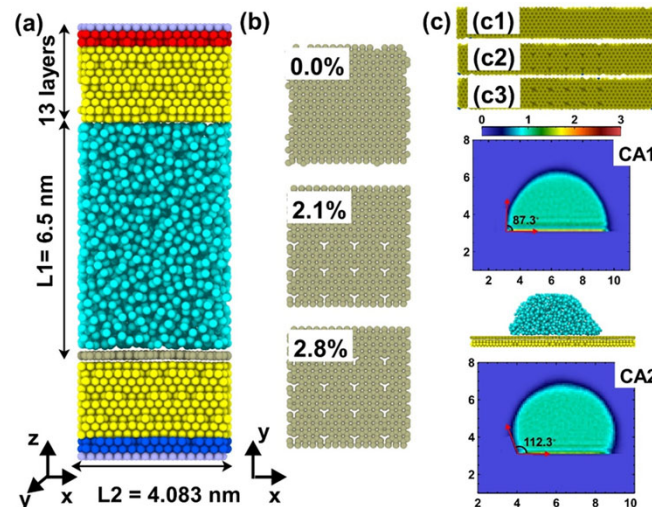


マイクロ熱工学に関する分子シミュレーション

大阪大学大学院 工学研究科 機械工学専攻

芝原正彦（他 博士後期課程学生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表面特性などを用い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 銅の伝熱面に施したグラフェンコーティングが、水滴の接触角や固液界面熱抵抗に与える影響を分子動力学解析により調査するためにOCTOPUS(LAMMPS)を用いた。
- 結果 下図にグラフェンコーティングを施した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モデル一例を示す(図(a)). グラフェンの格子欠陥密度(図(b))や水分子との相互作用強さの変化によって、水滴の接触角が変化することが分かった (図(c)). 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。



グラフェンコーティングを施した伝熱面における
水の接触状態と界面熱抵抗の分子シミュレーション