

固体面上の液滴の非平衡分子動力学シミュレーション

Inequilibrium Molecular Dynamics Simulation of a Droplet in Contact with Solid Surface

伝正 丸山 茂夫 (東大工)
機正 山口 康隆 (東大工院)

機学 *倉重 俊武 (東大工院)

Shigeo MARUYAMA, Toshitake KURASHIGE and Yasutaka YAMAGUCHI
Dept. of Mech. Eng., The University of Tokyo, 7-3-1 Hongo, Bunkyo-ku, Tokyo 113

A liquid droplet in contact with a solid surface was studied by the molecular dynamics method. The liquid droplet and the surrounding vapor were composed of Lennard-Jones molecules and two solid surfaces on top and bottom of calculation domain were prepared with 3 layers of harmonic molecules. After preparing two liquid droplets on each surface, the temperature difference between two surfaces was introduced by controlling the temperature of solid surfaces using the phantom molecule technique. Hence, condensation on cold surface and evaporation on hot surface proceed at the same time with little change of vapor pressure. Even though the effects of surface temperature and droplet size on the contact angle were negligible, the droplet on condensation side had significantly smaller contact angle.

Key Words: Molecular Dynamics Method, Vaporization, Condensation, Heat Transfer

1. はじめに

固体面に接触する微小液滴に関して、既報において、壁面の表現として一層の固定分子、このポテンシャルを積分した一次元壁面関数、あるいは3層のバネマス分子のいずれを用いた場合にも、壁面分子がつくるポテンシャルの深さによってその接触角が整理できること^(1,2)が分かり、さらに液滴の2次元密度分布に現れる層状の構造や層内の分子の動的挙動についての検討を行った⁽³⁾。本報では、マクロな液滴への拡張を考慮して液滴のサイズの影響、温度の影響を検討するとともに、液滴が蒸発・凝縮する場合の液滴の濡れの様相と熱伝達について検討した。

2. 分子動力学法シミュレーション

液滴とその周りの蒸気は Lennard-Jones 分子とするが、その直感的な理解のためアルゴン分子であると仮定し、質量 $m_{AR} = 6.636 \times 10^{-26}$ kg とし、Lennard-Jones ポテンシャル $f(r) = 4e_{AR} [(s_{AR}/r)^{12} - (s_{AR}/r)^6]$ のパラメータはそれぞれ $s_{AR} = 3.40$ Å, $e_{AR} = 1.67 \times 10^{-21}$ J とする。固体面は fcc の(111)面となるように配置した1層の固定分子を積分した一次元壁面関数⁽³⁾を大きなサイズの系の計算に用い、壁面の温度効果を考える場合には3層のバネマス系分子で近似し、白金を想定して最近接分子間距離 $s_S = 2.77$ Å, 質量 $m_S = 32.39 \times 10^{-26}$ kg, バネ定数 $k = 46.8$ N/m とした。また、アルゴン分子と固体表面分子との相互作用については、L-J型の分子間ポテンシャルを仮定し、このポテンシャルのパラメータ s_{INT} , e_{INT} は既報において代表的な濡れ特性を示す値、 $s_{INT} =$

3.085 Å, $e_{INT} = 0.575 \times 10^{-21}$ J とした。ただし、本研究では一次元関数の場合にも三層分を与えており、既報⁽¹⁻³⁾の一層のみをおいた計算とは若干条件が異なる。

3. 液滴サイズの影響

本研究の結果をマクロな現象と比較するためには液滴サイズの影響についての検討が不可欠である。ここでは簡単のために壁面を一次元関数で表した場合の液滴の大きさの影響を検討した。図1に計算した最大の液滴の2次元密度分布とポテンシャル分布を示す。この計算では1944個のアルゴン分子を用いており、温度は92 K、局所ポテンシャルから判断した液滴分子数は1600個程度で、液滴上部では殆ど層状構造が見えない程度の大きさである。既報⁽¹⁻³⁾と同様

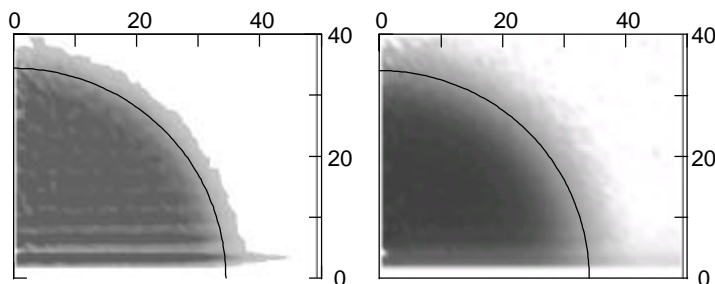


Fig. 1 Two dimensional density and potential distributions and fitted circles for the contact angle (1944 molecules in $133 \times 126 \times 145$ Å box, $T = 92$ K).

