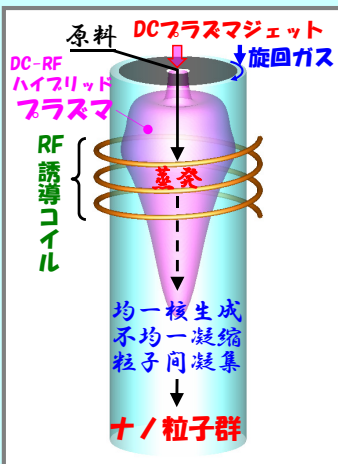


### 熱プラズマ流-ナノ粒子創製プロセス

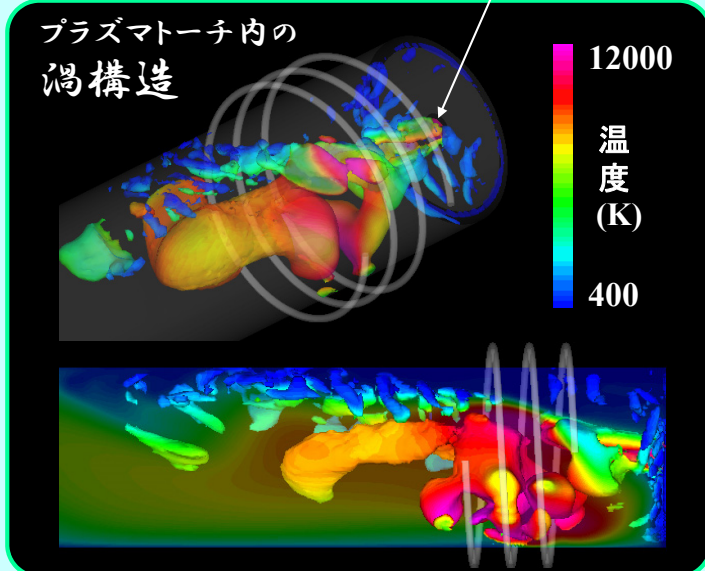
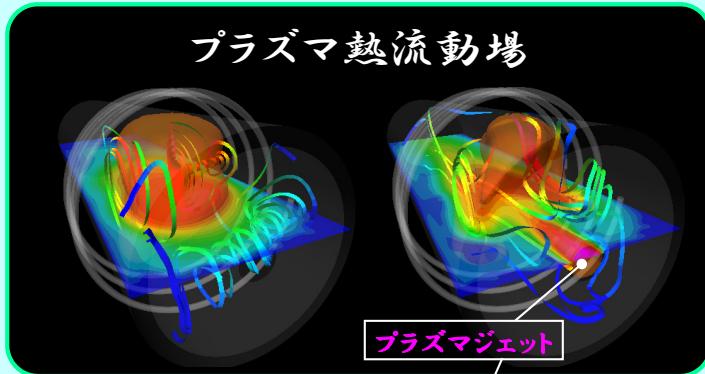


ナノ粒子はマクロサイズ材料とは異なる新奇な物質機能を示すため、様々な産業分野への応用が期待されており、粒径や組成が制御されたナノ粒子の高速かつ大規模な創製プロセスの開発が急務である。大規模創製の実現に向けて最も有力視されているのが**熱プラズマ**という**高エンタルピー・化学的高活性**を有する特殊な**電磁熱流体**である。しかしながら、熱プラズマは強い発光を伴う1万℃を超える流体であり、その中のナノ粒子形成は瞬時に完了してしまうため、実測による定量評価は

困難で、エンジニアの経験に頼りながら莫大な時間とコストを掛けて研究開発しているのが現状である。しかしながら、熱プラズマは強い発光を伴う1万℃を超える流体であり、その中のナノ粒子形成は瞬時に完了してしまうため、実測による定量評価は困難で、エンジニアの経験に頼りながら莫大な時間とコストを掛けて研究開発しているのが現状である。

そこで本研究では、スーパーコンピュータの高い性能を活かし、マイクロ～ミリメートルに渡る空間的マルチスケールの乱流渦に支配される熱プラズマの複雑流動およびナノ～ミリ秒に渡る時間的マルチスケールの形成過程が重畳したナノ粒子の集団的成長を数学表現した方程式系を数値的に解くことで、エネルギー・物質輸送現象のマルチフィジックスを解明するという計算科学に立脚した大規模ナノ粒子創製プラズマ研究の新機軸を打ち出すことを目的とする。

