

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

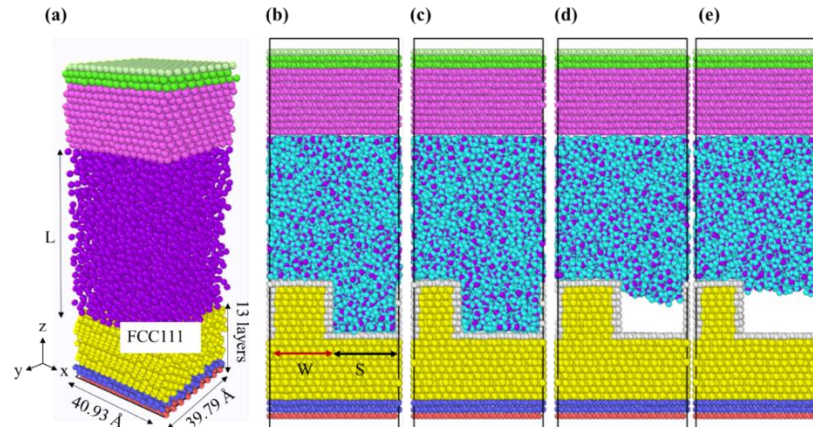
芝原正彦・藤原邦夫

(他 博士後期課程学生1名, 前期課程学生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 伝熱面の濡れ性やナノメートルスケールの微細構造が, 密度欠損長さと固液界面熱抵抗の関係に与える影響を分子動力学解析により調査した. また担体と接するナノ粒子の触媒反応に伴うエネルギー分配割合を分子動力学解析により詳細に調べた. そのためにOCTOPUSを用いた.

結果 下図にナノスリットを有する銅の伝熱面と水分子の接触状態の分子動力学シミュレーション結果の一例を示す. 同じ圧力下においても, 水分子と銅原子間の相互作用強さによって接触状態が変化していることが分かる. この接触状態の変化に依存する密度欠損長さと固液界面熱抵抗の関係を明らかにした.



ナノ構造を有する金属面における水の接触状態の分子シミュレーション