

ナノスケール熱輸送に関する分子動力学解析

九州工業大学 工学研究院機械知能工学研究系
長山暁子 (v60710)、CHEN Wentao (v60704)

目的 固液界面または固体表面の熱輸送メカニズムを明らかにする

内容 独自の計算コードと分子動力学計算ソフトウェアLAMMPSの両方を用いて、異なる厚さの水およびアルゴン液膜を解析し、固液界面におけるKapitza長さを求めた。また、二つの固体表面間におけるフォノン熱輸送を計算した。

結果 固液界面におけるKapitza長さは系の代表寸法に依存し、ナノオーダーからマイクロオーダーに変化する。また、ナノギャップを介したフォノン熱輸送は、原子表面終端または電場に依存する。

利用した計算機	SQUID 汎用CPUノード群
ノード時間	4000 時間
使用メモリ	30 GB
並列化	2ノード 並列