proc. IEEE, **55**, 2192 (1967).
- [14] D. K. Ferry, *Semiconductor Transport* (CRC Press, New York, 2000).
- [15] B. K. Ridley, *Quantum Processes in Semiconductors* (Oxford University Press, Oxford, 2013).
-

単原子スケール非平衡熱輸送場の分子動力学解析

*Non-equilibrium thermal transport at single-atom scale
based on molecular dynamics method*

藤原 邦夫 (大阪大学)

Kunio FUJIWARA (Osaka University)

e-mail: k.fujiwara@mech.eng.osaka-u.ac.jp

1. はじめに

固体と液体間の界面（固液界面）は、熱流体の輸送現象（濡れ、相変化、化学反応等を含む物質・エネルギー輸送）とも密接に関連しており、熱流体工学の分野で重要な研究対象である。分子動力学に基づく分子論的な観点からの研究に関しても数多く存在するが、ここでは熱工学分野の本研究と関連のある固液界面熱輸送に関する解説・研究の一部を引用させて頂くことにとどめたい[1-5]。

原子スケールにおいて固液界面を通過する熱エネルギーの輸送現象を考えると、界面は様々な原子・分子種の振動特性に起因する輸送特性を有していると考えられ、その実際の描像は一般的に複雑であると言える。一方で輸送現象とは本来非平衡な現象であるが、原子スケールにおける非平衡過程の描像は単純な系でも学術的によく分かっているとは言えない。本稿では、古典分子動力学の助けを借りて“非平衡輸送現象”として固液界面の熱輸送現象をオイラー型の場の輸送量に基づき探求した研究に関して紹介する。具体的には、原子スケールにおいてオイラー型の場の物理量として熱流束を算出し可視化する解析技術の解説と、解析技術に基づき明らかとなった熱エネルギー輸送状態の新しい描像や熱輸送機構に関して紹介する。本研究は主に参考文献[6]の内容であるが、これまでの著者の研究[7-11]にも深く関連している。

2. 微視的な場の輸送量

2.1 場の物理量

古典的な描像として原子・分子が空間の中で離散的に存在すると考えると、古典分子動力学ではラグランジュ的に原子・分子に着目して、原子・分子間に作用する力を算出し分子の挙動を解析する。位置 \mathbf{r} と時刻 t において、基本的な物理量である質量、運動量、エネルギー密度は原子や分子が有している物理量を用いて以下のように表すこ

とができる。

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \sum_{\xi} \sum_{i=1}^{N_{\xi}} m_{\xi,i} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i), \quad (1)$$

$$\rho \mathbf{v}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\xi} \sum_{i=1}^{N_{\xi}} m_{\xi,i} \mathbf{v}_{\xi,i} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i), \quad (2)$$

$$\rho e(\mathbf{r}, t) = \sum_{\xi} \sum_{i=1}^{N_{\xi}} e_{\xi,i} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i). \quad (3)$$

ここで、 m は粒子の質量、 ρ は密度、 e は粒子が有しているエネルギー（運動エネルギーとポテンシャルエネルギーの合計）、 ξ は粒子の種類、 i は粒子の番号、 N_{ξ} は粒子種 ξ の個数を示す。上式の右辺で δ はディラックのデルタ関数である。この定義に基づき、輸送量の微視的な表式が導出される[12]。以下で、一例として二対間ポテンシャルを用いた場合の熱流束の式を示す。

$$\begin{aligned} \mathbf{J}(\mathbf{r}, t) = & \sum_{\xi} \sum_i u_{\xi,i} \mathbf{v}_{\xi,i} - \mathbf{v}(\mathbf{r}_{\xi,i}, t) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\xi,i}) \\ & - \frac{1}{2} \sum_{\xi} \sum_{\zeta} \sum_i \sum_{j=1}^{N_{\zeta}} \mathbf{r}_{\xi,i} \mathbf{F}_{\xi\zeta} \cdot \mathbf{v}_{\zeta,j} - \mathbf{v}(\mathbf{r}, t) \\ & \times \int_0^1 \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\xi,i} - s \mathbf{r}_{\zeta,j}) ds. \end{aligned} \quad (4)$$

上式で、 \mathbf{F} は原子・分子間力を示す。紙面の制限上詳細な文字の説明は省略するが、必要に応じて参考文献を参照して頂きたい[6]。

さて、上式では流束が場の物理量として定義されているが、いわば“点”において定義されていることに注意を要する。式(4)を用いて分子動力学解析で例えば界面全体で平均化した物理量を扱う場合は難しくはないが、場所 \mathbf{r} を原子スケールで体積を有する局所的な場所として考える場合は、その取り扱いが簡単ではない。図1のような巨視的なスケールで現象論的に支配方程式を作る考え

を原子スケールに適用することを考えてみる．例えば局所体積のスケールを原子・分子の直径以下 (1Å以下) とすると局所体積内には原子や分子が存在しない状況が生じるが，そのような状況でも理論的に整合性がとれる方法を用いる必要がある．つまり，式(4)のような輸送量を空間における局所の“体積”や“面積”での物理量となるよう再定義して初めて，巨視的なスケールの CFD のようにオイラー型の場の輸送量を原子・分子スケールで算出したこととなる．

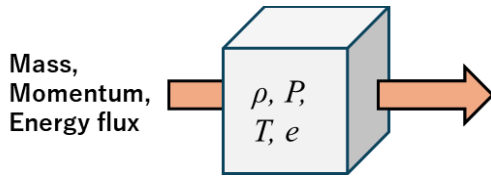


図1 局所体積における保存則.

理想的な系として図2のような粒子を多数含むような系を考え，メッシュ状に区切られた局所体積で輸送量を算出することを考える．ここで，局所体積はその中心点 \mathbf{r} を通る面で構成されているとし，局所体積の輸送量はこれらの面で算出することとする．本研究では局所において純粋に瞬時の輸送量を評価するためにこのような定義としているが，他の方法（体積平均する方法や，別の面で評価する方法）もあることに注意する必要がある．

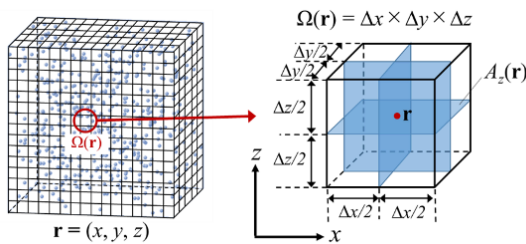


図2 局所体積の定義.

