

マイクロ熱工学に関する分子シミュレーション

大阪大学大学院 工学研究科 機械工学専攻

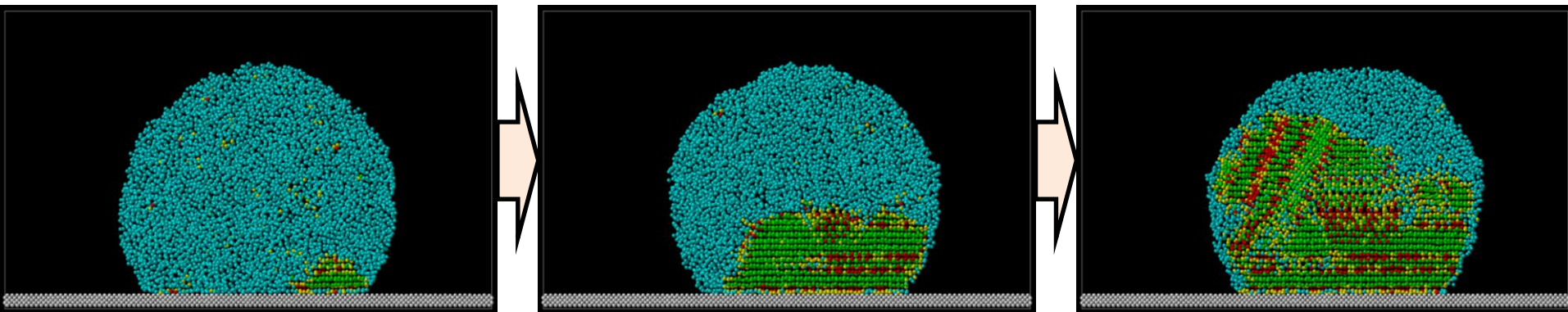
芝原正彦・植木祥高・藤原邦夫

(他 博士前期課程学生 3 名)

目的 ナノ・マイクロメートルスケールのエネルギー輸送現象を原理的に理解して制御することを目的として、以下の分子シミュレーションを実施した。

内容 伝熱面の濡れ性がナノ構造における蒸発現象や水滴の凝固過程や冷却時の熱抵抗に与える影響を分子動力学法を用いて調査した。またナノ粒子を含有する液体のエネルギー輸送機構に関しても分子動力学解析を用いて詳細な解析を行った。そのためにOCTOPUSを用いた。

結果 下図に撥水面上の水滴の凝固シミュレーションの結果の一例を示す。赤・緑色は結晶化した水分子を表している。水滴と伝熱面の接触箇所から核生成が始まり、その後、上部に結晶化が進行している様子が分かるが、その過程における界面熱抵抗の時間変化を求めて、その要因を明らかにした。



水滴の冷却・凝固過程における界面熱抵抗の分子シミュレーション