日本物理学会第70回年次会
2015/03/21

厚い溶質吸着層を有するコロイド粒子の拡散移動

○辰巳 怜[A,B], 小池 修[B],
辻 佳子[A,B], 山口由岐夫[B]

[1]東京大学 環境安全研究センター
[3]東京大学 大学院工学系研究科 化学システム工学専攻

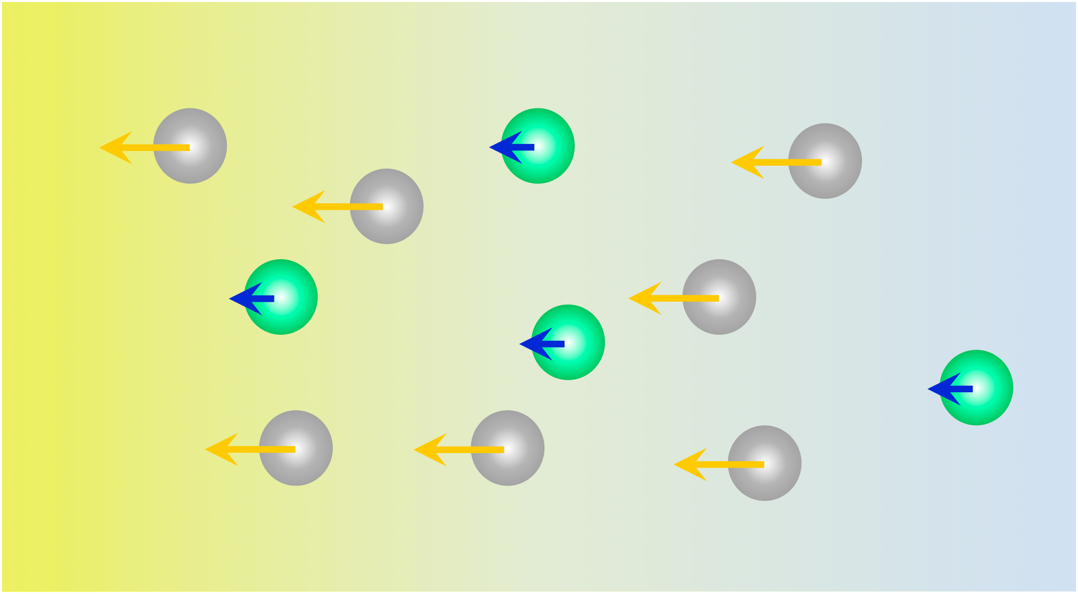
コロイド粒子輸送

電場

温度勾配

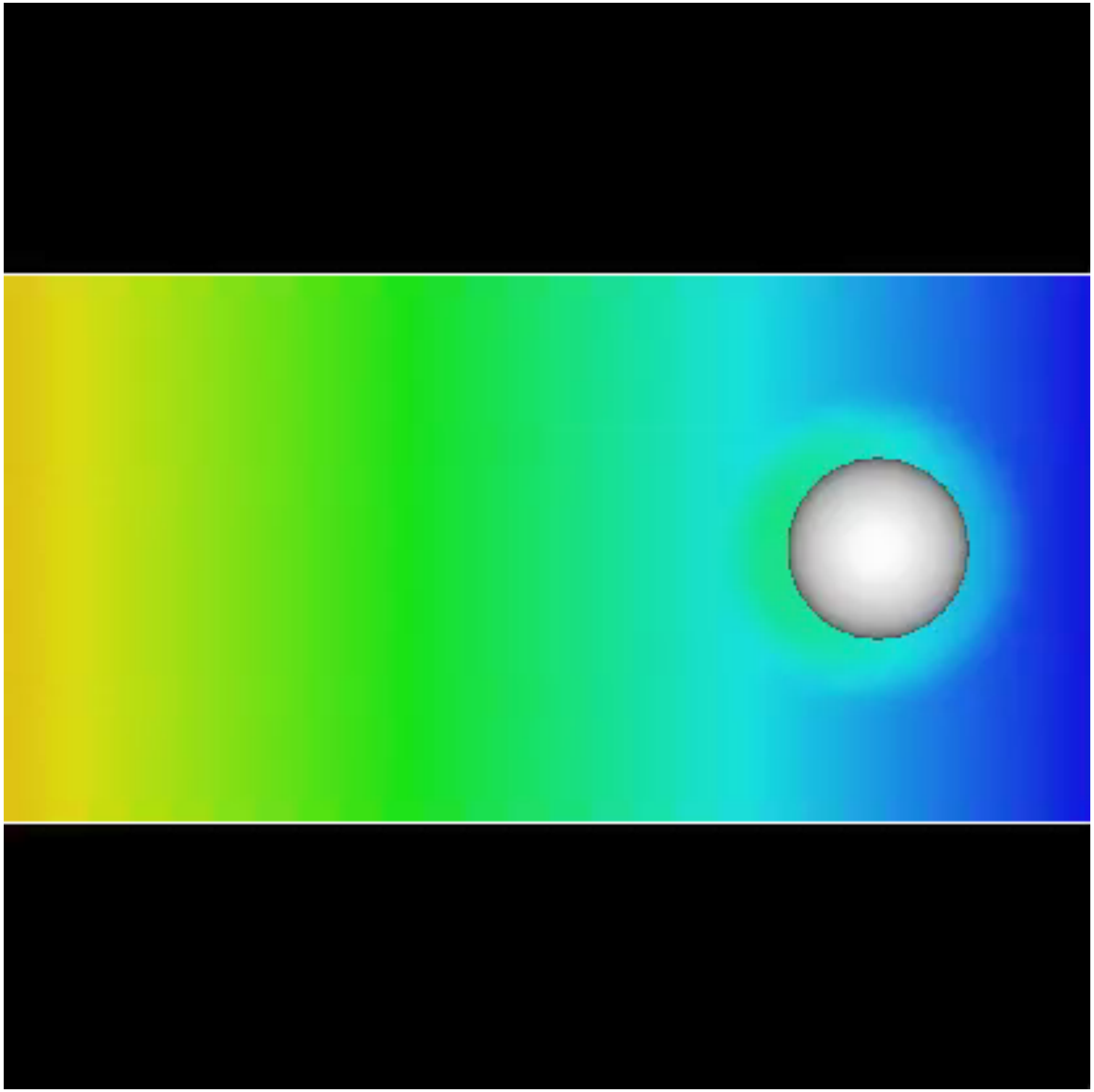
濃度勾配

拡散泳動

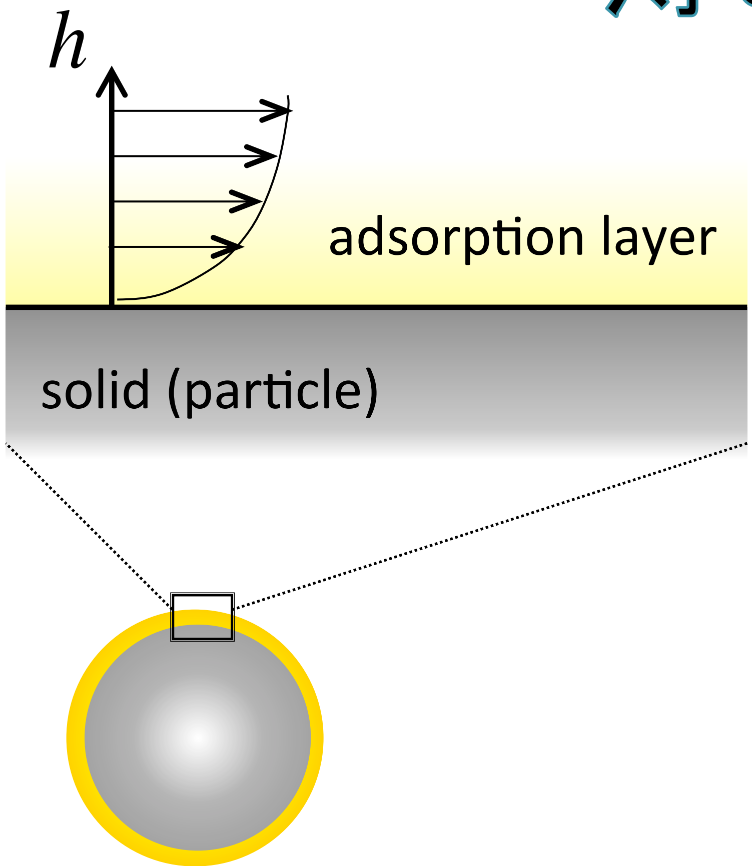


泳動速度差による分離

拡散泳動



薄い吸着層



吸着層での保存則

質量 $$v_n^{(a)} = 0$$

運動量 $$p^{(a)} = (e^{-\beta u} - 1)cRT$$

