

高温固体面に衝突する微小液滴の分子シミュレーション

A Molecular Dynamics Simulation of Liquid Droplet Impinging on a Hot Solid Surface

正 丸山 茂夫 (東大工) 正 大西 良孝 (住友重機械)
学 木村 達人 (東大院)

Shigeo MARUYAMA, Eng. Res. Inst., The University of Tokyo, 2-11-16 Yayoi, Bunkyo-ku, Tokyo 113-8656
Yoshitaka OHNISHI, Sumitomo Heavy Industries, Ltd, 63-30, Yuhigaoka, Hiratsuka-shi, Kanagawa 254-0806
Tatsuto KIMURA, Dept. of Mech. Eng., The University of Tokyo, 7-3-1 Hongo, Bunkyo-ku, Tokyo 113-8656

Key Words : Molecular Dynamics Method, Liquid Argon, Lennard-Jones

1. はじめに

高温固体壁面に対して微小液滴が接触や衝突するときの挙動は、例えば鋼材冷却における膜沸騰崩壊やリウエットの引き金となる現象に関連してきわめて興味深いとともに、その制御が可能であれば工業的に重要な応用が考えられる。しかしながらミクロな状態での現象解明は容易でないとともに、固体表面状態などは実験的にはコントロールしにくい。そこで固体面に微小液滴が衝突する場合の挙動を、分子動力学法シミュレーションを用いて明らかとすることを試みた。この第一段階として、単純なアルゴン分子よりなる液滴が高温金属表面に衝突する場合について、衝突速度と壁面温度をパラメータとして、どのような現象が起こるかを検討した。

2. 計算方法

本報では、下面にアルミを想定した固体壁面を配置し、上面を鏡面、四方側面を周期境界条件とした系(Fig.1 参照)を考える。気体と液体のアルゴン分子間ポテンシャルは、Lennard-Jones ポテンシャル $\phi(r) = 4\epsilon \{(\sigma/r)^{12} - (\sigma/r)^6\}$ で表現し、質量 $m_{Ar} = 6.636 \times 10^{-26}$ kg、パラメータはそれぞれ $\sigma_{Ar} = 3.40$ Å, $\epsilon_{Ar} = 1.67 \times 10^{-21}$ J とした。アルミ壁面は fcc (111)面のバネマス 3 層(1 層 1440 個)とし、質量 $m_{Al} = 4.48 \times 10^{-26}$ kg、最近接分子間距離 $r_{Al} = 2.86$ Å ($\sigma_{Al} = 2.55$ Å)、バネ定数 k はアルミのヤング率 E_{Al} と r_{Al} を用いて、 $k = E_{Al}r_{Al} = 20.1$ N/m とした。また、壁面分子の外側には温度一定のボルツマン分布に従う phantom 分子を配置し、一定温度に保たれた熱浴を擬似的に実現した^(1,2)。アルミ原子とアルゴン分子とのポテンシャルも Lennard-Jones ポテンシャルで表現し、そのパラメータをそれぞれ σ_{Ar-Al} , ϵ_{Ar-Al} とした。アルゴン分子とアルミ原子間のポテンシャルパラメータの決定に関しては、当面、強引に Lorentz-Berthelot 法を適用して、 σ_{Ar-Al} は $(\sigma_{Al} + \sigma_{Ar})/2 = 2.975$ Å とし^(3,4)、エネルギーのパラメータ ϵ_{Ar-Al} については、実験的に検討されているキセノン分子とアルミ原子とのエネルギースケール^(3,4) $\epsilon_{Xe-Al} = 3.45 \times 10^{-21}$ J と $\epsilon_{Xe-Xe} = 3.15 \times 10^{-21}$ J を用いて、 $\epsilon_{Ar-Al} = 2.45 \times 10^{-21}$ J とした。

運動方程式の数値積分にはベルレの蛙飛び法を用い、時刻は 5 fs とした。

初期条件として $102.96 \times 99.07 \times 157.0$ Å の計算領域の中央に 2048 個のアルゴン分子を fcc 構造で配置し、最初の 100 ps の間、設定温度(100 K)に応じた速度スケリングによる温度制御を行った後、phantom による温度制御のみによる温度制御を行った。このとき、壁面温度は 100 K にして、系が平衡状態となるのに十分な時間である 1000 ps の間液滴を速度制御して初期条件を作成した。その後、phantom による温度設定を所定の壁温 T_w とすると同時に液滴に速度を与えて壁面に衝突させた。初期速度は簡単のため、気体、液体に関わらずアルゴン分子全部に加えた。

