平成 27 年度 畠山文化財団 研究助成報告（概要）

平成 28 年 3 月 31 日

ヘリウムガスによるキャビテーション気泡の生成条件制御に向けた可能性探求

津田 伸一（九州大学）

本研究では，気液の相変化速度，ひいては発泡点制御のうえで注目される物理現象の一つである“核生成速度の逆転現象”に注目した．これは，液体に特定の不凝縮ガスを溶解させると発生する現象で，温度上昇や圧力低下に伴い核生成速度が低下する（すなわち温度が高くなるにつれて，あるいは圧力が低くなるにつれて，気泡核ひいては気泡が生成しにくくなる）という，通常とは逆の傾向を示す現象である[1][2]．つまり，ある種の不凝縮ガスを溶解させれば，気泡の発生を抑制することも可能になる．これまでに逆転現象を生じうる溶媒として報告されているのは「水素ガスが混入した水」のみであり，その理由として水素が水に比べて分子間相互作用が非常に弱いことが挙げられているが，ヘリウムは水素よりもその分子間相互作用がさらに弱いため，「ヘリウムガスが混入した水」，ひいては「ヘリウムガスが混入した水以外の溶媒」でも同様の現象が生じうる可能性が期待される．水素よりもヘリウムの方が，取り扱いが容易かつ安全であることを考えると，ヘリウムガスが混入した溶媒における逆転現象の有無を明らかにすることは，工学的にも非常に意義が大きい．そこで本研究では，ヘリウムガスが混入した溶媒を対象として，上述した逆転現象が起こり得るか否かの可能性を評価した．ただし，微小スケールにおける相変化現象の実験的解明は容易ではないため，ここでは数値シミュレーションとして，気液界面の微視的構造の再現が可能な分子動力学(Molecular Dynamics，以下 MD)シミュレーションによる評価・検討をおこなった．

本研究では，ヘリウムガスが混入した液体酸素を主対象として，MD シミュレーションを実施した．ここで，溶媒として，水でなく液体酸素を選択したのは，①ヘリウムと酸素の分子間相互作用の違いが，逆転現象が実際に観察されている水と水素の分子間相互作用の違いに，比較的近いと考えられること，②水分子特有の水素結合を考慮せずとも逆転現象を数値的に再現できた例が過去にあること[1]，の 2 点による．比較のために，液体酸素（単成分系），窒素ガス-液体酸素混合系，ヘリウムガス-液体酸素混合系の 3 つの系を対象として MD シミュレーションをおこなった結果，液体酸素（単成分系）では気泡核内部が真空に近く，また窒素ガス-液体酸素混合系では気泡核の界面および気泡核の内部まで瞬時局所的に取り込まれるガスが非常に少ないのに対し，ヘリウムガス-液体酸素混合系では，気泡核の界面および気泡核の内部まで瞬時局所的に取り込まれるガスが非常に多いことがわかった．また，ヘリウムガス-液体酸素混合系のおけるこの結果は，先行研究で逆転現象が起こり得る例として知られる，ヘリウムガス-水混合系における気泡核の内部構造[1]と非常に類似していることがわかった．すなわち，気泡核の微視的な構造を見る限り，逆転現象が生起することで知られるケースと類似の構造を有しており，逆転現象が起こる可能性があることが示された．今後は，ヘリウムガスを混入させた水などで，マイクロメートルオーダの気泡発生を実験的に模擬することにより，本現象の発生の有無を直接的に確かめる必要がある．

参考文献

(1) Talanquer, V., et al., *J. Chem. Phys.* 114, 6759, (2001).

(2) Bowers, P. G., et al., *Journal of Colloid and interface Science* 215, 441, (1999).