図2の定義において，熱流束の三次元空間分布を求める式は以下ようになる．ここで， Π 関数は Heaviside step 関数を用いて定義されており， sgn は符号関数である．ここでも文字の詳細な説明は省略させて頂く[6].

$$\begin{aligned}
 J_{\alpha}(\mathbf{r}, t) = & \frac{1}{A_{\alpha}} \sum_{\xi} \sum_i^{N_{\xi}} e_{\xi,i} \mathbf{v}_{\xi,i,o} - \bar{\mathbf{v}}_{\alpha}(\mathbf{r}_{\xi,i}, t) \\
 & \times \delta(\alpha_{\xi,i} - \alpha) \Pi\left(\frac{\beta_{\xi,i} - \beta}{\Delta\beta}\right) \Pi\left(\frac{\gamma_{\xi,i} - \gamma}{\Delta\gamma}\right) \\
 & - \frac{1}{4A_{\alpha}} \sum_{\xi} \sum_{\zeta} \sum_i^{N_{\xi}} \sum_{j=i}^{N_{\zeta}} \mathbf{F}_{\xi,\zeta,j} \cdot \mathbf{v}_{\xi,i} - \bar{\mathbf{v}}(\mathbf{r}, t) \quad (5) \\
 & \times \text{sgn}(\alpha - \alpha_{\xi,i}) - \text{sgn}(\alpha - \alpha_{\zeta,j}) \\
 & \times \Pi\left(\frac{\beta_{\alpha} - \beta}{\Delta\beta}\right) \Pi\left(\frac{\gamma_{\alpha} - \gamma}{\Delta\gamma}\right).
 \end{aligned}$$

図2のような分割された空間の局所局所で上式を評価することにより，原子スケールでオイラー型の場の輸送状態を空間分布として算出することが可能となる．

2.2 計算条件

本稿で紹介する計算では，Lennard-Jones ポテンシャルで相互作用する粒子で構成された固液界面系を用いた．液体部は固体壁面に挟まれ，壁面間に一次元的な温度勾配をもうけることで熱流が固液界面を通過する一般的な計算系である．計算系において z 軸を界面に対して垂直方向， xy 軸を界面に対して平行方向にとっている．固液界面の濡れ性をポテンシャルの井戸の深さを調整することで変化させた．本原稿では，固液界面の特に固体と液体の接合部の単原子スケールに着目して結果を示す．物理量に関しては全て無次元化を行っている．

3. 結果

3.1 熱流束の二次元分布

式(5)を用いて，固液界面を通過する熱流束を分子動力学に基づき算出した結果（二次元分布）を図3に示す[6]. 図3は濡れ性が良い場合と悪い場合の結果を示しており，それぞれの場合で熱流束の z 方向成分と x 方向成分を示している．系内で温度勾配は一次元的 (z 方向) であり，図3中の流体分子と固体原子の瞬間的な位置が示された図から対象としている空間スケールが把握できる．著者の知る限り，非平衡現象として単原子スケールから固液界面熱輸送状態の明確な描像を示した初めての結果である[10]. 得られた熱流構造に関して，固体と液体部で顕著な違いが確認できる．

まず固体では原子構造が反映された熱流束の明確な構造が確認できる。一方流体部では、固体から離れたバルク部では熱流束の構造が見られないが、固体壁面近傍の吸着層では熱流束の明確な構造が確認できる。このような熱流束構造が吸着した固体原子でどの程度変化し制御可能か調べた研究もある[11].

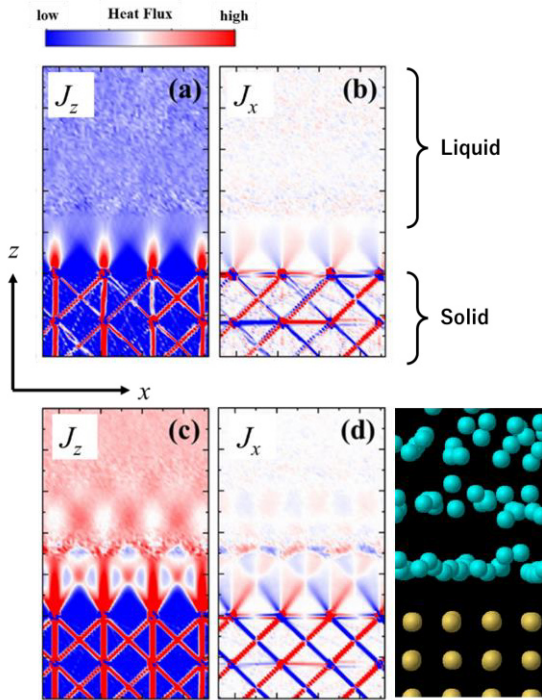


図3 固体-液体界面における熱流束の二次元分布 (z : 巨視的な温度勾配方向). (a, b) 濡れ性が悪い場合. (c, d) 濡れ性が良い場合. J_x と J_z はそれぞれ x 方向と z 方向の熱流束を示している.

3.2 熱流束の三次元分布

図3は二次元分布の結果であるから紙面奥行き方向に平均化された熱流束を示しており、熱流束の単原子スケールにおける真の特性を評価することは難しい。原子構造は3次元的事象であることから、対応する3次元的事象な熱流束構造を求めると、熱流束のより詳細な特性が理解可能となる。式(5)は熱流束の三次元分布を求めるために定式化されたものであり、解析技術を構築し局所空間を極限的に小さくすることで、空間的にほとんど平均化されていない熱流束の3次元的事象な構造が得られる(図4)。図4では、固液界面内(近接している表

面固体原子と液体分子吸着層の間)において z 方向の各位置での熱流束を示している。図4でも濡れ性が良い場合と悪い場合の結果が示されており、例えば固体原子近傍 ($z^*=0.15$) では固体原子からの指向性の強い熱流束が観測できる。一方で液相側に近づく (z の位置が増加する) と、強い熱流束のスポットは分岐して広がり、濡れ性が悪い場合は熱流束の指向性が弱いことも明らかとなった。このように、熱流束の三次元分布(空間的事象な熱流束構造)から界面輸送特性を解明可能であることがわかった。

単原子スケールから熱流束の二次元・三次元空間分布を示してきたが、巨視的に一次元の熱伝導を考えた場合、巨視的な温度勾配方向に対して、熱流束は一次元的(温度勾配方向に一定)である。図5は、検出された二次元・三次元的事象な熱流束が一次元的な通常の熱流束の値と比較してどの程度異なるのか、定量的に示した結果である。図中で、それぞれの場合の熱流束は一次元の熱流束の値を除いてあり、 ϵ_{fs} は濡れ性のパラメータである(値が大きいほど濡れ性がよい)。二次元分布の結果は、 xz 平面で強い熱流束が観測された特定の x 位置での値を示しており、一方三次元分布の結果では、各 z 位置で強い熱流束を示した値をプロットしている。結果より、表面固体原子 ($z^*=0$) に近い位置から距離が離れる(流体側に近づく)に従い、熱流束の値は指数関数的に減衰していることがわかる。また、平均化された一次元的な熱流束と比較して、二次元・三次元分布として検出された熱流束の値は大きく異なることが明確にわかる。さらに二次元分布と三次元分布それぞれで検出される熱流束の値も大きく異なり、熱流束の定量性を重視する際には、やはり三次元分布の結果が重要であることが理解できる。以上の図4、図5の結果は、原子スケールの非平衡輸送現象を改めて考える上で、重要な描像であると言える。