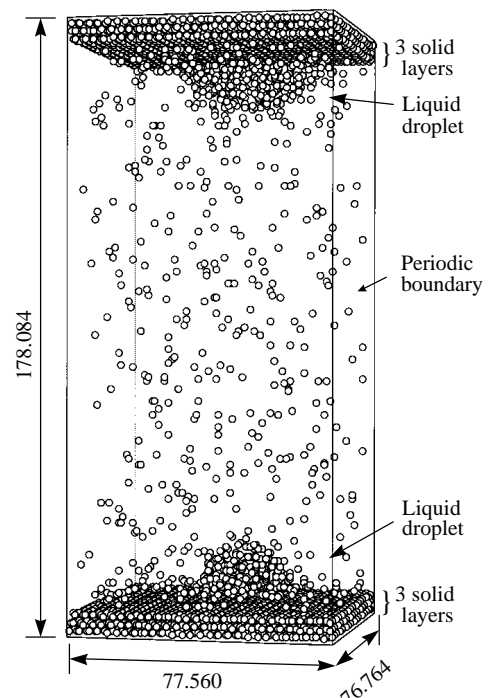


Fig. 2 A typical snapshot of the inequilibrium droplets on solid surfaces

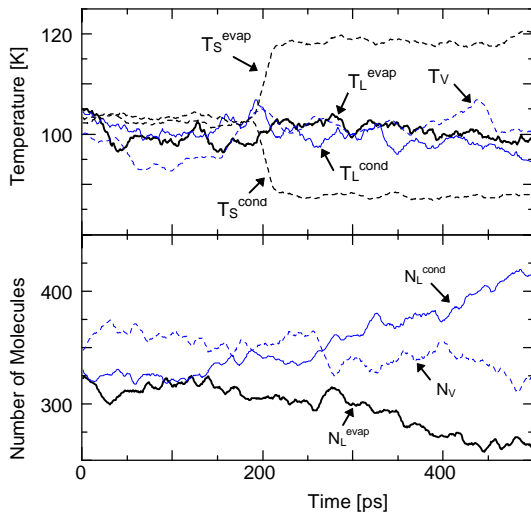


Fig. 3 Temperature variation of droplets and surfaces.

に壁面近傍の第一層分を除いて円を最小二乗近似し接触角を求めると、密度分布、ポテンシャル分布いずれも 90.0° となる。また液滴サイズを変えて計算した結果、液滴を構成する分子数が 150 個程度以上あれば同様の接触角を示すことを確認した。

4. 平衡状態の実現と接触角

固体壁の熱的影響を考慮したシミュレーションの概要を図 2 に示す。上下壁とも 3 層の固体分子で表現し、それぞれに液滴が付着する。壁面の温度制御には 4 層目以降の分子の運動を代表する phantom 分子を 3 層目の分子の下に配置し、この運動が強制的に目標温度でのボルツマン分布となるように制御した⁽⁴⁾。具体的には、phantom 分子と 3 層目の分子とは上下方向にバネ定数 $2k$ 、水平 2 方向に $0.5k$ のバネで結ぶ。この phantom 分子について、座標原点に対して上下方向にバネ定数 $2k$ 、水平 2 方向には $3.5k$ のバネで結び、減衰定数 $a = 5.184 \times 10^{-12}$ [kg/s] のダンパーで減衰力を与え、更に、標準偏差 $s_F = \sqrt{2ak_b T / Dr}$ (k_b は Boltzmann 定数) の正規分布に従うランダムな力 F を差分の時間刻み Dr 毎に 3 方向からそれぞれ与える。この手法により、4 層目以降に白金の phonon 伝搬速度で熱の授受を行い、かつ一定温度に保たれた熱浴を擬似的に実現する。

あらかじめ上下壁面分の固体のみを一定温度で平衡させたものと、同一温度で次元関数の固体境界を用いて平衡させた液滴とを合成して、さらに 200 ps の間、上下壁面温度一定条件で計算を行い平衡状態を得た。具体的な計算条件とこのときの接触角を表 1 に示す。接触角に関する温度の影響を検討するために、3 通りの温度に関して計算を行ったが、この範囲で見ると温度変化に対する接触角の変化は認められなかった。

Table 1 Calculations for the equilibrium condition.

