

ミクロスケールの投射物に対する 薄い液膜の MD シミュレーション

Response of Thin Liquid Film to Microscale Projectiles: MD Simulation

○ 松本 充弘, 京都大・工, 京都市西京区京都大学桂 C3, 京都 615-8540, E-mail : matsumoto@kues.kyoto-u.ac.jp
中谷 俊洋, 京都大・工, 京都市西京区京都大学桂 C3, 京都 615-8540

Mitsuhiro Matsumoto, School of Engineering, Kyoto University, Kyoto 615-8540
Toshihiro Nakatani, School of Engineering, Kyoto University, Kyoto 615-8540

To investigate the dynamic response of thin liquid film against microscale projectile impingement, we carried out a series of molecular dynamics simulation. The particle interaction in the liquid is modeled with the Lennard-Jones (LJ) potential. A rigid spherical projectile with a similar LJ-type interaction is impinged on a thermally equilibrated thin liquid film, and its trajectory and velocity change are monitored. As expected, a projectile with sufficiently large momentum can penetrate the film; the intrusion depth is essentially proportional to the initial momentum, which suggests that the impulse received from the film comes from drag by the surrounding liquid. When impinged with a slant angle, the projectile also receives resistance parallel to the film due to rippling.

1. はじめに

シャボン玉に代表されるように、薄い液膜の物性を利 用したさまざまな例が知られている。最近でも、たとえば“泡 foam”による衝撃吸収のメカニズムに関する研究が報告されている⁽¹⁾。これは、爆発によって飛散する高速の微粒子を多層の液膜 [文献⁽¹⁾では bamboo foam と称されている] で受け止めることで無力化するというものである。本研究では、小さな投射粒子が一枚の薄い液膜に高速で衝突する際の現象を、分子動力学 (MD) シミュレーションで解析した例を報告する。

2. 計算方法

計算負荷を軽減するため、単原子分子モデルである Lennard-Jones(12-6) 型の相互作用、式 (1), をする粒子系からなる薄液膜を対象として、分子動力学 (MD) 計算を行った。

$$\phi(r) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^6 \right] \quad (1)$$

以下、エネルギー パラメタ ϵ 、サイズ パラメタ σ 、および粒子質量 m を基本単位として物理量をあらわす。用いている LJ 液体をおおまかに水の物性に合わせると、各単位の値を表 1 のように決めることができる。

2.1 計算系

図 1 に示すように、円柱状の計算セルの中央部に円盤状の液膜を置き、少し離れた位置から“微粒子”をある初速度で投射するという計算である。

円柱の中心軸方向 (z 方向) には周期境界条件を課す。半径方向はポテンシャル壁とし、壁と接している粒子の

Tab. 1: Units of simulation system and values corresponding to water.

	Unit in simulation	Value for water
Length	σ	0.276×10^{-9} m
Energy	ϵ	5.75×10^{-21} J
Mass	m	3.00×10^{-26} kg
Temperature	ϵ/k_B	410 K
Time	$\tau = \sigma \sqrt{m/\epsilon}$	0.630×10^{-12} s
Velocity	$\sigma/\tau = \sqrt{\epsilon/m}$	440 m/s

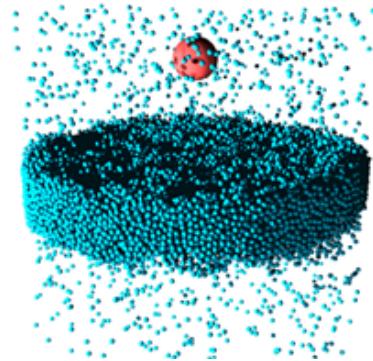


Fig. 1: Simulation system of thermally equilibrated liquid film with a rigid projectile (shown as a red sphere).