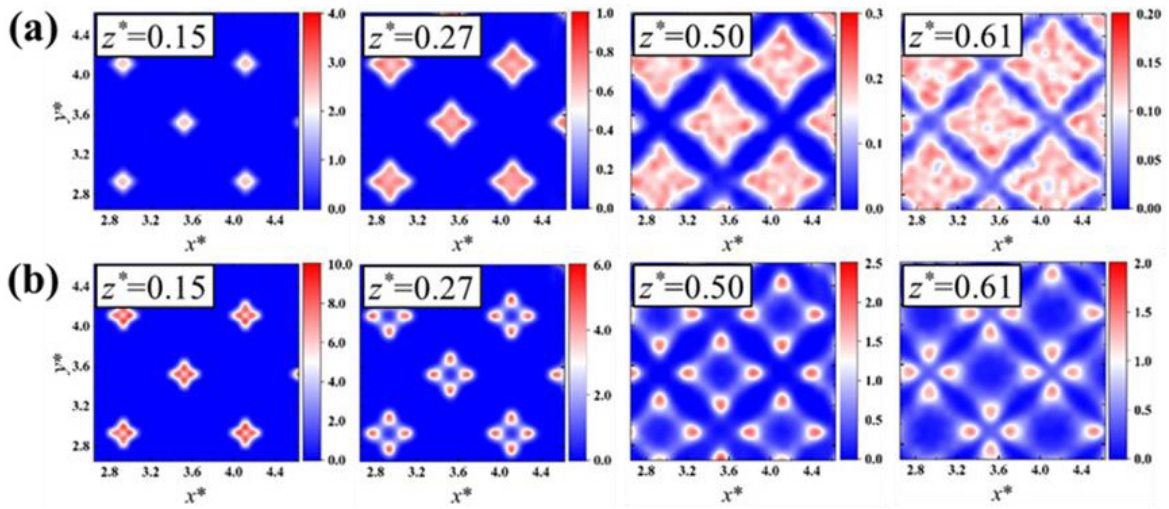


図4 固液界面内における三次元熱流構造（各 z 方向高さにおける断面で表示）. (a) 濡れ性が悪い場合. (b) 濡れ性が良い場合. 濡れ性が良い場合に指向性が顕著な熱流が観測されていることがわかる.

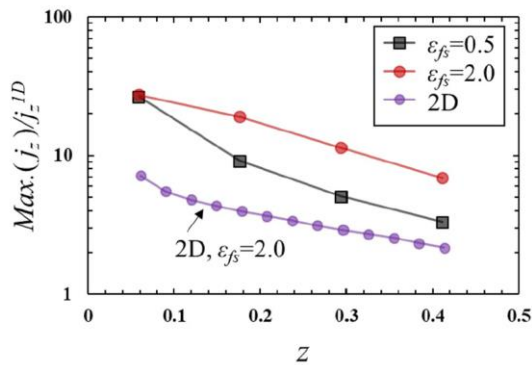


図5 一次元、二次元、三次元分布における熱流束の定量的な比較. 2D: 二次元分布における値. $\epsilon_{fs} = 2.0$: 三次元分布における値（濡れ性が良い場合）. $\epsilon_{fs} = 0.5$: 三次元分布における値（濡れ性が悪い場合）.

4. 微視的な場の輸送量のさらなる開拓

ここまでの内容で、原子スケールにおけるオイラー型の輸送場として固液界面を通過する熱流束を単原子スケールの空間分解能で示してきた。得られた熱流束場の描像は固液界面の熱輸送特性を明確に把握可能であり有用である。しかし、オイラー型の輸送場の結果を三次元分布として得るためには、計算負荷が深刻となる。例えば図4の結果を得るためには、 $50\mu\text{s} \sim 100\mu\text{s}$ の時間平均を要する。また分子動力学で輸送機構を追求する場合、ラグランジュ的に輸送量を考える一般的な手法と、オイラー的な観点の手法とどちらが優位となるの

であろうか？ オイラー型の観点で現象を追求するのであれば、例えば図4で示されているような強い熱流束が観測された場所に着目し、スペクトルの観点からそのメカニズムや制御の可能性に関して研究を行うことが可能である[13,14]。しかし、それは結局のところラグランジュ的に輸送現象を解明する方策とあまり違いがないことになる（より局所に着目し詳細を解明することはできる）。ここでは、極限的な局所で検出された場の輸送量の特徴に基づきスペクトルに依存せずに非平衡輸送現象を把握する新しい方法の概要を述べる。さらに専門的な内容となるので、理論の構築も含め詳細は参考文献[6]をご参照頂きたい。

再び固液界面を通過する熱流束を考えると、十分な時間平均をとれば図4のように単原子スケールで非平衡定常状態における輸送量の空間分布を示すことが可能である。しかしそれぞれの局所でさらに短い時間スケールに着目すれば、実は一つ一つの原子・分子間力によってオーダーの異なるエネルギー流束が生じている。このような単一の相互作用レベルで観測される物理量を新たな現象把握の手段として移行させることで、新しい観点（より微視的な観点）からスペクトル的な情報をも含み現象解明を行うことを考える。

一例として、固液界面を通過する単一の相互作用によるエネルギー流束に着目し、その際に界面の局所に作用する応力とエネルギー流束を軸とする平面で状態数 Γ をプロットした結果を示す（図

6). この結果から、単一の相互作用レベルにおいてどの程度の応力帯域やエネルギー流束帯域で界面を介してエネルギーがやり取りされているのかがわかる。この結果は、単一相互作用レベルで観測される物理量と、界面全体で平均化された熱流束や図4の単原子スケールで特定された熱流束との接続を示す一例である。

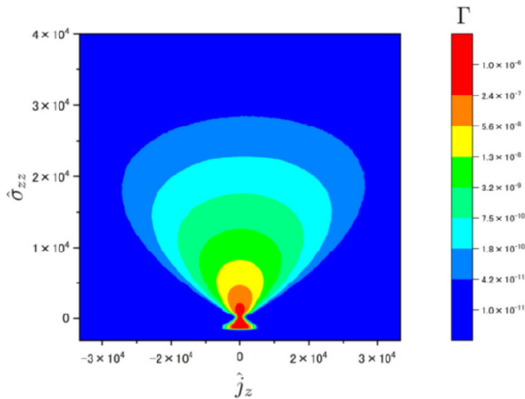


図6 固液界面の熱輸送の成り立ち。横軸は単一の相互作用により観測される瞬時的な場のエネルギー流束、縦軸は単一の相互作用により観測される場の応力を示す。Γは状態密度である。

また図7において、横軸に単一相互作用に基づく応力、縦軸に状態密度とエネルギー流束を示す。この結果より、応力状態により正味のエネルギー流束が負の値（巨視的な熱伝導方向に対して逆方向）、や正の値を示すことがわかる。そして、どの応力帯域でエネルギー流束が顕著であるかわかる。この結果を横軸方向に積分すれば、巨視的な熱流束の値が得られる。このように、極限的な場の物理量を用いることで、巨視的な流束を新しい観点から解釈することが可能であることがわかった。

本稿では詳細を省略しているが、提案した方法は現象論的な観点から構築されており、場の輸送量を様々な物理量（例えば、原子位置や温度等）に関連付けて、なぜその場所でそのような輸送特性となるか分子動力学の観点から完全に把握することが原理的には可能である。他の結果として、場の応力が小さな値の場合に状態密度が高くなる特性に基づき場の熱輸送機構の理解が可能であることや、固体表面原子の運動と固液界面熱輸送特性の密接な関係性が明らかとなっている[6].