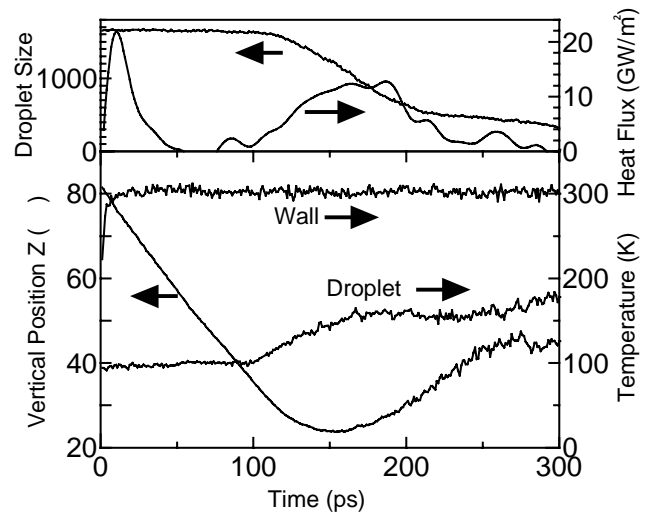


Fig.2 Variations of vertical position of droplet, temperature of droplet, wall temperature, droplet size and wall heat flux for $V = 50$ m/s, $T_w = 300$ K

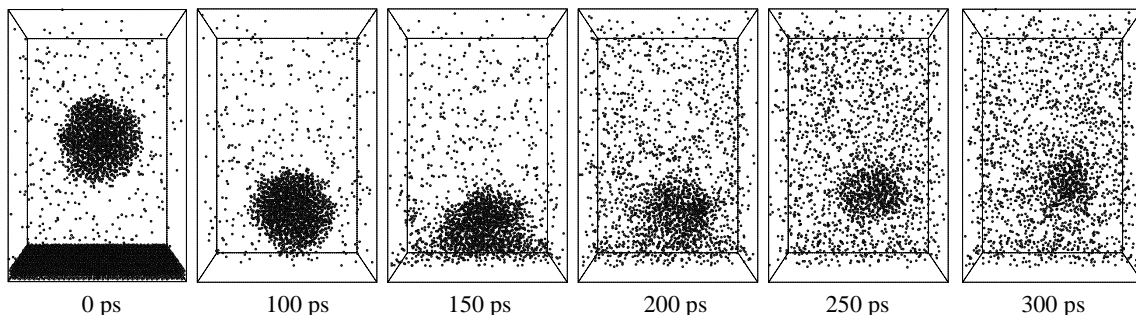


Fig.1 Snapshots of impinging droplet for $V = 50$ m/s and $T_w = 300$ K.
Note that Al wall atoms are shown only for the initial condition (0 ps) for clarity.

Table 1 Calculation conditions and observed phenomena.

		Wall Temperature				
		100 K	300 K	500 K	800 K	1000 K
Velocity	10 m/s (0.24 K)	Stick	Mig.	Mig.	Mig.	Mig.
	50 m/s (6 K)	Stick	Jump	Jump	Mig.	Mig.
	100 m/s (24 K)	Stick	Jump	Jump	Jump	Jump
	500 m/s (601 K)	Evap.	Evap.	Evap.	Evap.	Evap.

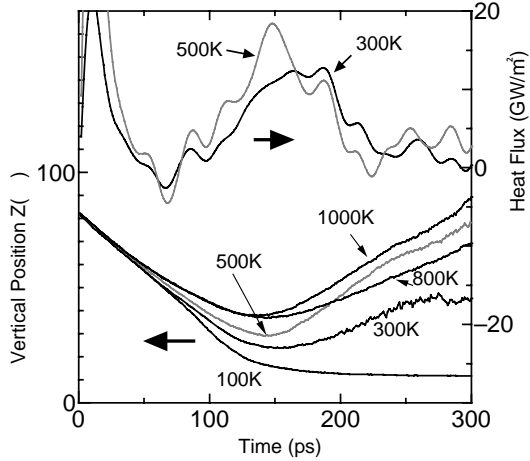


Fig.3 Dependence of trajectories on wall temperature for $V = 50$ m/s.

3. 結果と考察

典型的な衝突シミュレーション結果のスナップショットを Fig. 1 に示す。アルゴン液滴が高温のアルミ壁面に近づく急激に蒸発が起こり、ライデンフロスト現象と同様に発生した蒸気によって跳ね返される。このときの液滴重心位置、サイズ(分子数)、温度、壁温と壁面熱流束を Fig. 2 に示す。ここで、液体中と気体中ではポテンシャルが大きく異なることに着目し、アルゴン分子に加わるポテンシャルから壁面のアルミ原子からの寄与を除いた値が適当な数値(-0.003 ϵ_{Ar})未滴であればアルゴン液滴をなす分子であると判定して液滴を定義した。また、phantom 分子に対する制御量から系へのエネルギー授受が測定でき、これの時間微分を壁面の面積で除したものを壁面熱流束とした。マクロな意味では、等温壁面とするために加えた熱流束と考えられる。なお、Fig. 2 の最初の 50ps の間の熱流束のピークは phantom 分子の設定温度を 100 K から 300 K に変化させる間の過渡応答であり液滴衝突とは無関係である。およそ 100 ps の時点で液滴が壁面に接すると液滴の温度上昇、蒸発と液滴の減速が開始し、液滴サイズや冷却の熱流束として測定される。液滴の温度上昇は極めて急激で液滴が上昇を始める 150 ps の頃にはおおそアルゴンの臨界温度に近い 150 K 程度まで上昇している。この間の蒸発も極めて急激で、主にこの蒸発潜熱による壁面熱流束は瞬間最大 10 GW/m² にも達する。