$$\eta \frac{\partial \boldsymbol{v}_s^{(a)}}{\partial h} = -\int_h^\infty \nabla_s p^{(a)} \mathrm{d}h'$$

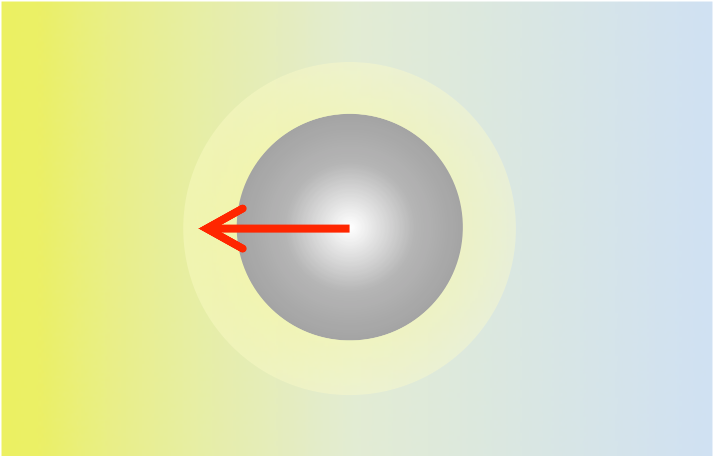
滑り速度 $$\boldsymbol{v}_s = \boldsymbol{v}_s^{(a)}(\infty)$$

$$\boldsymbol{U} = -\frac{1}{4\pi a^2}\oint_{\partial P} \boldsymbol{v}_s \mathrm{d}S = -\frac{k_B T}{\eta}\xi \nabla_s c \qquad \xi = \int_0^\infty h(e^{-\beta u(h)} - 1)\mathrm{d}h$$