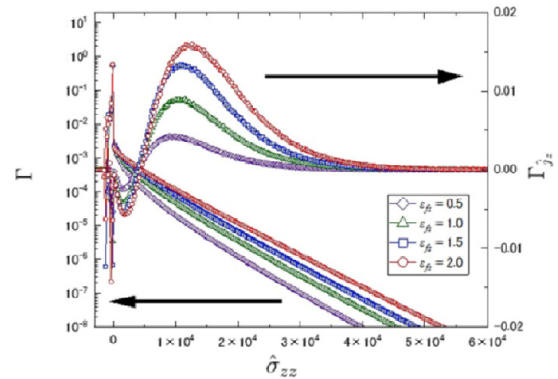


図7 固液界面の熱輸送量の成り立ち。横軸は単一の相互作用により観測される場の応力を示す。また縦軸（左側）は状態密度を、縦軸（右側）は場のエネルギー流束を示す。

5. おわりに

本稿では、“非平衡輸送現象”として固液界面の熱輸送現象を古典分子動力学に基づき単原子スケールから探求した研究を紹介した。特にオイラー型の場の輸送量（熱流束）を算出し空間分布として可視化する方法の解説と、解析技術に基づき明らかとなった単原子スケールにおける固液界面の熱エネルギー輸送の描像や熱輸送機構に関して概要を示した。また、通常のエイラー型の場の輸送量をさらに微視的かつ基本的な物理量で解明する方策を示した。

今後の展望として、さらに複雑な効果を考慮した輸送場に関する解析技術の高度化がまず挙げられる。また本研究で示した場の輸送量をさらに微視的な観点からの物理量と接続する方法に関しては、さらなる研究が必要である。オイラー型の輸送場の解析技術の高度化や、場の輸送量の解釈がさらに進展し、本解析技術が“原子スケール CFD”と呼ばれる日が来ることを願う。

謝辞

本稿の執筆にあたり、共同研究者の芝原正彦先生（大阪大学）に謝意を表します。本研究は JST さきがけ「熱制御」領域において実施されたものです。研究総括の花村克悟先生、またアドバイザーの皆さま、さきがけ研究者の皆さまには大変お世話になり多くの影響を受けました。心より感謝させていただきます。特に矢吹智英先生（九州工業大学）から沸騰現象の実験的な観点からの考えに関して学ばせて頂きました。さらに海外では、Prof.

Yang Shao-Horn (MIT), Dr. Kiarash Gordiz (MIT), Prof. Peter Daivis (Royal Melbourne Institute of Technology), Prof. Billy Todd (Swinburne University of Technology)に大変お世話になりました。最後に、貴重な執筆の機会を与えて頂きました志賀拓磨先生(産総研)、柏木誠先生(早稲田大学)にお礼申し上げます。

特記事項

本原稿で使用した図は参考文献[6]から転用・もしくは改変した図©Kunio Fujiwara であり、クリエイティブ・コモンズ・ライセンス(表示 4.0 国際)のもとに掲載を許諾されています。

<https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>

参考文献

- [1] 小原拓, 液体中の熱伝導: 分子動力学による一描像, 伝熱, **50-211** (2011) 37.
- [2] Maruyama, S. and Kimura, T., A Study on Thermal Resistance over a Solid-Liquid Interface by the Molecular Dynamics Method, Thermal Sci. Eng. **7-1** (1999) 63.
- [3] 芝原正彦, ナノスケールの微細構造が流体—固体界面のエネルギー輸送機構に与える影響, 伝熱, **56-236** (2017) 25.
- [4] 長山暁子, 固液界面の境界条件とマイクロ伝熱機構, 伝熱, **50-211** (2011) 29.
- [5] 松原裕樹, 菊川豪太, 小原拓, 液体・界面の熱輸送特性発現機構—分子設計を志向して, 伝熱, **56-236** (2017) 17.
- [6] Fujiwara, K. and Shibahara, M., Thermal transport mechanism at a solid-liquid interface based on the heat flux detected at a subatomic spatial resolution, Phys. Rev. E **105-3** (2022) 034803. DOI: 10.1103/PhysRevE.105.034803
- [7] Fujiwara, K. and Shibahara, M., Local pressure components and interfacial tension at a liquid-solid interface obtained by the perturbative method in the Lennard-Jones system, J. Chem. Phys. **141** (2014) 034707.
- [8] Fujiwara, K. and Shibahara, M., Local pressure components and interfacial tensions of a liquid film in the vicinity of a solid surface with a nanometer-scale slit pore obtained by the perturbative method, J. Chem. Phys. **142** (2015) 094702.
- [9] Fujiwara, K. and Shibahara, M., Local mass and energy transports in evaporation processes from a vapor-liquid interface in a slit pore based on molecular dynamics, AIP Adv. **8** (2018) 025124.
- [10] Fujiwara, K. and Shibahara, M., Detection of heat flux at single-atom scale in a liquid-solid interfacial region based on classical molecular dynamics, Appl. Phys. Lett., **114** (2019) 011601.
- [11] Fujiwara, K. and Shibahara, M., Atomic-scale thermal manipulation with adsorbed atoms on a solid surface at a liquid-solid interface, Sci. Rep., **9** (2019) 13202.
- [12] Irving, J. H. and Kirkwood, G., The statistical mechanical theory of transport processes. IV. The equations of hydrodynamics, J. Chem. Phys. **18** (1950) 817.
- [13] Fujiwara, K. and Shibahara, M., A spectral analysis of relationships between overall and local thermal transport across nanostructured solid-liquid interfaces, ASTFE Digital Library (Proc. 7th Thermal Fluids Eng. Conf.) (2022) 399.
- [14] Fujiwara, K. and Shibahara, M., Thermal transport property at a solid-liquid interface with atomic structures: step, cluster, vacancy, and adatom, ASTFE Digital Library (Proc. 8th Thermal Fluids Eng. Conf.) (2023) 1141.

