

ロケットエンジン燃焼室の入口近傍を想定した 酸水素界面の微視的研究

Microscopic study of oxygen-hydrogen interface around the inlet of rocket engine combustion chamber

井川 祥平(信州大・学), 津田 伸一(信州大)

Shohei Ikawa, Shinichi Tsuda

Key Words : Molecular Dynamics, Interfacial Properties, Oxygen, Hydrogen

Abstract

Understanding of atomization properties of oxygen in coaxial jet flow around the inlet of rocket engine combustion chamber is important for CFD simulation with high fidelity. However, there is no experimental data of interfacial tension that influences the atomization properties. In this study, we conducted a Molecular Dynamics (MD) simulation for reproduction of oxygen-hydrogen interface in rocket engine combustion chamber, and then we studied the interfacial tension between liquid oxygen and gas hydrogen focusing microscopic structure of the interface.

1. 緒言

LE-7Aに代表される大型液体ロケットエンジン内部の複雑な流れ場に関連して、現在JAXAを中心として、CFDによる内部流れの予測精度向上に関する研究が精力的に進められている。しかしながら、特に燃焼室内部流れについては、燃焼試験と同等の再現性は確保できておらず、その予測精度の向上は依然として大きな課題である。CFDの精度向上においては燃焼そのものの再現も重要であるが、燃焼室入口近傍における酸素の噴射・微粒化特性の再現もまた非常に重要となる。しかし微粒化特性を左右する界面張力のデータが酸水素混合系については皆無であり、現状では酸素単成分系の表面張力を参照している。しかし混合系に対して酸素単成分系の表面張力の値を単純に適用する妥当性についてはほとんど検討されてきていない。

そこで本研究では、燃焼室入口近傍における酸素と水素の同軸噴射流れ場を想定したうえで、酸水素界面を模擬した分子シミュレーションを行った。これにより酸水素混合系での界面張力を数値的に予測し、酸素単成分系での表面張力の値の適用妥当性を、界面の微視的構造にも注目したうえで検討した。

2. 計算手法

本研究では酸素と水素を単原子分子として模擬した粗視化モデルを適用したうえで、分子動力学計算を実施した。分子間ポテンシャルとしては次のLennard-Jonesポテンシャルを採用した。

$$\phi_{LJ}(r) = 4\epsilon_{ij} \left\{ \left(\frac{\sigma_{ij}}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{ij}}{r} \right)^6 \right\} \quad (1)$$

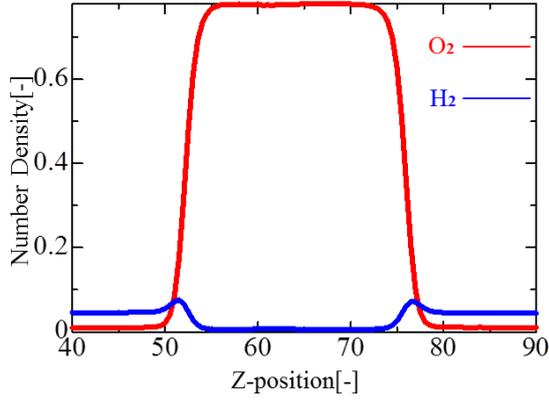
ここで、 r は分子間距離、 σ_{ij} は分子径、 ϵ_{ij} はエネルギーの単位を有するパラメータで、ポテンシャルの井戸の深さに相当している。また、添字の*i*や*j*は分子種(ここでは酸素または水素)を表す。ここで、酸素のポテンシャルパラメータについてはNIST(National Institute of Standards and Technology) [1]による酸素の表面張力に合うように設定し、 $\sigma_{\text{O}}=3.49\times 10^{-10}\text{m}$ 、 $\epsilon_{\text{O}}=1.66\times 10^{-21}\text{J}$ とした。一方、水素のポテンシャルパラメータについては水素単成分系の臨界点を再現するように $\sigma_{\text{H}}=3.29\times 10^{-10}\text{m}$ 、 $\epsilon_{\text{H}}=3.37\times 10^{-21}\text{J}$ とした。また酸水素間に働く異種分子間相互作用もLennard-Jonesポテンシャルにより与えることとし、そのポテンシャルパラメータには次のLorentz-Berthelot則を適用した。

$$\sigma_{\text{OH}} = \frac{1}{2}(\sigma_{\text{O}} + \sigma_{\text{H}}) \quad (2)$$