J. L. Anderson and D. C. Prieve (1984)

厚い吸着層

相互作用が長距離の場合

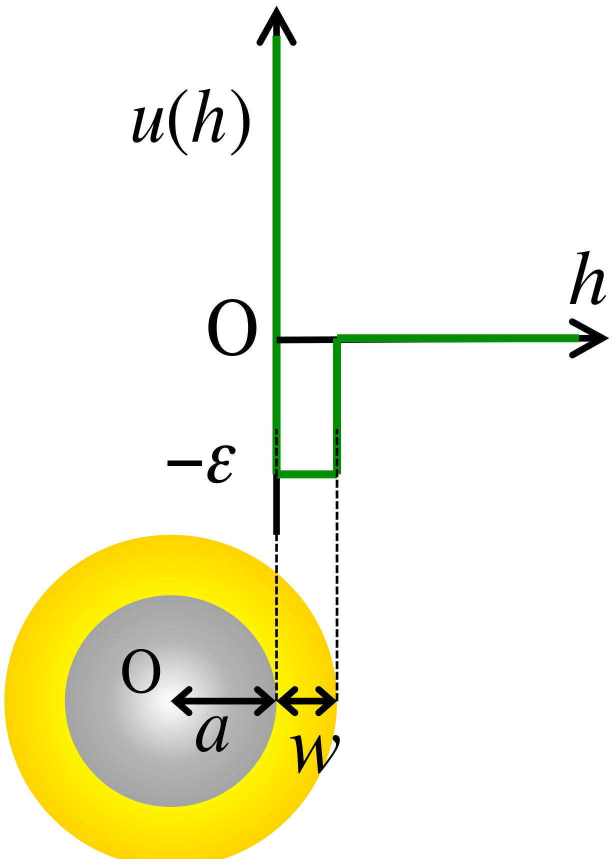


溶質親和性のゲル層を纏った粒子？

- 熱力学的効果：相互作用エネルギー
- 動力学的効果：粘性係数，拡散係数

吸着ポテンシャル

粒子表面-溶質相互作用: 井戸型ポテンシャル



$$u(h) = \begin{cases} -\varepsilon & 0 \le h < w \\ 0 & h \ge w \end{cases}$$

吸着エネルギー ：$\beta\varepsilon = \varepsilon / k_B T$

吸着層厚さ： $\lambda = w / a$

拡散泳動の問題設定

・非圧縮性流体

・低Reynolds数流れ

<u>保存則（定常状態）</u>

質量 $\nabla\cdot\boldsymbol{v}=0$

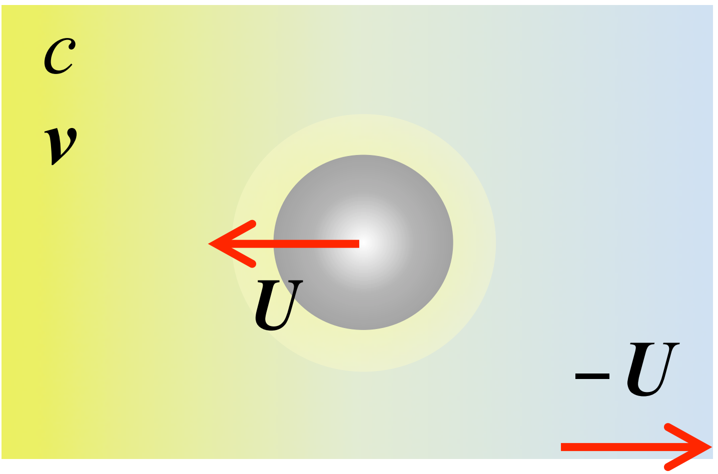
運動量 $\nabla\cdot\boldsymbol{\sigma}-c\nabla u=0$

溶質 $\nabla\cdot\left(c\boldsymbol{v}+\boldsymbol{J}\right)=0$

$$\boldsymbol{\sigma}=-p\boldsymbol{I}+\eta[\nabla\boldsymbol{v}+(\nabla\boldsymbol{v})^T]$$

$$\boldsymbol{J}=-Dc\nabla\beta\mu=-D(\nabla c+c\nabla\beta u)$$

concentration gradient $\boldsymbol{K}$



<u>境界条件（運動座標系）</u>

$\boldsymbol{v}=\boldsymbol{0}$, $\hat{\boldsymbol{n}}\cdot\boldsymbol{J}=0$ $\quad r=a$

$\boldsymbol{v}\to\boldsymbol{-U}$, $c\sim\boldsymbol{K}\cdot\boldsymbol{r}$ $\quad r\to\infty$