行事カレンダー

本会主催行事

| 開催日 | 行事名 | 申込締切 | 原稿締切 | 問合せ先 | 掲載号 |
|-------|-----------------------|------|------|----------------------------------------------------------------|-----|
| 2024年 | | | | | |
| 7月 | 5(金) 第11回「伝熱工学の基礎」講習会 | | | 第11回「伝熱工学の基礎」講習会運営事務局 E-Mail : basic-lecture2024@pacmice.jp | |

本会共催、協賛、後援行事

| 開催日 | 行事名 | 申込締切 | 原稿締切 | 問合せ先 | 掲載号 |
|-------|----------------------------------------------------------------------------|------|------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| 2024年 | | | | | |
| 7月 | 1(月) ~ 2(火) The 8th International Symposium on Fuels and Energy (ISFE2024) | | | 広島大学エネルギー超高度利用研究拠点 | |
| | 11(木) 2023年度計算力学技術者(CAE技術者)資格認定事業 | | | (一社)日本機械学会出版販売グループ 宮田 miyata@jsme.or.jp | |
| | 19(金) ~ 21(日) 第50回可視化情報シンポジウム | | | 一般社団法人可視化情報学会事務局 office@vsj.jp | |
| 8月 | 28(水) 24-65 講習会「実験流体力学 流体計測の基礎」 | | | (一社)日本機械学会総合企画グループ 佐藤 sato@jsme.or.jp | |
| 9月 | 4(水) ~ 6(金) 日本混相流学会混相流シンポジウム2024 | | | (株)学術出版印刷内 日本混相流学会事務局 TEL06-6466-1588/FAX06-6463-2522 E-mail: office@jsmf.gr.jp | |
| | 4(水) ~ 6(金) 2024年度日本冷凍空調学会年次大会 | | | 日本冷凍空調学会 年次大会協賛担当: 宇田 Tel: 03-5623-3223 E-mail: y.uda.pa@jsrae.or.jp | |
| | 12(木) ~ 13(金) No.23-63 講習会『伝熱工学資料(改訂第5版)』の内容を教材にした熱設計の基礎と応用』 | | | (一社)日本機械学会出版販売グループ熱工学部門担当 宮田 miyata@jsme.or.jp | |
| | 17(火) ~ 19(木) 日本実験力学会 2024年度年次講演会 | | | 新潟大学医学部保健学科内 日本実験力学会事務局 担当: 高木由紀子 / Tel: 025-368-9310 / Fax: 025-368-9309 / E-mail: office-jsem@clg.niigata-u.ac.jp | |
| | 25(水) ~ 27(金) 日本流体力学会 年会 2024 | | | (一社)日本流体力学会 03-3714-0427/FAX: 03-3714-0434 E-mail: info@nagare.or.jp | |
| 10月 | 5(土) ~ 6(日) No.24-19 講習会「熱工学カンファレンス 2024」 | | | (一社)日本機械学会出版販売グループ 宮田 miyata@jsme.or.jp | |
| | 22(火) 水・蒸気性質シンポジウム (JPAPWS2024) | | | 日本水・蒸気性質協会 (JPAPWS) 徳島事務局 篠原 office@jpapws.org | |
| | 23(水) ~ 24(木) 第52回日本ガスタービン学会定期講演会 | | | (公社)日本ガスタービン学会 E-mail: gtsj-office@gtsj.org | |
| | 26(土) 日本機械学会関東支部山梨講演会 | | | 日本機械学会関東支部 E-mail: ishizawa@jsme.or.jp | |
| | 28(月) ~ 30(水) 第45回日本熱物性シンポジウム | | | 日本熱物性学会事務局 matsuura@iis.u-tokyo.ac.jp | |
| 11月 | 17(日) ~ 2023年度計算力学技術者(CAE技術者)資格認定事業 | | | (一社)日本機械学会事業企画グループ 松田 matsuda@jsme.or.jp | |
| 12月 | 14(土) 24-76 第26回スターリングサイクルシンポジウム | | | (一社)日本機械学会エンジンシステム部門事務担当 渡邊 watanabe@jsme.or.jp | |

公益社団法人日本伝熱学会第 62 期(2023 年度)総会議事録

1. 日 時 2024 年 5 月 30 日(木)16:00~16:30
2. 場 所 神戸国際会議場 メインホール
3. 正会員数 1,000 名
4. 出席者 695 名(出席者 147 名、委任状出席 548 名)。定款第 30 条の定めるところにより、これは定足数である正会員数の過半数(501 名)を上回り、総会は成立した。また、定款の改定に必要な、正会員数の 2/3(667 名)も上回った。

5. 議事経過

定款第 28 条により平井秀一郎会長が議長となり、以下の議案について逐次審議した。

第 1 号議案 第 62 期(2023 年度)事業報告の件

議長より、公益社団法人日本伝熱学会第 62 期(2023 年度)総会議案(以下、「総会議案」と呼ぶ)の第 1 号議案第 62 期(2023 年度)事業報告について諮り、満場一致でこれを可決した。

第 2 号議案 第 62 期(2023 年度)会務報告の件

議長より、総会議案の第 2 号議案第 62 期(2023 年度)会務報告について諮り、満場一致でこれを可決した。

第 3 号議案 第 62 期(2023 年度)収支決算の件

議長より、総会議案の第 3 号議案第 62 期(2023 年度)収支決算について諮り、満場一致でこれを可決した。

第 4 号議案 第 63 期(2024 年度)役員・協議員選出の件

議長より、総会議案の第 4 号議案第 63 期(2024 年度)役員・協議員選出について、以下の候補者について個々に諮った結果、満場一致でこれを可決した。

定款第 17 条第 1 項により退任する役員

| | | | |
|----|---------|----|-------|
| 理事 | 近藤 義広 | 理事 | 店橋 護 |
| 理事 | 植村 豪 | 理事 | 鹿野 一郎 |
| 理事 | 白樫 了 | 理事 | 芝原 正彦 |
| 理事 | 田之上 健一郎 | 理事 | 近藤 良夫 |
| 理事 | 矢嵐 健史 | 監事 | 井上 剛良 |

定款第 17 条第 1 項ただし書きにより退任する役員

| | | | |
|----------|--------|---------|------|
| 代表理事(会長) | 平井 秀一郎 | 理事(副会長) | 鈴木 洋 |
|----------|--------|---------|------|

第 63 期(2024 年度)に新たに選任される役員

定款第 17 条第 1 項により選任される役員

| | | | |
|----|--------|----|-------|
| 理事 | 近藤 良夫 | 理事 | 店橋 護 |
| 理事 | 戸谷 剛 | 理事 | 足立 高弘 |
| 理事 | 大宮司 啓文 | 理事 | 齊藤 泰司 |
| 理事 | 井上 修平 | 理事 | 林 謙年 |
| 理事 | 大島 翼 | 監事 | 廣田 真史 |

定款第 17 条第 1 項ただし書きにより選任される役員

| | | | |
|----|-------|----|-------|
| 理事 | 須賀 一彦 | 理事 | 永井 二郎 |
|----|-------|----|-------|

第 5 号議案 定款の改定

議長より、総会議案の第 5 号議案定款の改定について諮り、満場一致でこれを可決した。

第 6 号議案 議事録署名人選任の件

議長より、本日の議事の経過を議事録にまとめるにあたり、議長に加えて議事録署名人 2 名を選任したい旨の提案があり、協議の結果、鈴木洋氏、鈴木雄二氏の 2 名を選任し、満場一致でこれを可決した。