位置を固定することで、投射物の衝突により液膜が並進移動することを防いでいる。投射物も同じく LJ 相互作用をもつ剛体球とし、そのサイズと質量をさまざまに変えて計算を行った。ただし、エネルギー パラメタは ϵ のままでし、“濡れ性”に関する検討は行っていない。

2.2 計算条件

約 30,000 個の LJ 粒子により液膜を構成し、無次元温度 0.72 (LJ 流体系の三重点温度 ~ 0.67 よりやや高温) で平衡化を行った。これにより、半径約 35σ 、厚さが約 10σ の薄液膜が作成された。投射物 projectile は、直径 σ_p 、質量 m_p の LJ 粒子であり、中心軸上で液膜表面から 20σ 程度離れた位置から、初速度 V_0 で液膜に投射する。MD 計算の時間刻みは V_0 の大きさに応じて適切な値に設定した。

さまざまなパラメタの組み合わせについて計算を行ったが、ここでは主に次の計算条件についての結果を報告する：

- 投射物サイズ：主として $\sigma_p = 9.0\sigma$ 。一部はもっと小さいもの。
- 投射物の質量： $m_p = 100 m \sim 1,000 m$ 。
- 投射速度： $V_p = 1.0 \sim 20.0$ 。
- 投射角度：主として液膜表面に垂直入射。一部は斜め入射。

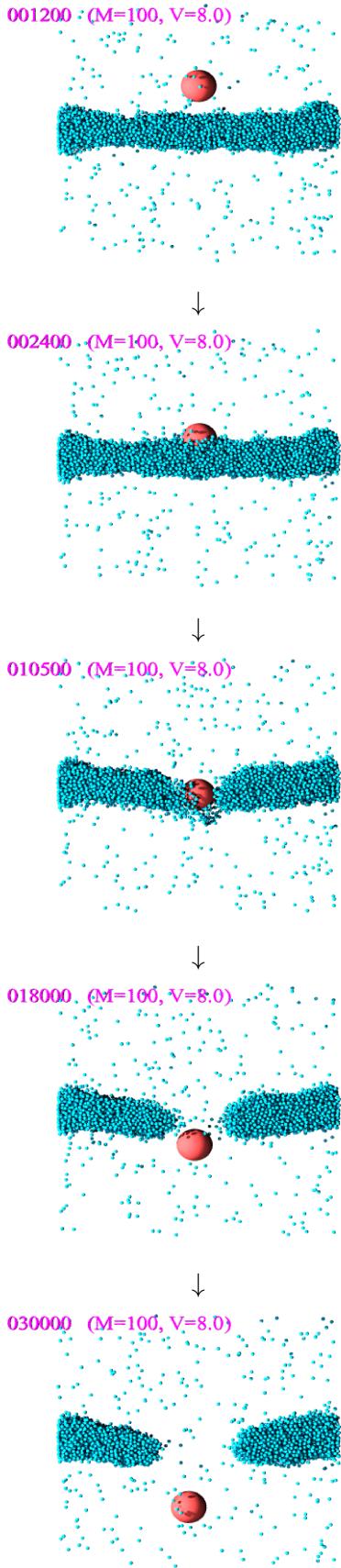


Fig. 2: Example of thin liquid film responding to a solid projectile; sectional views. $m_p = 100$, $V_p = 8.0$, vertical impingement case.

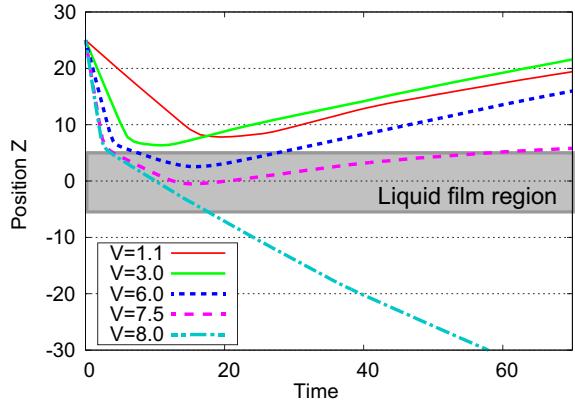


Fig. 3: Example of projectile trajectories; $m_p = 100$, vertical impingement case. The shadow area represents the liquid film.