### 熱プラズマの複雑熱流動シミュレーション

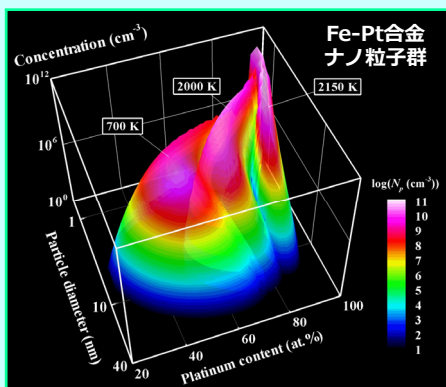


高温のプラズマ領域には電磁気力が発生するため内部に大きな渦構造が生じる。一方で低温領域には数多くの小さな渦群が形成される。これらの渦は相互に影響を及ぼし合い、プラズマ内の熱流動場は非常に複雑なものとなる。渦構造を理解し制御することはプラズマ熱流動を介したナノ粒子形成プロセスを制御するカギとなるため、さらに詳細な解析を行っていく。

Masaya Shigeta: "Time-Dependent 3-D Simulation of an Argon RF Inductively Coupled Thermal Plasma" Plasma Sources Science and Technology, Vol. 21, (2012), pp. 055029.

Masaya Shigeta: "Three-dimensional flow dynamics of an argon RF plasma with dc jet assistance: a numerical study" Journal of Physics D: Applied Physics, Vol. 46, (2013), pp. 015401.

### 金属間化合物ナノ粒子集団成長過程の数理モデルと独自解法の構築と適用



例えば、鉄(Fe)と白金(Pt)の蒸気がプラズマ下流域で急激に冷却されるとき(およそ $10^5$  K/s)飽和蒸気圧の低い白金(Pt)が核を形成しその核に鉄(Fe)と白金(Pt)が共凝縮しながら、さらに互いに凝集(合体)することでサイズ・組成とも不均一なナノ粒子群が集団的に形成する。

このことは研究代表者が独自に構築した数理モデルと数値解法により初めて明らかとなった。本研究課題においても同モデルと解法を適用し、プラズマ環境下における種々の金属間化合物ナノ粒子の集団成長過程の数値予測を図る。

Masaya Shigeta, Anthony B. Murphy: "Thermal plasmas for nanofabrication" Journal of Physics D: Applied Physics, Vol. 44, (2011), pp. 174025.

Masaya Shigeta, Takayuki Watanabe: "Growth model of binary alloy nanopowders for thermal plasma synthesis" Journal of Applied Physics, Vol. 108, (2010), pp. 043306.

### 大規模計算に向けた数学表現の考案

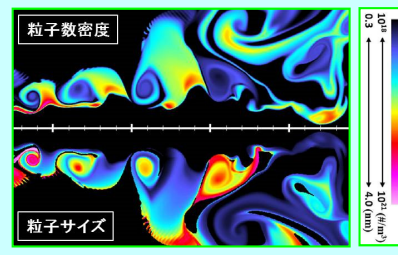
$$\frac{dN_i}{dt} = j - \bar{M}_i \frac{d^2}{4\sqrt{2}} (0.633 + 0.092\sigma_i^2 - 0.022\sigma_i^4) \times \left[ \exp\left(\frac{25}{8} \ln^2 \sigma_i\right) + 2 \exp\left(\frac{5}{8} \ln^2 \sigma_i\right) + \exp\left(\frac{1}{8} \ln^2 \sigma_i\right) \right]$$

$$\frac{d\bar{M}_i}{dt} = j\sigma_i + \bar{M}_i(S-1) \frac{v_i^2}{4\sqrt{2}S_i} \exp(2 \ln^2 \sigma_i)$$

$$\frac{d\bar{M}_i}{dt} = j\sigma_i^2 + \bar{M}_i(S-1) \frac{v_i^2}{2\sqrt{2}S_i} \exp(8 \ln^2 \sigma_i) + \bar{M}_i \frac{v_i^2}{2\sqrt{2}} (0.39 + 0.5\sigma_i - 0.214\sigma_i^2 + 0.029\sigma_i^4) \times \left[ \exp\left(\frac{25}{8} \ln^2 \sigma_i\right) + 2 \exp\left(\frac{5}{8} \ln^2 \sigma_i\right) + \exp\left(\frac{1}{8} \ln^2 \sigma_i\right) \right]$$

$$\frac{dS}{dt} = -j_e S_i - (S-1) S_i \bar{M}_i \frac{v_i^2}{4\sqrt{2}S_i} \exp(2 \ln^2 \sigma_i)$$

従来の数学表現



$\frac{dn}{dt} = j - \frac{1}{2} n^{1.4} n^{1.4}$   
 $\frac{d\bar{M}}{dt} = j\sigma_i + \frac{1}{4\sqrt{2}} \frac{S-1}{S_i} j^{1/2} n^{1/2}$   
 $\frac{dS}{dt} + f = 1$   
新表現

新たな数学表現を考案  
→ 大規模計算における効率化を実現

Valerian A. Nemchinsky, Masaya Shigeta: "Simple equations to describe aerosol growth" Modelling and Simulation in Materials Science & Engineering, Vol. 20, (2012), pp. 045017.