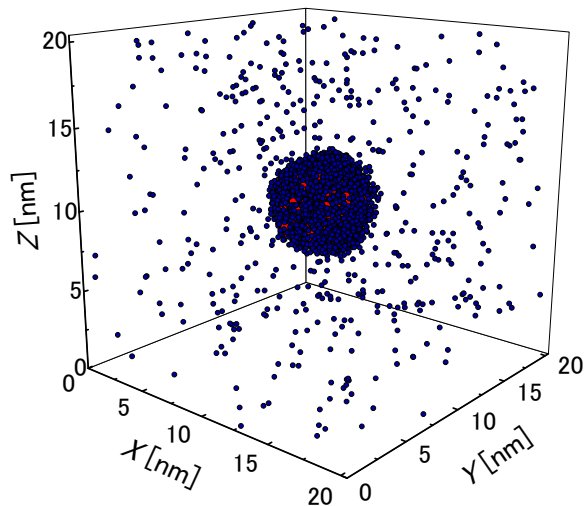


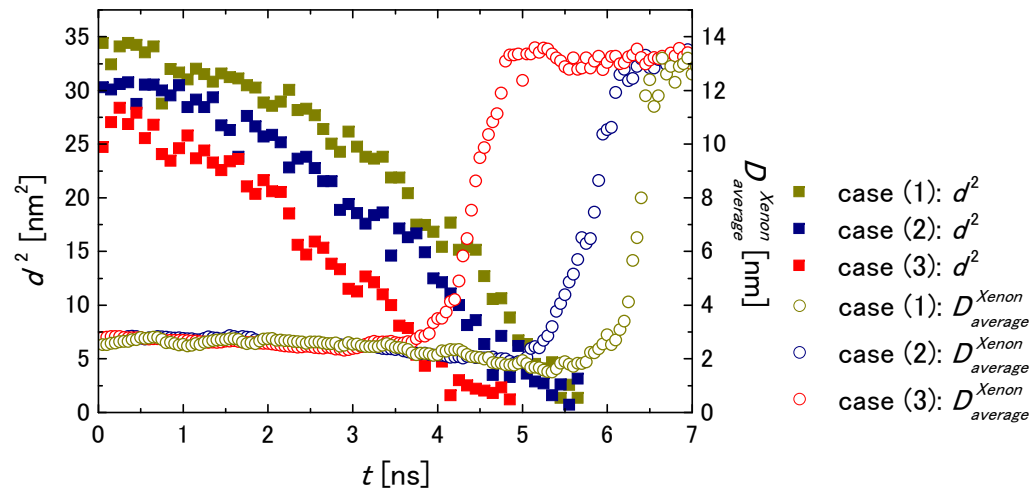
# 単一微小液滴の蒸発過程における 混合分子の挙動と影響に関する分子動学的研究

大阪大学大学院機械工学専攻 伊森大記

- 目的** ナノ・マイクロメートルスケールの大きさの単一混合液滴の蒸発過程に着目し、混合成分の含有量が液滴の蒸発過程及び蒸発速度に与える影響を非平衡分子動力学解析により調査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** 低沸点分子が主成分となる単一液滴内に高沸点分子を混合し、非平衡分子動力学解析を行うことで、蒸発シミュレーションを行った。そのため、大規模可視化対応PCクラスタを使用した。左下図に本研究で作成した単一混合液滴の一例を示す。
- 結果** 右下に蒸発シミュレーションを行った結果の一例を示す。本研究では、液滴直径から蒸発速度の算出を行った。また、単一混合液滴の蒸発速度と高沸点分子の液滴内個数と平均距離の関係が明らかになった。



単一混合液滴の計算モデル



単一混合液滴の蒸発速度と高沸点分子平均距離に関係