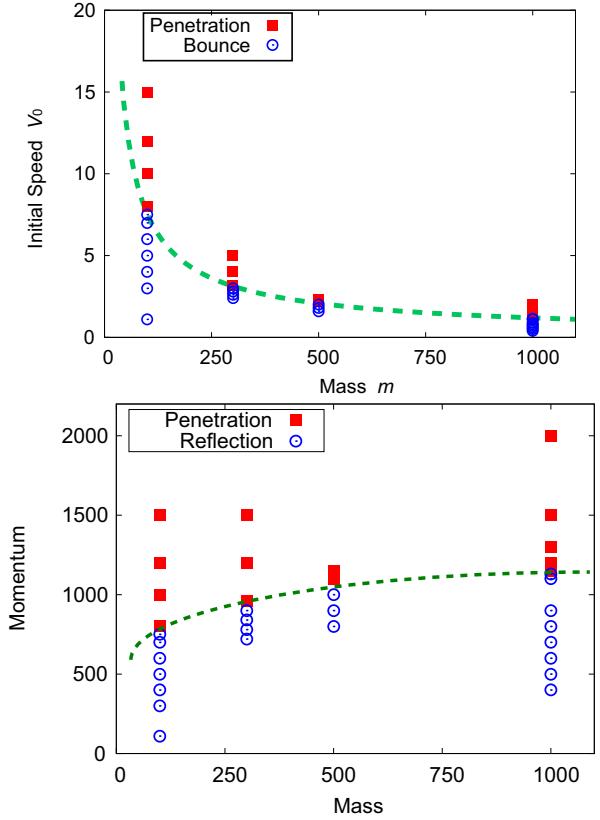


Fig. 4: Summary of projectile behavior for vertical impingement cases, plotted on (m_p, V_p) space (top) and on $(m_p, m_p V_p)$ space (bottom). The threshold shown with dotted curve is a guide to the eye.

3. 結果と考察

3.1 液膜透過

予想されるように、投射粒子の初速度が十分に大きいと、粒子は液膜に穴を開けて透過する(図 2)。初速度が小さいと、液膜によって跳ね返される。図 3 に、 $m_p = 100$ の場合の軌跡(z 座標の時間変化)を例として示すが、 $V_p \leq 7.5$ では反跳、 $V_0 \geq 8.0$ では透過した。なお、表 1

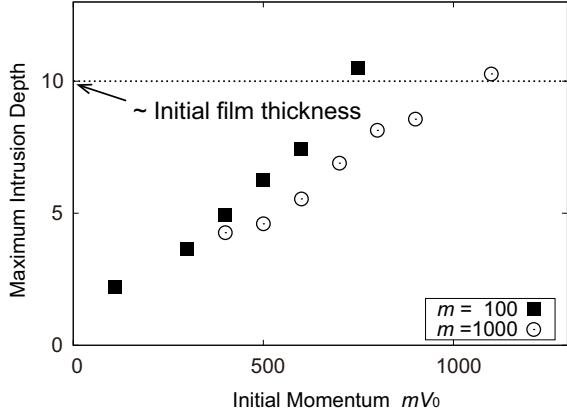


Fig. 5: Intrusion depth depending on the initial momentum; vertical impingement cases.

の LJ パラメタの値を使うと, $V_0 = 8.0$ は約 3500 m/s に相当する.

液膜透過と跳ね返りの挙動を, (m_p, V_p) 条件および $(m_p, m_p V_p)$ 条件で整理してプロットしたものが図 4 である. 初期運動量への依存性は弱いことがわかる.

3.2 液膜への侵入深さ

液膜を透過するかどうかは液膜の厚さに依存するため, 客観的な指標ではない. そこで, 投射物が液膜に侵入する最大深さを調べた(図 5). 侵入深さは初期運動量にはほぼ比例することがわかる. 当然ながら, 侵入深さが膜厚程度となるところで液膜透過に移行する. したがって, 図 5 のようなデータ整理により透過 / 跳ね返りの条件を調べることが可能となる.

3.3 液膜による投射物の減速メカニズム

石鹼膜を用いたマクロスケールの実験⁽¹⁾では, 投射物は液膜が大きく変形することによる“トランポリン効果⁽²⁾”によって減速すると結論づけられている. 他方, 本研究のような分子スケールの液膜への衝突では, 投射物が高速であるために液膜の変形はそれほど大きくなく, 液膜通過時の流体抵抗が支配的となるようである. したがって, 液膜の表面張力は重要なパラメタとはならない.