拡散泳動の問題設定

仮想濃度場 (c^*)

$$\Xi(c_0 + c^*) = c \qquad \Xi(r) = e^{-\beta u} = \begin{cases} e^{\beta\varepsilon} & a \le r < b \\ 1 & r \ge b \end{cases}$$

保存則(定常状態)

質量 $\nabla \cdot \boldsymbol{v} = 0$

運動量 $-\nabla p + \eta \nabla^2 \boldsymbol{v} - c^* \nabla \Xi = 0$

溶質 $\nabla \cdot [\Xi(c_0 \boldsymbol{v} - D\nabla c^*)] = 0$

境界条件(運動座標系)

$$\boldsymbol{v} = \boldsymbol{0}, \quad \hat{\boldsymbol{n}} \cdot \nabla c^* = 0 \qquad r = a$$

$$\boldsymbol{v} \to -\boldsymbol{U}, \quad c \sim \boldsymbol{K} \cdot \boldsymbol{r} \qquad r \to \infty$$

拡散泳動の問題設定

軸対称な解

$$\boldsymbol{v}(r,\theta)=\left(-\frac{2a}{r}h(r)\cos\theta,\ \frac{a}{r}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left[rh(r)\right]\sin\theta,\ 0\right)$$

$$c(r,\theta)=f(r)\cos\theta$$

基準速度

$$U_0=\frac{k_BTKa^2}{\eta}$$

基準Peclet 数

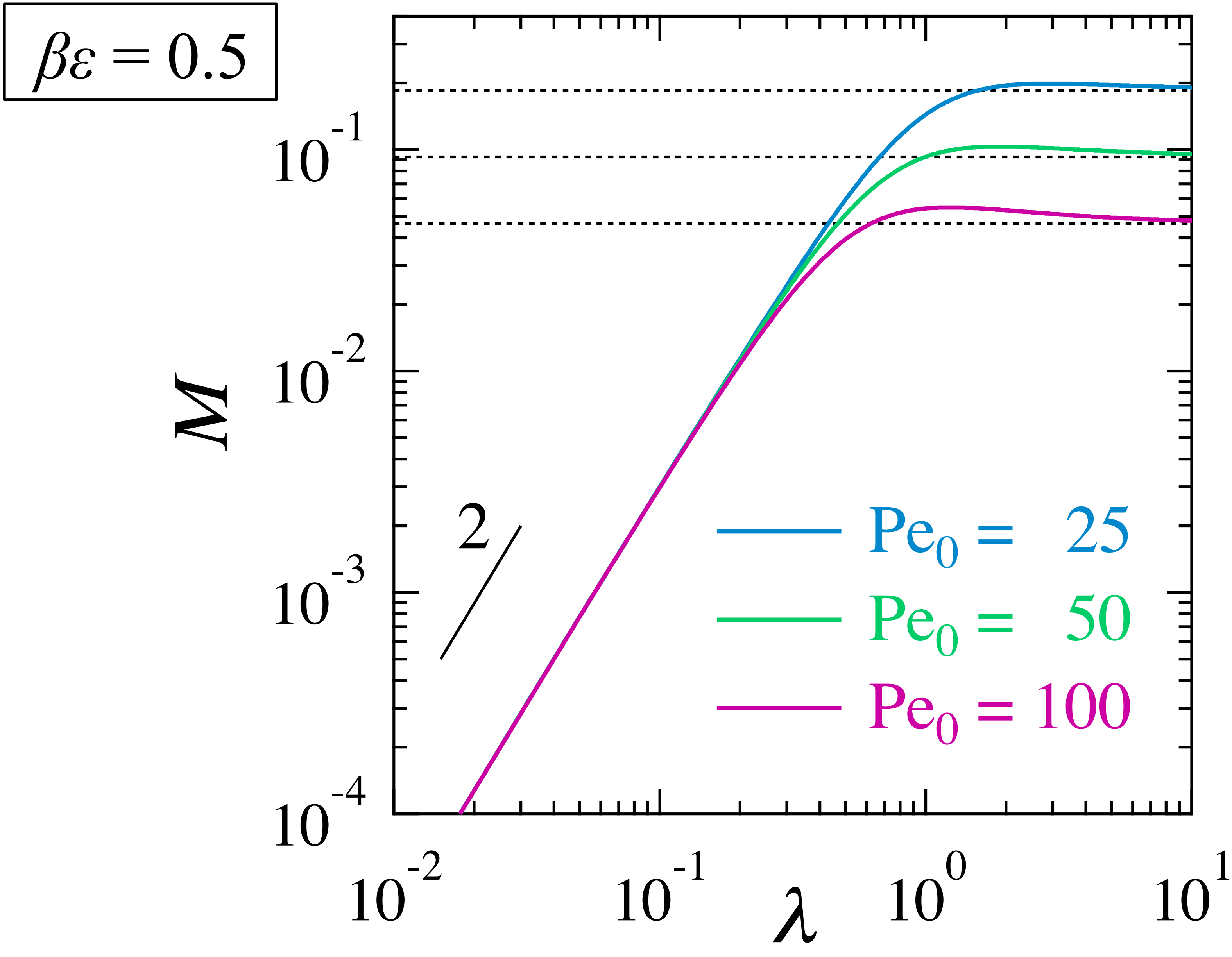
$$\mathrm{Pe}_0=\frac{c_0U_0}{DK}=\frac{k_BTc_0a^2}{\eta D}$$