本報では、液滴衝突速度と壁面温度によってどのような現象が起こるかを捕らえるために Table 1 に示すように広範囲に衝突速度と温度とを変化させた。なお、衝突速度には温度換算したアルゴン分子あたりの衝突運動エネルギー $m_{Ar} V^2 / (2k_B)$ を併記した。また、Fig. 1 に示すような現象観察によって、“Stick”は液滴が壁面表面上に吸着した場合、“Mig.”は熱泳動によって壁面より手前で跳ね返った場合、“Jump”は、Fig.1 の場合のように壁面に衝突後跳ね返った場合、“Evap.”は、壁面に衝突と同時に蒸発した場合を示す。

衝突速度を 50 m/s として壁面温度を変えた場合の液滴の z 方向位置と熱流束を Fig.3 に示す。液滴が壁面に接する 100 ps 程度以前の液滴接近速度は、壁温が高いほど小さくなり、熱

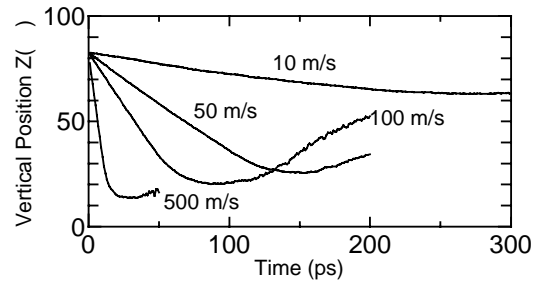


Fig.4 Dependence of trajectories on collision velocity for $T_w = 300$ K.

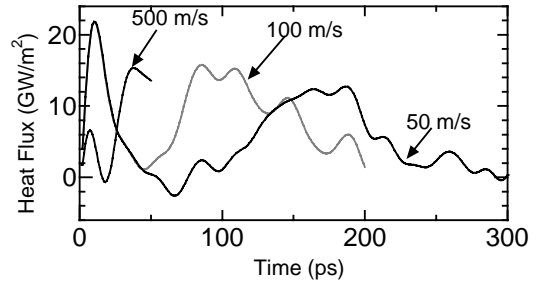


Fig.5 Dependence of heat flux variation on collision velocity for $T_w = 300$ K.

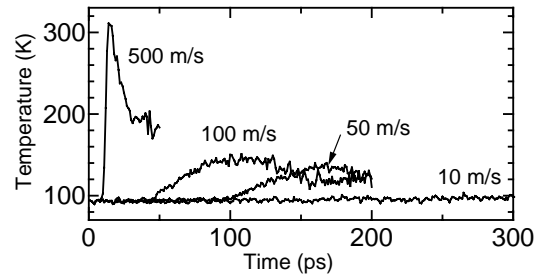


Fig.6 Dependence of droplet temperature variation on collision velocity for $T_w = 300$ K.

泳動による加速度が加わっていることがわかる。Fig. 1 に示した 300 K の場合よりも高温壁面の場合 (800 K と 1000 K) はこの力によって壁面との直接接触をすることなく跳ね返ってしまっていることがわかる。一方、十分低温の 100 K の場合にはアルゴンが蒸発することもなく単純に壁面に付着している様子が液滴重心位置からわかる。壁面熱流束は T_w が 300 K や 500 K で衝突後に跳ね返る場合に液滴が壁面近傍に近づいた時に最大となる。

壁面温度を 300 K で一定として衝突速度を変化させた場合の重心位置変化を Fig. 4、熱流束を Fig.5、液滴の温度変化を Fig. 6 にそれぞれ示す。衝突速度の小さい 10 m/s の場合には前述の熱泳動によって衝突以前に跳ね返り相変化や熱伝達にはほとんど寄与しない。壁面で跳ね返る 50 m/s と 100 m/s を比較してみると衝突速度が大きい方がより壁面の近傍まで接近するため、より急激な相変化と熱流束を与えることがわかる。一方、衝突速度が極めて大きい 500 m/s の場合には、壁面への衝突と同時に液滴重心の並進運動エネルギーの相当量が温度に変換されて瞬間的に液滴全体が蒸気となってしまう。Table 1 の換算温度からわかるように 500 m/s (601 K) の場合には壁温に依らず自らの衝突速度によって極めて瞬間的な蒸発に至っていることがわかる。

参考文献

- (1) 丸山・木村, 機論, **65**-638 B, 225-231 (1999).
- (2) Blömer, J. & Beylich, A. E., *Surf. Sci.*, **423**, 127-133, (1999).
- (3) Sebastian, G. et al., *Solid State Comm.*, **104**-9, 559-564 (1997).
- (4) Ramirez, R. et al. *Surf. Sci. Lett.*, **296**, L27 (1993).