Label	T_c [K]	N	N_{liq}	q_{DNS}		q_{POT}	
				(deg)	(deg)	(deg)	(deg)
				Top	Bottom		
EQ90	90	800	285-307	93.4	93.3	91.7	91.1
EQ100	100	1000	313-338	84.2	84.7	91.4	88.9
EQ110	110	1200	310-372	87.4	83.8	87.8	88.8

5. 凝縮・蒸発を伴う液滴

上記 4 節で計算した EQ100 の平衡状態を初期条件とし、下面を 115 K、上面を 85 K とした場合の挙動について検討

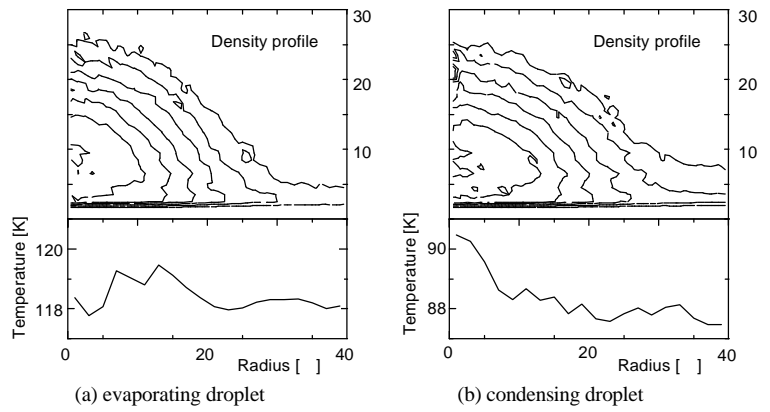


Fig. 4 Potential distributions of droplets and temperature profiles of solid layers in contact with droplets

した。これによって下の壁面では蒸発が、上の壁面では凝縮が同時に起こる。このときの蒸発側 (evap.) 凝縮側 (cond.) の壁面 (S)、液滴 (L)、蒸気 (V) の各温度と分子数の変化を図 3 に示す。200 ps 後にステップ的に上下壁面に温度差を与えた直後は、上下面ともに過渡的な熱伝達過程を辿るが、次第に一定熱流束の準定常的な熱伝達に至り、上下液滴の分子数が時間とともに緩やかに変化するようになる。この間、蒸気分子数の変化が比較的小さいことから、系の圧力はおおよそ一定となっていることが分かる。上下壁面に温度差を与えた後も、液滴の温度変化は上下とも極めて小さいが、これは固液間熱抵抗が液体内部、気液間の熱抵抗に対して極めて大きいためであると考えられる。また、このときの下面から上面への熱流束は、中間の蒸気部分での測定により 24 MW/m^2 であった。

200 ps で上下壁面に温度差を与えて以降、おおよそ過渡的な熱伝達が収まった準定常的な状態での液滴の形状を 300 ps から 500 ps までの 200 ps の間の平均値から求めた。蒸発の進行する下面での液滴、凝縮の進行する上面での液滴それぞれのポテンシャル分布の等高線、および液滴に接する固体面一層の液滴半径方向の温度分布を図 4 (a,b) に示す。定常状態での液滴形状と比較して、蒸発側の液滴ではその形状にあまり違いが見られないが、凝縮側の液滴では接触角が 10° ほど小さく、明らかに扁平なかたちをとっているのが分かる。ここで、固体壁面の温度に注目すると、蒸発側では温度分布が比較的フラットであるのに対し、凝縮側では液滴中心付近で周辺と比較して温度が高くなっている。このことから、凝縮側では液滴周辺部での凝縮速度が速いため周辺で液体が成長し、見た目の接触角が小さくなるものと考えられる。

文献

- (1) S. Matsumoto, S. Maruyama and H. Saruwatari, Proc. ASME · JSME Thermal Engng. Joint Conf., 2 (1995) 557.
- (2) 丸山・他 2 名, 第 32 回日本伝熱シンポジウム講演論文集 (1995) 829.
- (3) 丸山・他 2 名, 第 33 回日本伝熱シンポジウム講演論文集 (1996) 317.
- (4) J. Blömer & A.E. Beylich, Proc. of International Symp. On Rarefied Gas Dynamics (1996), submitted.