無次元易動度

$$M=\frac{U}{U_0}=\frac{\eta U}{k_BTKa^2}$$

$$M\,(\,\lambda;\ \beta\varepsilon,\,\mathrm{Pe}_0)$$

Pe_0-依存性



解の挙動

Pe$_0$-依存性

・thin layer limit

$$M \approx \frac{1}{2}(e^{\beta\varepsilon}-1)\lambda^2 \quad \text{as} \quad \lambda << 1$$

×

Anderson の解と一致

・thick layer limit

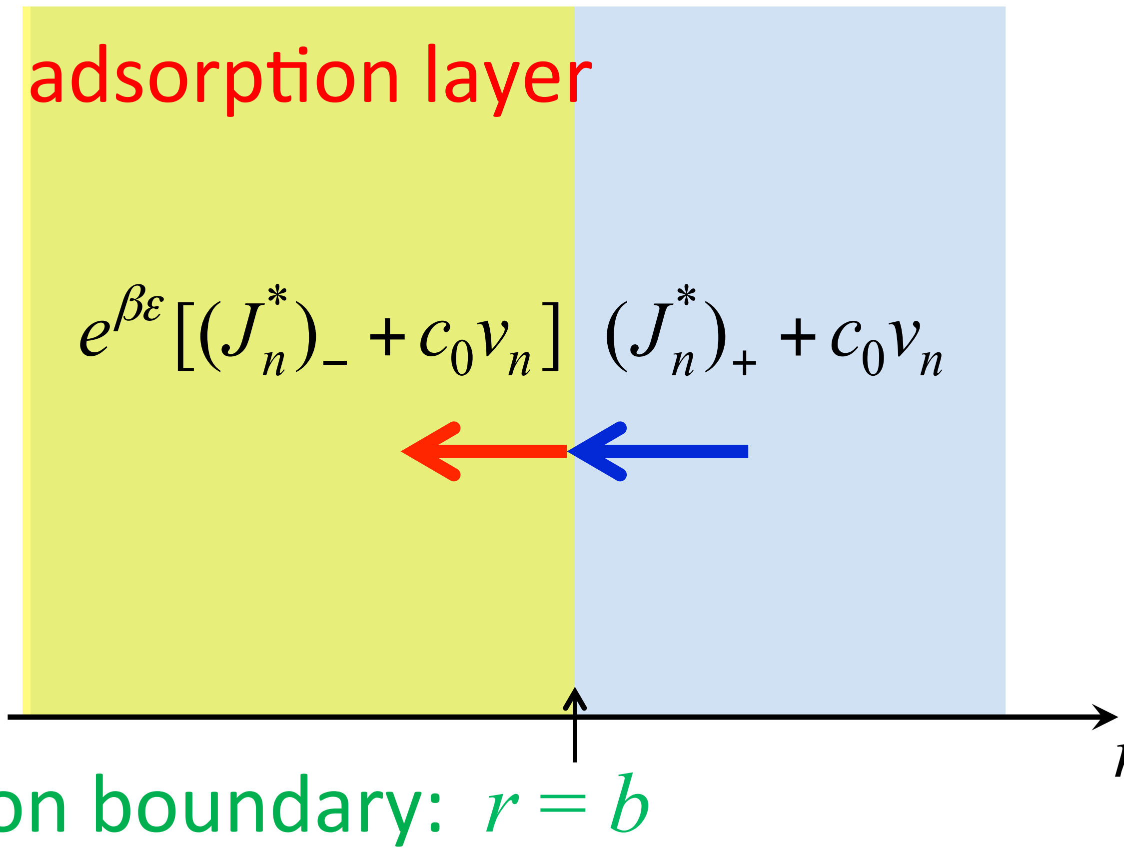
$$M \rightarrow \frac{3}{(e^{\beta\varepsilon}-1)\mathrm{Pe}_0} \quad \text{as} \quad \lambda \rightarrow \infty$$

