

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

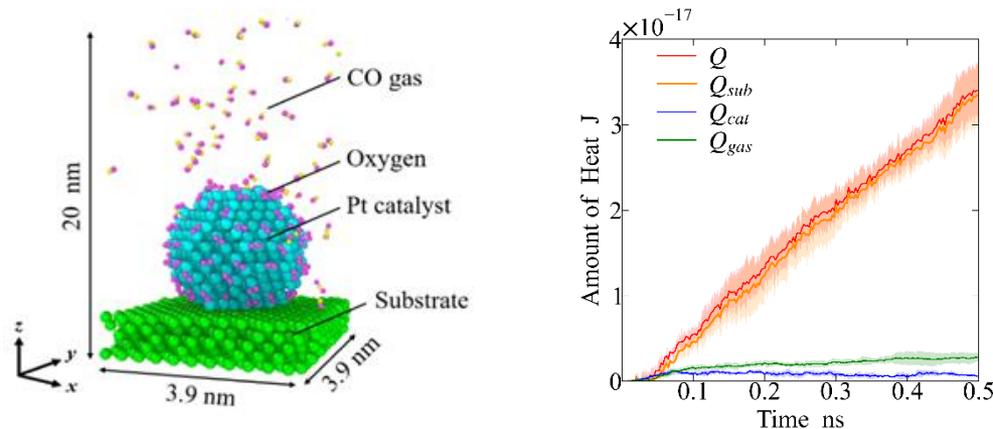
芝原正彦・植木祥高・藤原邦夫

(他 博士後期課程学生1名, 前期課程学生2名, 学部学生1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 伝熱面の濡れ性や微細構造が固液界面熱抵抗に与える影響を分子動力学法を用いて調査した. また担体と接する触媒ナノ粒子の反応に伴う温度上昇を分子動力学解析を用いて詳細に調べた. そのためにOCTOPUSを用いた.

結果 下図にニッケル担体上の白金触媒ナノ粒子近傍の熱分配量のシミュレーション結果の一例を示す. 右下図の赤色が触媒粒子への分配量, 橙色が担体への輸送量, 青色が触媒粒子の温度上昇に寄与する熱量, 緑色が気相への分配量を示しており, 触媒粒子への分配量のうち担体への輸送が支配的であることがわかる.



担体上の白金触媒ナノ粒子近傍への熱分配量シミュレーション