第 7 号議案 第 63 期(2024 年度)事業計画の件

議長より、総会議案の第 7 号議案第 63 期(2024 年度)事業計画について報告を行った。

第 8 号議案 第 63 期(2024 年度)収支予算の件

議長より、総会議案の第 8 号議案第 63 期(2024 年度)収支予算について報告を行った。

以上により、本日の議事を終了した。

2024 年 5 月 30 日

公益社団法人日本伝熱学会第 62 期(2023 年度)総会

議長 平井 秀一郎 _____ 印

議事録署名人 鈴木 洋 _____ 印

議事録署名人 鈴木 雄二 _____ 印

2024 年度日本伝熱学会 学術賞・技術賞・貢献賞・登鯉賞・奨励賞候補者推薦募集のお知らせ

日本伝熱学会では以下の各賞の表彰を実施します。つきましては、下記の要領に従って学術賞、技術賞、貢献賞、登鯉賞および奨励賞の候補者推薦を募集します。自薦、他薦を問わず、多数ご応募下さい。なお、昨年度から新たな分野を開拓し、顕著な業績を挙げた若手研究者を対象として、新たに**登鯉賞**を設けました。是非ご応募ください。

1. 対象となる業績

- (1) **学術賞**の対象は、原則として、最近3年間の *Thermal Science and Engineering* 誌または *Journal of Thermal Science and Technology* 誌に掲載された、あるいは、最近5回の日本伝熱シンポジウムにおいて発表され、国内外で審査のある学術論文集に掲載された伝熱に関する優秀な研究を主体的に行った研究者とその共同研究者とします。なお、受賞対象研究課題名は、必ずしも論文題目と厳密に一致する必要はありません。
- (2) **技術賞**の対象は、公表された優秀な伝熱技術を開発した者とします。
- (3) **貢献賞**の対象は、本学会が主催する事業の実施において、顕著な貢献を行った会員とします。
- (4) **登鯉賞**の対象は、2025年4月1日において、39歳未満の若手研究者であり、独自に新たな分野を開拓し、最近3年間の *Thermal Science and Engineering* 誌または *Journal of Thermal Science and Technology* 誌に掲載された、あるいは、最近5回の日本伝熱シンポジウムにおいて優秀な論文を発表した個人とします。
- (5) **奨励賞**の対象は、原則として、最近2回の日本伝熱シンポジウムにおいて優秀な論文を発表した若手研究者で、発表時に大学院生、またはこれに準じる者（大学卒業後5年以内の者）とします。
- (6) 学術賞の対象者のうち少なくとも1名は本学会会員であることが必要です。また登鯉賞および奨励賞の対象資格は本学会会員に限ります。
- (7) 贈賞数は、学術賞2件、技術賞1件、貢献賞2名、登鯉賞2名、奨励賞4名を目安とします。

2. 選考方法

- (1) 「学会賞に関する内規」に定める賞の内、上項に記載の各賞は、「表彰選考委員会」が「学会賞の審査・選考方法内規」に基づいて選考します。
- (2) 表彰選考委員会は、公募の他に、各賞の候補を推薦することが出来るものとします。

3. 提出書類

- (1) 申請書・推薦書
 - ・ 申請書・推薦書の書式は、本学会ホームページからダウンロードしてご使用下さい。
 - ・ 学術賞、技術賞、貢献賞、登鯉賞、奨励賞それぞれに申請書・推薦書の書式が異なりますので、ご注意ください。
- (2) 関連する日本伝熱シンポジウム講演論文または TSE/JTST 論文（学術賞、登鯉賞、奨励賞のみ）
- (3) 推薦/申請に係わる学術論文1編または技術内容参考資料（学術賞、登鯉賞、技術賞のみ）

4. 提出期限

2024年12月13日（金）

5. 提出先および問い合わせ先

いずれの書類も PDF 化し、下記電子メールアドレス宛にお送り下さい。

福井大学 工学系部門機械工学講座 永井 二郎

E-mail: nagai@u-fukui.ac.jp

TEL 0776-27-8537

(〒910-8507 福井市文京 3-9-1)

日本伝熱学会 関西支部 主催
第 18 回関西伝熱セミナー「グリーントランスフォーメーションとエネルギー技術」

日本伝熱学会 関西支部では、2年に1度、宿泊付の「関西伝熱セミナー」を開催してまいりました。今回は和歌山県和歌山市 休暇村紀州加太を会場として「グリーントランスフォーメーションとエネルギー技術」と題し、下記の通り企画いたしました。講師には、エネルギーおよび環境技術におけるエキスパートの方々をお招きし、話題提供していただきます。GXの今後の展開について、都会の喧騒を離れてゆっくりと議論したいと考えておりますので、是非ご参加下さい。

開催日時 令和6年8月30日(金) 13:00 ~ 31日(土) 12:00
会場 休暇村紀州加太 和歌山県和歌山市深山 483 (<https://www.qkamura.or.jp/kada/>)
参加定員 60名
ホームページ <http://www.htsj.or.jp/branch/kansai/seminar2024/>
参加費 一般 30,000円(税込, 意見交換会・宿泊込み),
一般(宿泊なし) 18,000円(税込, 意見交換会・宿泊含まず)
学生 18,000円(税込, 意見交換会・宿泊込み),
学生(宿泊なし) 6,000円(税込, 意見交換会・宿泊含まず)
支払方法 銀行振込(振込口座をお知らせいたしますので、申込締切日までにご入金下さい。)
申込方法 御氏名, 御所属, 参加種別(一般/学生・宿泊の有/無), 連絡先(電話, メールアドレス)
をご記載の上, 下記宛に電子メールでお申し込みください。
申込・問合せ seminar2024@mech.kindai.ac.jp (第18回関西伝熱セミナー事務局 近畿大学 瀬尾健彦)
申込締切 8月6日(火)

プログラム

第1日目: 8月30日(金)

- 13:10-14:10 【特別講演】「化石燃料の大量消費と環境問題を解決するための水素エネルギーキャリア戦略
ー工業炉でのアンモニア直接燃焼利用ー」
赤松 史光 氏 (大阪大学大学院 工学研究科)
- 14:20-15:05 「川崎重工業における燃焼排ガスおよび大気からのCO₂分離回収技術への取り組み」
沼口 遼平 氏 (川崎重工業株式会社 技術開発本部 エネルギーシステム研究部)
- 15:05-15:50 「カーボンニュートラル達成に向けた大和ハウスグループのエネルギーマネジメント等
に関する取り組み」
原田 真宏 氏 (大和ハウス工業株式会社 総合技術研究所)
- 16:00-16:45 「Power to Heat to Power および Power to Heat の実現に向けた高温蓄熱技術の開発」
能村 貴宏 氏 (北海道大学大学院 工学研究院)
- 16:45-17:30 「家電におけるGXの取り組み」
米野 範幸 氏 (パナソニック株式会社 暮らしアプライアンス社 GX戦略室)
- 19:00-21:00 夕食・意見交換会

第2日目: 8月31日(土)

- 7:00-8:30 朝食
- 9:00-9:45 「神戸製鋼グループにおけるカーボンニュートラルに向けた取組について」
朴 海洋 氏 (株式会社神戸製鋼所 技術開発本部 機械研究所)
- 9:50-10:35 「圧電フィルムを用いた柔軟構造物の振動による風力からの微小電力環境発電」
西垣 勉 氏 (近畿大学 生物理工学部)
- 10:40-11:25 「脱炭素社会を目指すBEV技術を応用したマイクログリッド」
芹澤 毅 氏 (ダイハツ工業株式会社 くるま開発本部)
- 11:30-12:00 挨拶, 集合写真