○

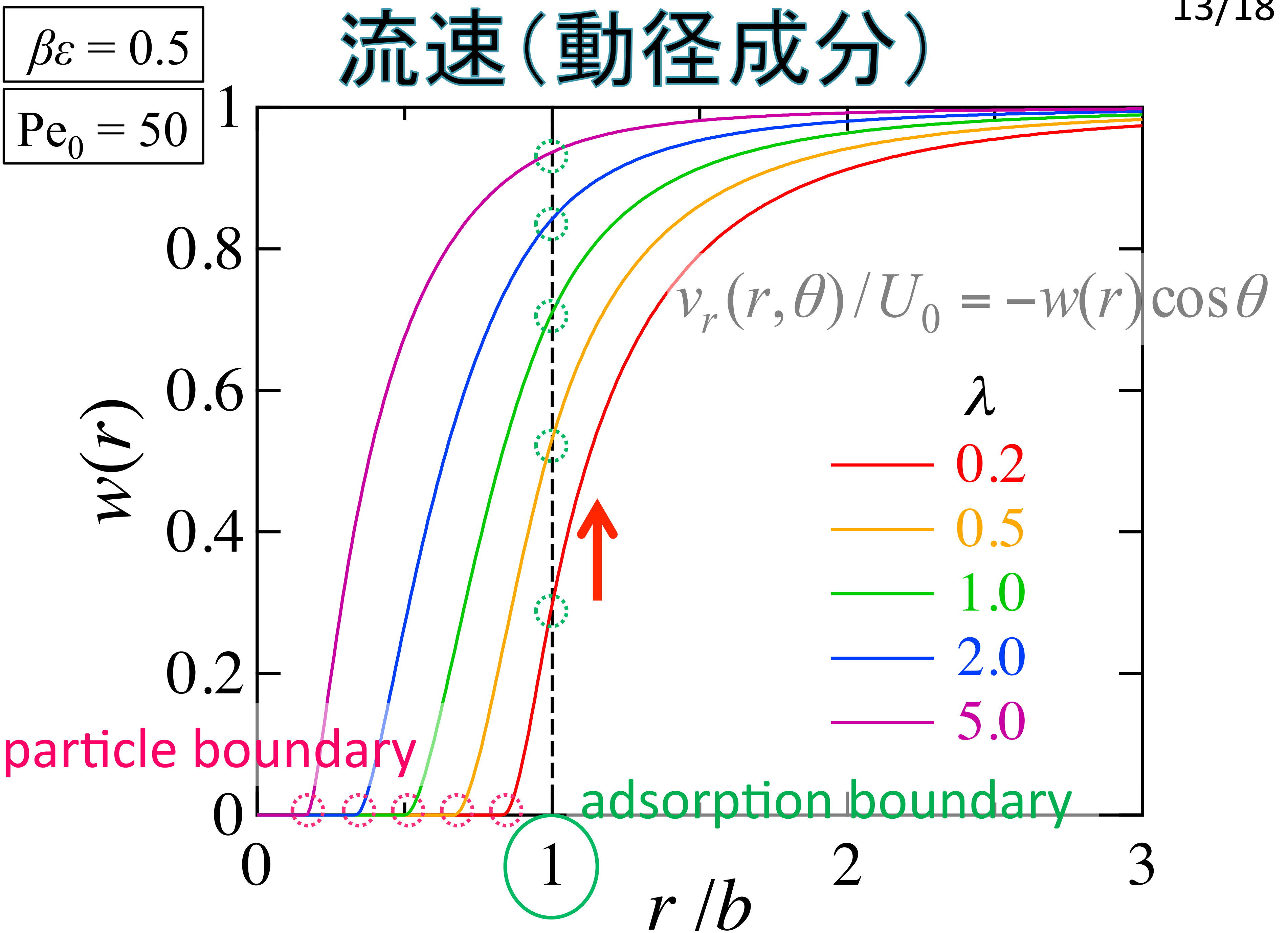
吸着層境界での溶質保存

$$\boxed{e^{\beta\varepsilon}(J_n^*)_- - (J_n^*)_+ + (e^{\beta\varepsilon}-1)c_0 v_n = 0 \quad \text{at} \;\; r = b = a(1+\lambda)}$$