投射物の減速挙動について, 流体中の球にはたらく Stokes 抗力を使った簡単な運動方程式モデルをたてると

$$m_p \ddot{z} = -2\pi\eta\sigma_p \dot{z} \quad (2)$$

これより, 最大侵入深さ d_{max} は

$$d_{max} = \frac{m_p V_p}{2\pi\eta\sigma_p} \propto m_p V_p \quad (3)$$

と見積もることができ, 図 5 の結果をほぼ説明できることがわかる.

3.4 斜め入射

質量 $m_p = 100 m$ の場合について, 斜め入射の計算を行った. 入射角 45° の例を図 6 に示す. 局所的に液膜が大きく変形し ripple を生じる様子が見られた. この変形によって, 膜面に平行方向の速度も影響を受ける(減速する)ことがわかる. これにより, 入射角と反跳角に大きな差が生じることになる. 図 7 に示すように, 反跳角は入射角にあまり依存せず, かなり大きい.

3.5 液膜の不安定性

投射物が液膜を透過したのちの液膜の振る舞いに注目する. 投射物のサイズが液膜厚さのオーダーよりも大きい場合には, 液膜は破断に至ることが, 簡単な表面張力

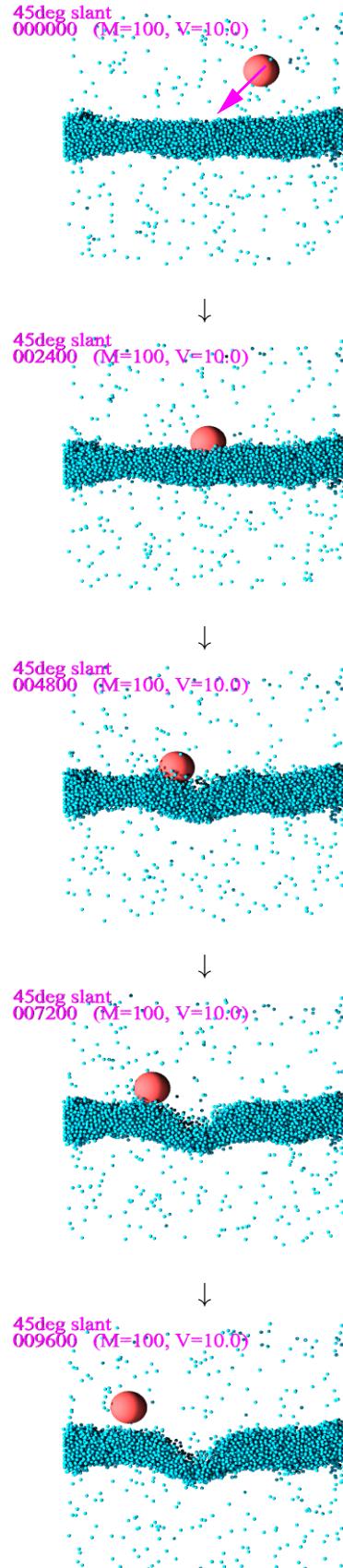


Fig. 6: Impingement with 45° slant; $m_p = 100 m$, $V_p = 10.0$ case. The arrow indicates the impinging direction.

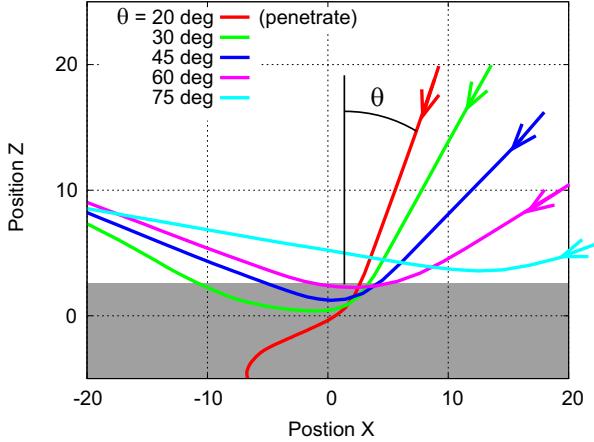


Fig. 7: Trajectory of impinged projectiles with different slant angle. The initial speed is constant, $V_p = 10.0$.

