

気泡核の生成-成長過程の 分子動力学シミュレーション

■ 開発者

- 津田 伸一 (東大工)
- 高木 周 (東大工)
- 松本 洋一郎(東大工)

■ 概要

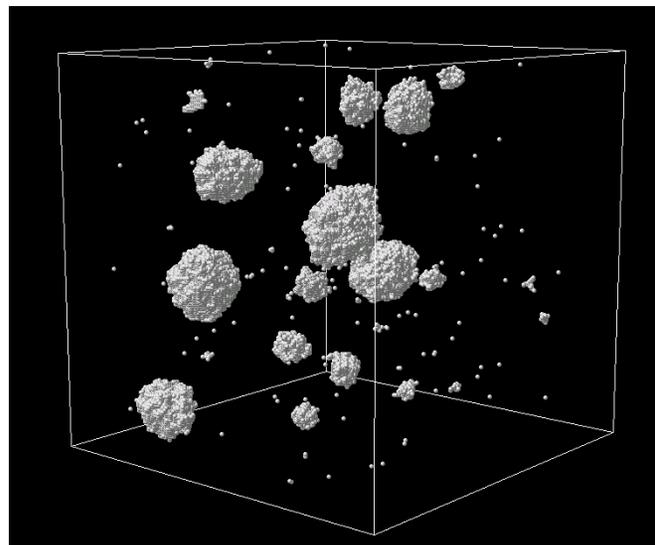
- キャビテーション気泡核の生成-成長過程の再現
- 対象:液体アルゴン
- 初期温度:87.5K, 初期圧力:-33MPa

■ アルゴリズム

- NVE(分子数, 体積, 全エネルギー)一定の分子動力学
- 差分法:Leap-Frog法
- 時間刻み:5fs

■ 計算規模

- 総分子数:702,464
- 計算領域:34nm × 34nm × 34nm
- 時間ステップ数:60,000(実時間で約300ps)



■ どんなことが期待されるか？

- 気泡核の生成-成長過程の解明
- 気泡核の崩壊過程の解明
- ナノバブルの安定性の解明 etc.