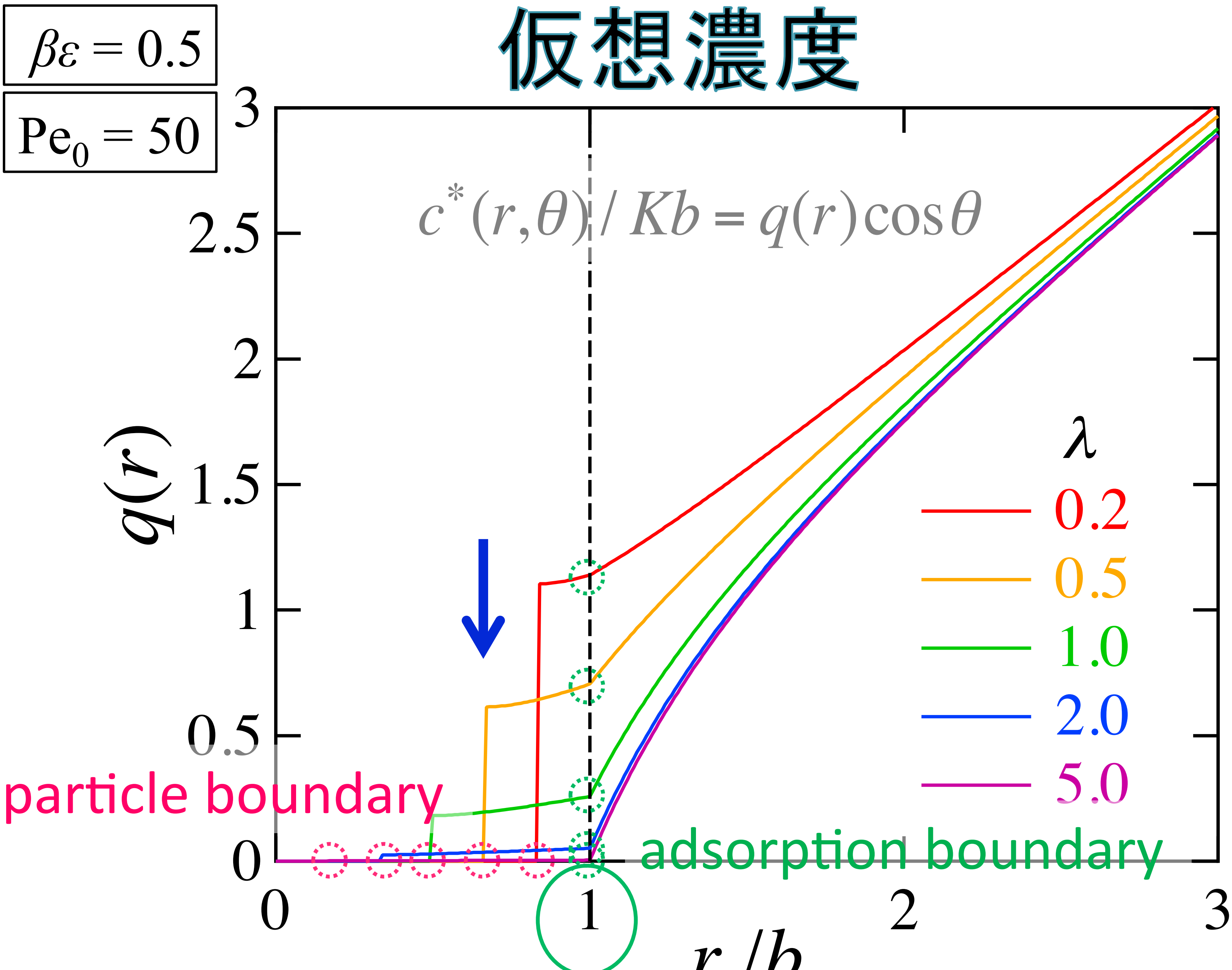
$$\boldsymbol{J}^* = -D\nabla c^*$$



流速（動径成分）


$\beta\varepsilon = 0.5$
$\mathrm{Pe}_0 = 50$
$v_r(r,\theta)/U_0 = -w(r)\cos\theta$
$w(r)$
r/b
0
0.2
0.4
0.6
0.8
1
0
1
2
3
λ
0.2
0.5
1.0
2.0
5.0
particle boundary
adsorption boundary

仮想濃度


$\beta\varepsilon = 0.5$
$\mathrm{Pe}_0 = 50$
$c^*(r,\theta)/Kb = q(r)\cos\theta$
$q(r)$
r/b
0
0.5
1
1.5
2
2.5
3
0
1
2
3
λ
0.2
0.5
1.0
2.0
5.0
particle boundary
adsorption boundary

吸着層境界での物理量変化

λ 増加

Pe_0 増加

v_n 増加

$$e^{\beta\varepsilon}(J_n^*)_- - (J_n^*)_+ + (e^{\beta\varepsilon} - 1)c_0 v_n = 0$$