(表面自由エネルギー)の議論から予想される⁽³⁾。図 2 はその典型例である。他方、投射物のサイズが液膜厚さよりも十分に小さい場合には、透過後の液膜の“孔”は自発的に塞がることが予想される。

投射物のサイズ(直径)が液膜厚さの $1/7$ 程度(直径 $\sigma_p = 1.5\sigma$, 液膜厚さ $\simeq 10\sigma$)の場合に、投射物が液膜を透過したあとの様子を図 8 に示す。予想通り、透過後の“孔”が自発的に塞がっている。液膜に開いた孔の最小半径の時間変化の例を図 9 に示す。投射物サイズに対する液膜の安定/不安定の threshold は比較的明瞭である。もちろんこの threshold は投射物の運動量 $m_p V_p$ にも依存する。

4.まとめ

分子動力学法を用いて、ミクロスケールの液膜に剛体投射物が衝突する際の挙動を調べた。巨視的スケールでは液膜の大変形が重要になる(トランポリン効果)のにに対して、ミクロスケールでは、十分高速な投射物に対して液膜の流体抗力が支配的であり、液膜の変形の影響は小さいことが示された。しかし、斜め投射においては液膜に ripple が生じることで鏡面反射から大きくずれる場合があることが見出された。

参考文献

- (1) A. Le Goff, L. Courbin, H. A. Stone and D. Quéré, “Energy absorption in a bamboo foam”, *Euro. Phys. Lett.*, **84** (2008) 36001.
- (2) T. Gilet, J.W.M. Bush, “The fluid trampoline: Droplets bouncing on a soap film”, *J. Fluid Mech.*, **625** (2009) 167–?203.
- (3) L. Courbin, H.A. Stone, “Impact, puncturing, and the self-healing of soap films”, *Phys. Fluids*, **18** (2006) 091105.

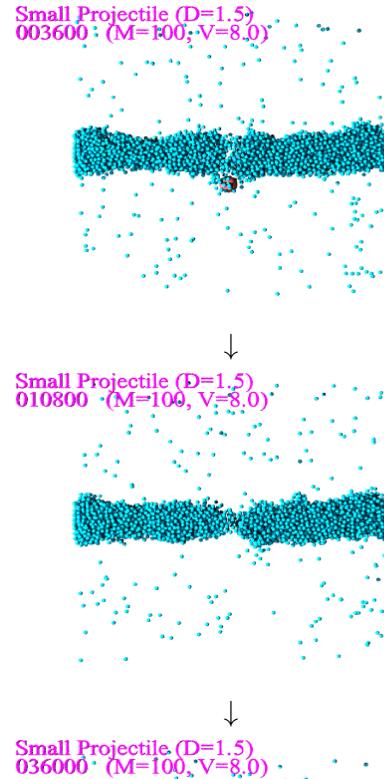


Fig. 8: Example of a shrinking hole. $\sigma_p = 1.5\sigma$, $m_p = 100 m$, $V_p = 8.0$ case.

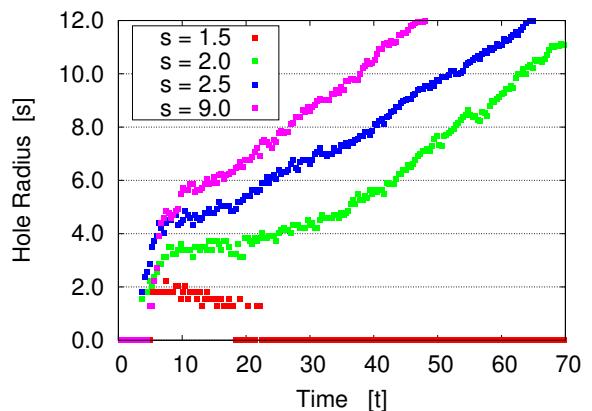


Fig. 9: Radius change of the hole generated during penetration; $m_p = 100 m$, $V_p = 8.0$ cases.