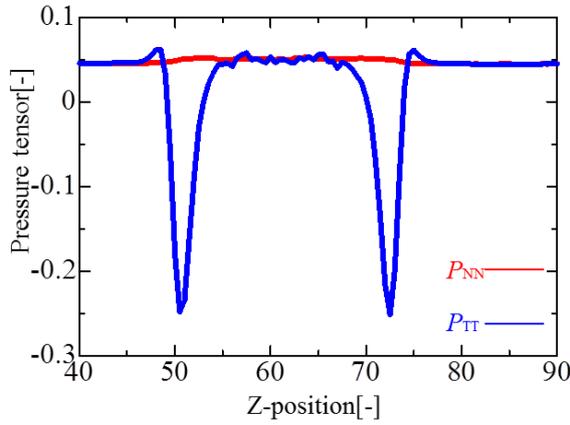
$$\epsilon_{\text{OH}} = \sqrt{\epsilon_{\text{O}}\epsilon_{\text{H}}} \quad (3)$$

ここで添え字のOとHは、それぞれ酸素と水素を表している。

界面張力については酸水素共存系を模擬したうえで、表面張力の力学的定義として知られている次のBakker方程式[2]により求めた。



(a) Number Density



(b) Pressure Tensor

Fig. 1 Profiles of Each Physical Value in the Present Simulation System (100K)

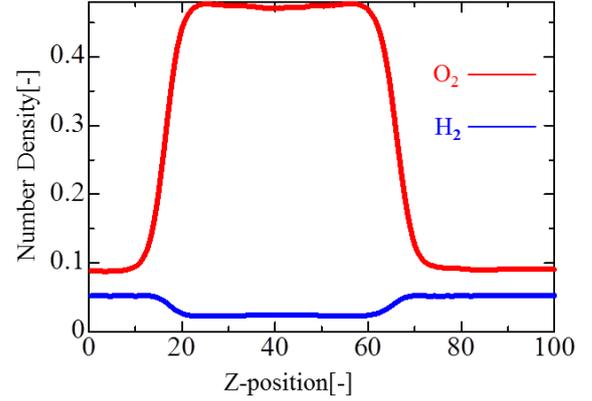
Table 1 Calculated Interfacial Tensions

Temperature	Mixtures	Oxygen
100K	9.8mN/m	10.7mN/m
140K	1.3mN/m	2.4mN/m

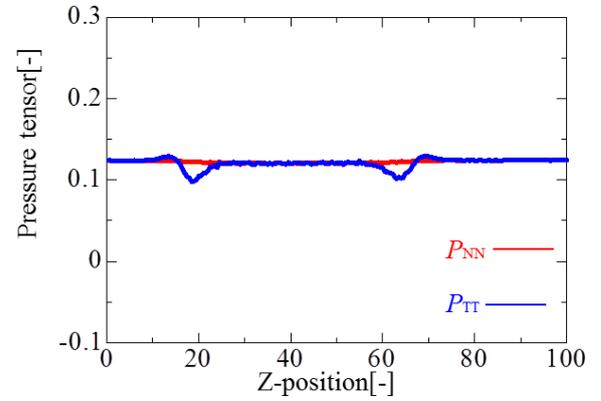
$$\gamma = \frac{1}{2} \int_{-\frac{L_z}{2}}^{\frac{L_z}{2}} (p_{NN} - p_{TT}) dz \quad (4)$$

ここで p_{NN} と p_{TT} はそれぞれ気液界面に対する法線成分と接線成分の圧力テンソル、 L_z は界面の法線方向に対する計算領域の大きさである。界面張力は界面近傍における圧力テンソルの成分差の積分値として与えられることになる。

また気液界面を含むようなバルクとは異なる不均質な系における計算では、カットオフ距離の影響が顕著になることが知られている。均質な系でのカットオフ距離は 3.5σ 程度で問題ないが、今回のシミュレーションではカットオフ距離を $r_c=7.0\sigma$ と設定した。



(a) Number Density



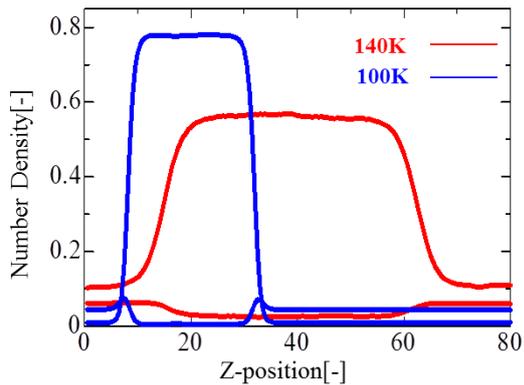
(b) Pressure Tensor

Fig. 2 Profiles of Each Physical Value in the Present Simulation System (140K)