$$\boldsymbol{J}^* = -D\nabla c^*$$

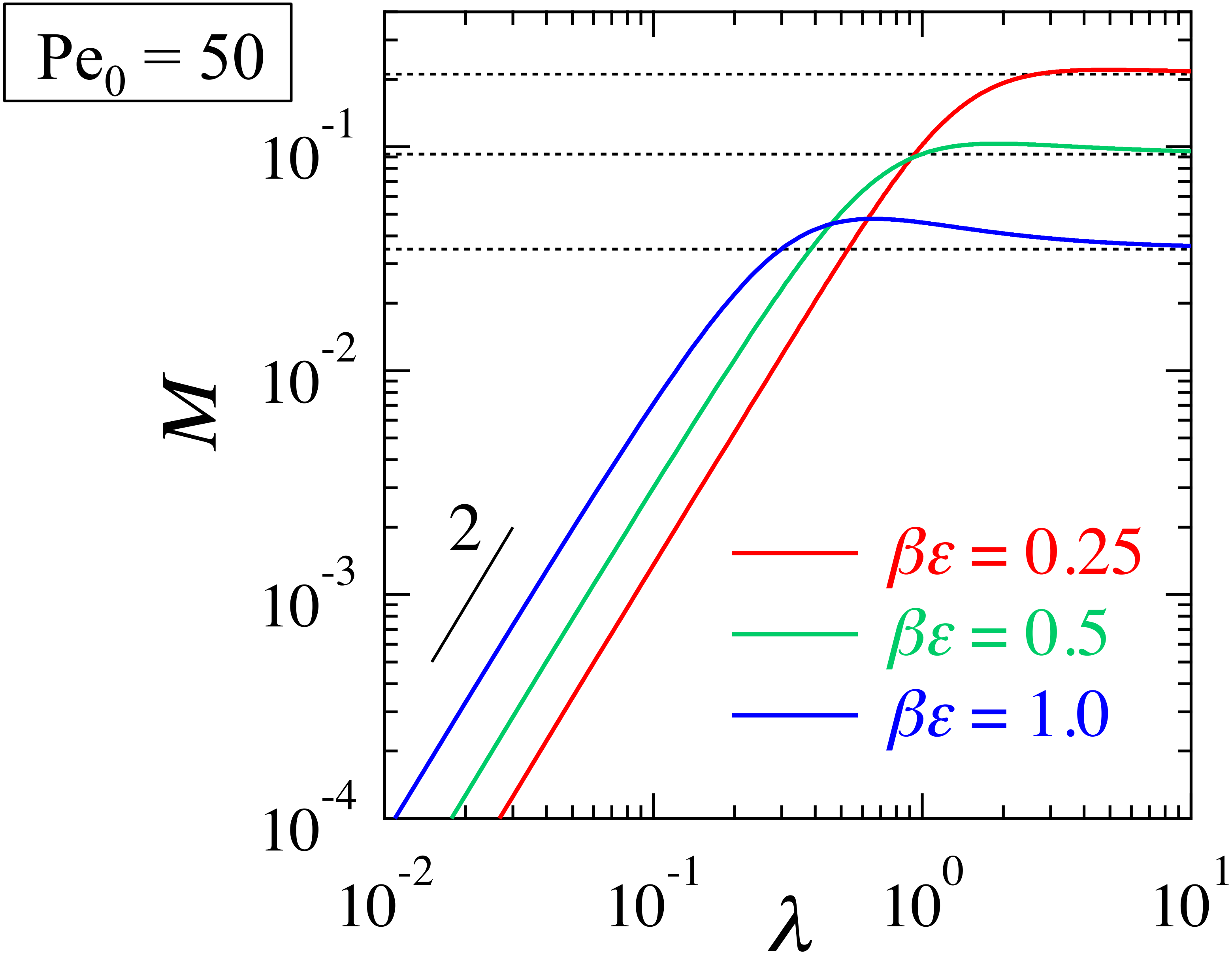
$(J_n^*)_-$減少　$(J_n^*)_+$増加

c^* 減少

$c^* \rightarrow 0$

v_n, M 収束

$\beta\varepsilon$-依存性

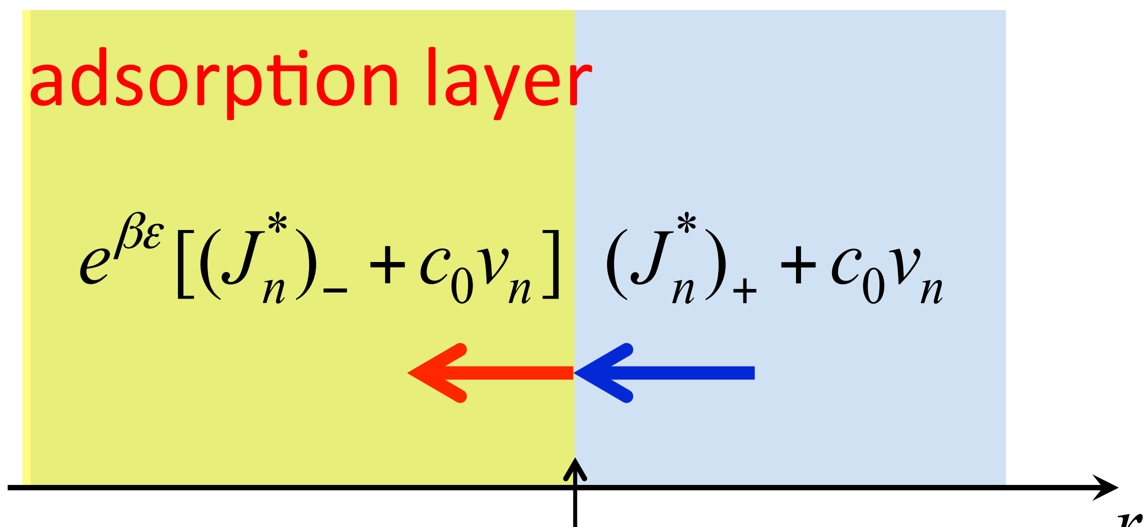


吸着層境界での物理量変化

$\beta\varepsilon$ 増加 → $(J_n^*)_-$減少　$(J_n^*)_+$増加 → c^* 減少 → v_n, M 収束

$$e^{\beta\varepsilon}[(J_n^*)_- + c_0 v_n] = (J_n^*)_+ + c_0 v_n$$

$$\boldsymbol{J}^* = -D\nabla c^*$$



adsorption boundary: $r = b$

総括

- 溶質吸着を井戸型ポテンシャルで表すモデルを構築し，コロイド粒子の拡散泳動の解析を行った.

- 易動度(M)の吸着層厚さ(λ)依存性
  λ^2 比例 → 定数 へと挙動が変化
  $\beta\varepsilon$, Pe_0 が大きいほど，小さい λ で挙動が変化

← 吸着層境界での吸着･脱離収支から解釈可能