協賛: 日本機械学会, 日本機械学会関西支部, 化学工学会エネルギー部会, 化学工学会熱工学部会, 日本冷凍空調学会, 日本混相流学会, 日本熱物性学会, エネルギー・資源学会, 日本太陽エネルギー学会, 日本ヒートアイランド学会, 空気調和・衛生工学会近畿支部, 日本潜熱工学会



編集出版部会からのお知らせ —各種行事・広告などの掲載について—



インターネットの普及により情報発信・交換能力の比類ない進展がもたらされました。一方、ハードコピーとしての学会誌には、アーカイブ的な価値のある内容を手にとって熟読できる点や、一連のページを眺めて全貌が容易に理解できる点など、いくら電子媒体が発達してもかなわない長所があるのではないかと思います。ただし、学会誌の印刷・発送には多額の経費も伴いますので、当部会ではこのほど、密度のより高い誌面、すなわちハードコピーとしてぜひとも残すべき内容を厳選し、インターネット（HP：ホームページ、ML：メーリングリスト）で扱う情報との棲み分けをした編集方針を検討いたしました。

この結果、これまで会告ページで取り扱ってきた各種行事・広告などの掲載につき、以下のような方針で対応させていただきたく、ご理解とご協力をお願いする次第です。

| 対象 | 対応 | 具体的な手続き (電子メールでの連絡を前提としています) |
|-------------------------------------------|--------------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| 本会（支部）主催による行事 | 無条件で詳細を、会誌とHPに掲載、MLでも配信 | 申込者は、記事を総務担当副会長補佐協議員（ML担当）、広報委員会委員長（HP担当）あるいは編集出版部会長（会誌担当）へ送信してください。 |
| 関係学会や本会会員が関係する組織による 国内外の会議・シンポジウム・セミナー | 条件付き掲載 会誌：1件当たり4分の1ページ程度で掲載（無料） HP：行事カレンダーに掲載しリンク形成（無料） ML：条件付き配信（無料） | 申込者は、まず内容を説明する資料を総務担当副会長補佐協議員に送信してください。審議の結果、掲載可となった場合には総務担当副会長補佐協議員より申込者にその旨通知しますので、申込者は記事を編集出版部会長（会誌担当）と広報委員会委員長（HP担当）に送信してください。 |
| 大学や公的研究機関の人事公募（伝熱に関係のある分野に限る） | 会誌：掲載せず HP：条件付き掲載（無料） ML：条件付き配信（無料） | 申込者は、公募内容を説明する資料を総務担当副会長補佐協議員に送信してください。審議の結果、掲載可となった場合には総務担当副会長補佐協議員より申込者にその旨通知しますので、申込者は記事を広報委員会委員長（HP担当）に送信してください。 |
| 一般広告 求人広告 | 会誌：条件付き掲載（有料） HP：条件付き掲載 (バナー広告のみ、有料) | 申込者は、編集出版部会長（会誌担当）または広報委員会委員長（HPバナー広告担当）に広告内容を送信してください。掲載可となった場合には編集出版部会長または広報委員会委員長より申込者にその旨通知しますので、申込者は原稿を編集出版部会長または広報委員会委員長に送信してください。掲載料支払い手続きについては事務局からご連絡いたします。バナー広告の取り扱いについては http://www.htsj.or.jp/wp/media/36banner.pdf をご参照下さい。 |

【連絡先】

- ・総務部会長：大宮司 啓文（東京大学）：daiguji@thml.t.u-tokyo.ac.jp
- ・編集出版部会長：佐々木 直栄（日本大学）：sasaki.naoe@nihon-u.ac.jp
- ・広報委員会委員長：渡部 弘達（立命館大学）：hirowtnb@fc.ritsumeiji.ac.jp
- ・総務担当副会長補佐協議員：李 敏赫（東京大学）：mlee@mesl.t.u-tokyo.ac.jp
- ・事務局：村松佳子：office@htsj.or.jp

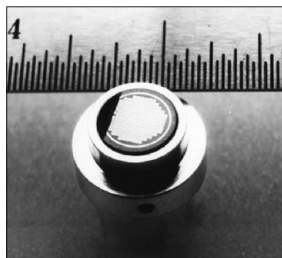
【注意】

- ・原稿は Word ファイルまたは Text ファイルでお願いします。
- ・HP はメンテナンスの都合上、掲載は申込月の翌月、また削除も希望掲載期限の翌月程度の時間遅れがあることをご了承願います。
- ・ML では、原則としてテキスト文の送信となります。pdf 等の添付ファイルで送信を希望される場合はご相談ください。

熱流束センサー

熱流束センサーは、熱エネルギーの移動密度 (W/cm^2) に比例した直流電圧を出力します。
弊社の製品は、大変手軽に高速・高精度で熱流量の測定をすることができます。
特に応答速度の早いこと、センサーからの出力レベルが高いことが特徴で、
熱流束マイクロセンサー (HFM) では、応答速度最高6マイクロ秒を達成しています。

熱流束 マイクロセンサー



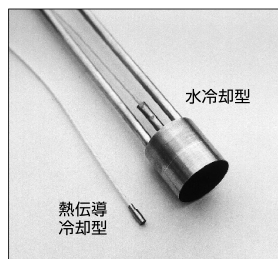
特徴

- 最高速の応答 (約 6μ 秒)
- $850^{\circ}C$ まで外部冷却不要
- 低雑音 / 高感度
- 熱流束と温度を測定
- 伝導、対流、輻射に等感度

使用例

- エンジン内壁の熱伝達状態観察
- ロケットエンジンのトラブル実験
- タービンレード熱風洞試験
- 自動車用エアバッグ安全性試験
- ジェットエンジンバックファイヤー試験

サーモゲージ

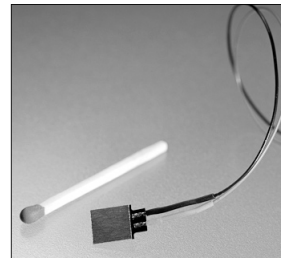


センサー本体の構造は、薄膜フォイル・ディスクの中心と周囲の温度差を測定する、差動型熱電対をとっています。フォイル・ディスクはコンスタントで作られており、銅製の円柱形ヒートシンクに取り付けられています。水冷式は取付け場所の自由度が高く長時間の測定が可能です。

使用例

- 焼却炉・溶鉱炉の熱量測定
- 火災実験の際の輻射熱ゲージ
- バーナーなど熱源の校正用基準器
- 着火性・燃焼性試験 (ISO5657, 5658, 5660)
- 米国連邦航空局のファイヤー・スモークテスト

gSKIN® 熱流束センサー



「gSKIN®」熱流束センサーはセンサー自身の表面を通過する熱流束を29対の超高感度な熱電対を用いて測定します。センサーは、 $72m^2$ の広さを持ち、厚さは $0.4mm$ です。レベル-0パッケージの最適化ポリマーと1-レベルパッケージの金属の構造になっています。