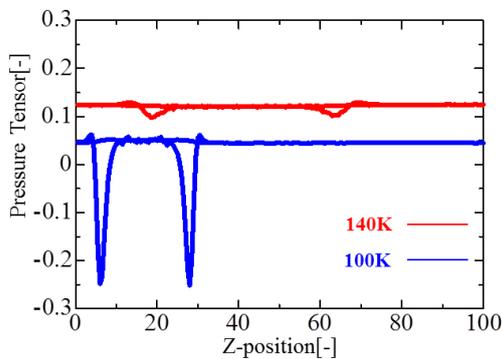
3. 計算結果および考察

表1に100Kと140Kでの界面張力の計算結果を示す。ここで酸素の臨界温度(155K)に対して、100Kは十分に亜臨界の状態、140Kは臨界点近傍を想定した計算となっている。今回の結果から、混合系の界面張力の値は単成分系に比べて約1mN/m減少していることがわかる。

図1は混合系100Kでの密度分布と圧力テンソルの計算結果を示したものである。なお、これらの量については、酸素の分子質量とポテンシャルパラメータにより無次元化している点に注意する。まず密度分布の結果からは、界面領域に水素の吸着層が形成されているのが確認できる。また、圧力テンソルの結果からは、界面で圧力テンソルの接線成分が高くなり、界面張力の値を下げる方向に作用していることがわかる。ここで、水素の吸着層が形成されている領域と、接線圧力が法線圧力より高くなる領域はほぼ合致していることから、水素の吸着層が界面張力を引き下げる要因となっていることが理解できる。



(a) Number Density



(b) Pressure Tensor

Fig. 3 Comparison of the Profiles of Each Physical Value in the Present Simulation System between 100K and 140K

図2は混合系140Kでの計算結果を示したものである。100Kと違い水素の吸着層ははっきりと確認できないが、圧力テンソルの接線成分が界面で高くなる領域があり、界面張力を下げていることがわかる。図3は100Kと140Kの計算結果を比較したものである。密度分布については、単成分系ではよく知られているように高温になれば気液の密度差は減少し、界面幅は広がる結果になっている。なお界面幅については定量的に評価するため、 $10-90thickness[3]$ により算出したものを表2に示す。この表の結果についても、酸素の分子径に相当するポテンシャルパラメータにより無次元化しているが、界面幅については分子数個分の差があることがわかる。また界面張力の値が両温度共に約1mN/m減少するという結果になったが、100Kにおいては界面張力の値が大きいため相対的な差としては1割程度である一方、140Kでは値が小さく差が5割程度になる。よって臨界点から充分低い温度では酸素単成分系の表面張力値を混合系に適用しても大きな影響はないが、臨界点近傍では現象再現性を変える可能性がある。そのため酸素の表面張力値を単純に適用するのは問題があると考えられる。

Table2 Calculated Interfacial Width

Temperature	Interfacial Width
100K	2.5
140K	9.0

4. 結言

本研究では、ロケットエンジン燃焼室入口近傍における酸水素混合系の同軸噴射流れを想定したうえで、酸水素界面を模擬した分子シミュレーションを行った。主な結果と知見は以下のとおりである。

1. 混合系においても単成分系と同様に高温の条件では気液の密度差は小さく、界面幅は広がる。また界面張力は低下する。
2. 混合系では、界面において、接線圧力が法線圧力より大きくなる領域があり、界面張力を下げる方向に作用している。またその結果、界面張力の値は酸素単成分に比べて1mN/m程度減少した。
3. 100Kでは酸素単成分系の表面張力との差は1割程度であるが、140Kでは5割程度になる。そのため臨界点から充分低い温度では大きな影響はないが、臨界点近傍では酸素単成分系の表面張力をそのまま混合系に適用するのは問題があると考えられる。

ただし、以上の結果は経験的なポテンシャルによるものであるため、より正確な評価には非経験的なポテンシャルの適用が必要である。

参考文献

- [1] <http://webbook.nist.gov/chemistry/>
- [2] 小野周, “表面張力”, 共立出版, 1980
- [3] A. Trokhymchuk, J. Alejandre, “Computer simulations of liquid/vapor interface in Lennard-Jones fluids: Some questions and answers”, *J. Chem. Phys.*, Vol. 111, 1999, pp. 8510-8523.