

流体中の分子現象解明

株式会社SCREENセミコンダクターソリューションズ 製品開発戦略部 藤原直澄

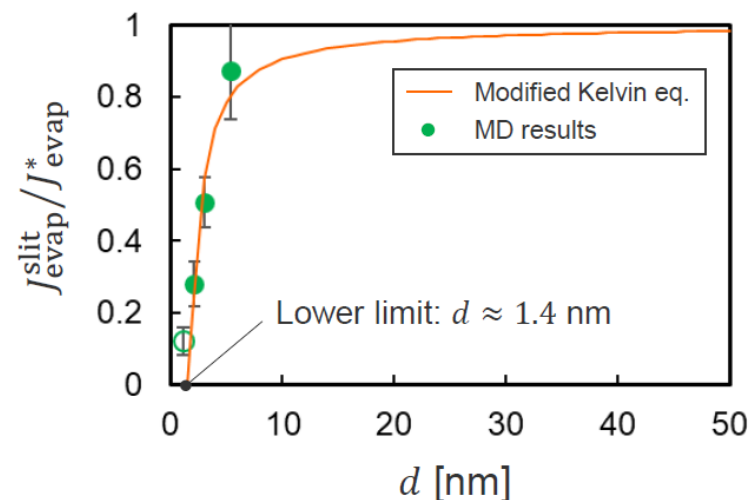
【目的】 ナノスリット内部からの液体の蒸発速度とスリット幅の関係調査

【内容】 ナノスリット内部からのイソプロピルアルコール（IPA）分子の蒸発速度をMD計算により解析し、スリット幅が数nmまで微細化した際の蒸発に与える影響を評価した。

【結果】 IPAの蒸発速度はスリット幅が10 nmより狭くなると低下していくことが明らかになった。この速度低下はKelvin方程式に従っており、マクロスケールの理論式がナノスリットのスケールにおいても適用できることが示された。

利用した計算機

- SQUID 汎用CPUノード群、GPUノード群
ノード時間 (CPU) 150837時間
SQUIDポイント 45074 points
使用メモリ 1621 GB
使用ソフト LAMMPS, Quantum ESPRESSO
Gaussian



スリット幅とIPA蒸発速度の関係