

卒業論文要旨

非線形拡散項を持つ反応拡散方程式を用いた MARIMO 生成シミュレーション
Simulation for nucleation of MARIMO with reaction-diffusion equation
having nonlinear diffusion term

1230269 松田佑都
Yuto Matsuda

MARIMO (Mesoporously Architected Roundly Integrated Metal Oxide) とは TiO_2 などを原料とし、臨界状態にあるアルコール中で生成される球状多孔体である。本研究では臨界環境下で MARIMO がどのように生成・成長するかをシミュレーションによって調べた。

本研究で用いたモデルは、物質の拡散および化学反応を記述する反応拡散方程式である。液体状態にある原料 A と生成物である固体 B を関数とし、反応拡散方程式

$$\begin{aligned}\dot{A} &= \nabla^2 \left(\frac{S+1}{B+1} \right) A - \frac{aAB}{1+M^2} \\ \dot{B} &= \nabla^2 B + \frac{aAB}{1+M^2}\end{aligned}$$

のシミュレーションを行った。ここで、 S は臨界状態にあるアルコールの効果、 M は MARIMO の成長を阻害する重力の効果である。この方程式を解いた結果、図 1 のような球状の MARIMO の生成が確認された。またこの結果に対し、比表面積の計算を行った。

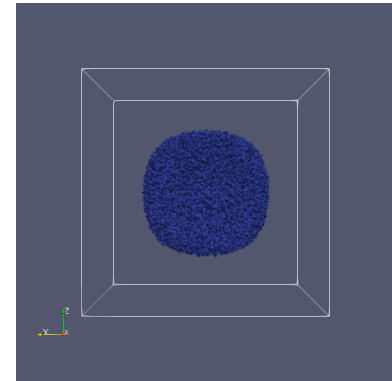


図 1: MARIMO 生成シミュレーション結果