日本化学会第103春季大会 2023/3/24

特別企画:未来の電池・電子材料技術を切り拓くコロイド分散凝集の科学と技術

コロイド系の動的構造形成・応答シミュレーション -分散から塗布・乾燥まで-

辰巳 怜 東京大学環境安全研究センター

コロイド系とものづくり



3 研究事例 Komoda et al., JCIS Open 5 100038 (2022).





• $LiCoO_2$

NMP

2

(3)

調製方法

一括混合

数値シミュレータ SNAP



















外場(流動・乾燥)による構造形成の機構解明 構造と物性の関係の理解 → プロセス最適化の知見へ

空間スケールとモデル





粒子:運動方程式

粒子間力 流体力(外場の作用) 並進 $M\dot{V} = F^{P} + F^{H}$ 回転 $I\dot{\Omega} = N^{P} + N^{H}$

・DLVO力

・接触力



衝突, 摩擦 (離散要素法 DEM)

電気二重層斥力

熱力学的な力

流体:Navier-Stokes方程式







粒子-流体連成: Immersed Boundary 法

直接数値シミュレーション:方程式を離散化して計算格子上で解析





・凝集体の解砕









Y. Nakayama et al., AIChE J. **64**, 1424 (2018).



混練機内の溶融樹脂の流動解析

分散機内の流動イメージ フィルミックス®

PRIMIX Corp., https://www.primix.jp/products/indust/fm/01.html 永井ら,日本化粧品技術者会誌 **39**, 26 (2005).

流体解析(CFD) → 装置内部の流動・剪断率の把握 凝集体の解砕に必要な剪断率は? ← メソスケール解析





解砕過程の解析:剪断流れを印加 無次元剪断応力τ^{*}での整理を試みる

粒子に作用する力(応力として評価)

•流体力:
$$\tau_{\rm f} = \eta \dot{\gamma}$$

計算条件

• 粒子間力 :
$$\tau_{\mathrm{p}} = \frac{F_{\mathrm{a}}}{d^2} = \frac{A}{24\delta^2 d}$$

* van der Waals型の付着力

無次元剪断応力 τ^* を定義: $au^* = rac{ au_f}{ au_p} = rac{24\eta\dot{\gamma}\delta^2 d}{A}$ $\dot{\gamma}$: 剪断率 η : 媒質粘度 d: 粒径 A: Hamaker定数 $\delta \sim 1$ Å









- 流動特性(粘度の剪断率依存性)
- 粘弹性

コロイド系の流動特性



見掛け粘度



→ プロセス条件の選択で注意: 塗布, 攪拌, 輸送, …

圧力計



- 体積分率 30 vol%
- ・ゼータ電位 -50 mV

媒質:水

- イオン濃度 10⁻³ M
- 流動Péclet数 Pe = 50 10⁵
 (無次元化した圧力勾配)

計算条件

円管圧力駆動流れ → 粘度を評価 管径 10*d*, 管長 20*d* 流れ方向に周期境界条件



計算結果



流動Péclet数:印加圧力勾配を無次元化

 $Pe = \frac{\dot{\gamma}d^2}{D} \quad \begin{array}{l} \dot{\gamma} : \, \text{剪断率} \, d : \, \text{粒径} \\ D : \, \text{粒子拡散係数} \end{array}$

見掛け粘度



分散凝集と見掛け粘度



粘弾性

レオロジー特性と構造の関係の把握



Large Amplitude Oscillatory Shear



 $\tan \delta = G''/G'$

線形粘弾性







- 偏析
- 導電性評価

大小粒子混合系の乾燥

電池電極, ナノコンポジット材料...







乾燥速度と偏析





導電ネットワーク形成

27

混合粒子分散液の乾燥(導電粒子、絶縁粒子)



粒径比を大きくする → 絶縁粒子の凝集に相当 パーコレーション閾値への影響は?







まとめ

数値シミュレーションによる現象理解 → ものづくりの指針構築へ