使用例

- 電気・電子機器内の発熱・放熱状態測定
- 熱交換器の効率測定
- パイプの放熱状況測定
- 暖房および換気自動システムの測定
- 熱移動/熱放出の即時応答測定

熱流束センサー 校正サービス

熱流束センサーの校正作業をお引き受けいたします。校正証明書は米国基準局NISTにトレーサブルです。校正設備の物理的な制約で、お引き受けできない場合もあります。ご相談ください。



センサテクノ株式会社

URL

www.senstech.jp

〒106-0031 東京都港区西麻布3-24-17 霞ビル4F
TEL: 03-5785-2424 FAX: 03-5785-2323

E-mail

info@senstech.jp



■ CAPTEC 社日本総代理店 ■ MEDTHERM 社輸入販売店 ■ ITI 社輸入販売店

当社は、独自の高度技術を持つ、海外メーカーの熱計測機器をご提供致しております。

CAPTEC 社(フランス)

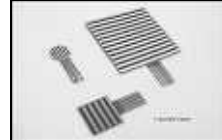
CAPTEC(キャプテック)社は、独自の高度技術により、低熱抵抗で高感度な熱流束センサーを開発・製造致しております。環境温度が変化しても感度は常に一定で、熱流束値に比例した電圧を高精度に出力します。
輻射センサーは、輻射熱のみを計測する画期的なセンサーです。特注形状も承っております。

熱流束センサー



サイズ: 5×5mm～300×300mm
厚み: 0.4mm (平面用・曲面用)
温度範囲: -200～200°C
応答速度: 約 200ms
オプション: 温度計測用熱電対内蔵
形状: 正方形・長方形・円形
特注品: 高温用・高圧用・防水加工

輻射センサー



サイズ: 5×5mm～50×50mm
厚み: 0.25mm
温度範囲: -200～250°C
応答速度: 約 50ms
オプション: 温度計測用熱電対内蔵
形状: 正方形・長方形・円形
波長領域: 赤外/可視+赤外

MEDTHERM 社(アメリカ)

MEDTHERM(メドサーム)社は、これまで30年以上にわたり、高品質の熱流計及び超高速応答の熱電対を提供してまいりました。航空宇宙・火災・燃焼分野における豊富な実績を有しています。用途に応じ、様々な形状・仕様の製品を製造可能です。

熱流計/輻射計



熱流束範囲: 0.2-4000Btu/ft²sec(フルスケール)
サイズ: 1/16インチ(約1.6mm)～1インチ(約25.4mm)
最高温度: 200°C(水冷なし)/1500°C(水冷)
出力信号: 0-10mV(DC・線形出力)
直線性: ±2%(フルスケールに対して)

応答速度: 50ms以下*
再現性: ±0.5%
較正精度: ±2%
オプション: 輻射窓・視野角指定等

*応答速度は、熱流束レンジによって異なります。

超高速応答同軸熱電対

本同軸型熱電対は、第1熱電対のチューブの中に第2熱電対ワイヤーが挿入された同軸構造になっています。第2熱電対ワイヤーは、厚み0.0005インチ(約0.013mm)の特殊なセラミックで絶縁コーティングされています。プローブ先端の熱電対接点は、厚み1～2ミクロンの金属皮膜で真空蒸着されており、最高1マイクロ秒の応答速度を実現しています。



【主な用途】
表面温度及び表面熱流束計測
風洞試験・エンジンシリンダー・エアコンプレッサー等

【最小プローブ径】
0.015インチ(約0.39mm)

【熱電対タイプ】
T型(銅/コンスタンタン) -270°C～+400°C
J型(鉄/コンスタンタン) -210°C～+1200°C
E型(クロメル/コンスタンタン) -270°C～+1000°C
K型(クロメル/アルメル) -270°C～+1372°C
S型(白金10%ロジウム/白金) +200°C～+1700°C

ITI 社(アメリカ)

ITI(International Thermal Instrument Company)社は、1969年の設立以来、高温用熱流板や火災強度熱流計など、特殊な用途に対応した製品を提供しています。特注品の設計・製造も承っております。

高温用熱流板



最高温度: 980°C
応答速度: 0.1s
直径: 8mm～25.5mm 厚み: 2.5mm

水冷式 火災強度熱流計



最高温度: 1900°C
応答速度: 0.1s
最大熱流束レンジ: 0～3000W/cm²

当社取扱製品の適用分野

- 伝熱一般
- 温熱環境
- 炉・ボイラー
- 航空宇宙
- 火災
- 燃焼
- 各種エンジン

有限会社 テクノオフィス

〒225-0011 神奈川県横浜市青葉区あざみ野 3-20-8-B
TEL. 045-901-9861 FAX. 045-901-9522
URL: <http://www.techno-office.com>

編集出版部会ノート

Note from the JHTSJ Editorial Board

本号では、志賀拓磨先生（産業技術総合研究所）にお願いして、特集「熱輸送のスペクトル学的理解」を組んでいただきました。熱制御に関する研究の中から、「スペクトル学的理解」に関わる研究トピック4件をご寄稿いただきました。ご多用中にも関わらずご寄稿下さりました皆様に厚くお礼申し上げます。

さて、日本伝熱学会第63期の編集出版部会は、下記の方々と協力して、会誌「伝熱」の編集出版業務を進めてまいります。何卒よろしくお願いたします。今期より編集出版担当副会長を務められる永井二郎先生（福井大学）から編集出版部会長を引き継いで1年が経ちました。永井先生ご提案の幹事導入によりダブルチェック体制が整い、大過なく1年を終えられたことに感謝いたします。幹事を務められた田中三郎先生（日本大学）をはじめ、62期で委員任期を終えられた田之上健一郎先生（山口大学）、矢島健史先生（東京電力）、小川邦康先生（慶應義塾大学）、櫻井篤先生（新潟大学）および志賀拓磨先生（産業技術総合研究所）に深く感謝申し上げます。

佐々木 直栄（日本大学）
Naoe SASAKI (Nihon University)
e-mail: sasaki.naoe@nihon-u.ac.jp

企画・編集出版担当副会長 永井 二郎（福井大学）
編集出版部会長 佐々木 直栄（日本大学）
委員

（理事） 齊藤 泰司（京都大学）

（協議員） 大西 元（金沢大学）、岡部 孝裕（弘前大学）、柏木 誠（早稲田大学）、小糸 康志（熊本大学）、仮屋 圭史（佐賀大学）、古川 琢磨（八戸工業高等専門学校）、地下 大輔（東京海洋大学）

TSE チーフエディター 鈴木 雄二（東京大学）

TSE 編集幹事 李 敏赫（東京大学）

編集出版部会 連絡先： 〒963-8642 福島県郡山市田村町徳定字中河原1番地
日本大学 工学部機械工学科
佐々木 直栄
Phone: 024-956-8695
E-mail: sasaki.naoe@nihon-u.ac.jp