

微粒子分散溶液の乾燥・濃縮過程に対する 粒子-溶媒-溶質連成モデルの構築

○辰巳 怜, 小池 修, 山口由岐夫

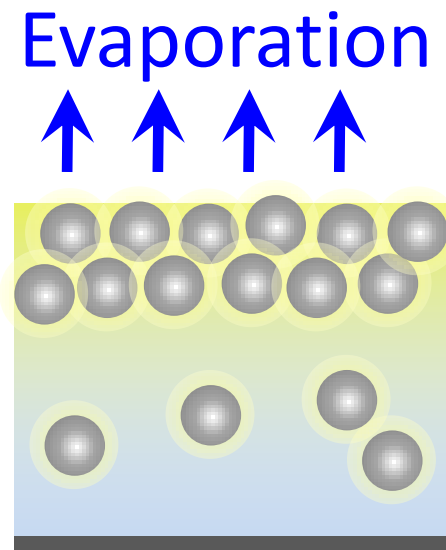
東京大学大学院工学系研究科
化学システム工学専攻

目的

- ・高分子を添加した微粒子分散液の塗布・乾燥による機能性薄膜の作成



- ・粒子構造の解明・制御



- ・微粒子分散溶液の乾燥・濃縮過程に対する
粒子-溶媒-溶質連成モデルと数値解析法の構築

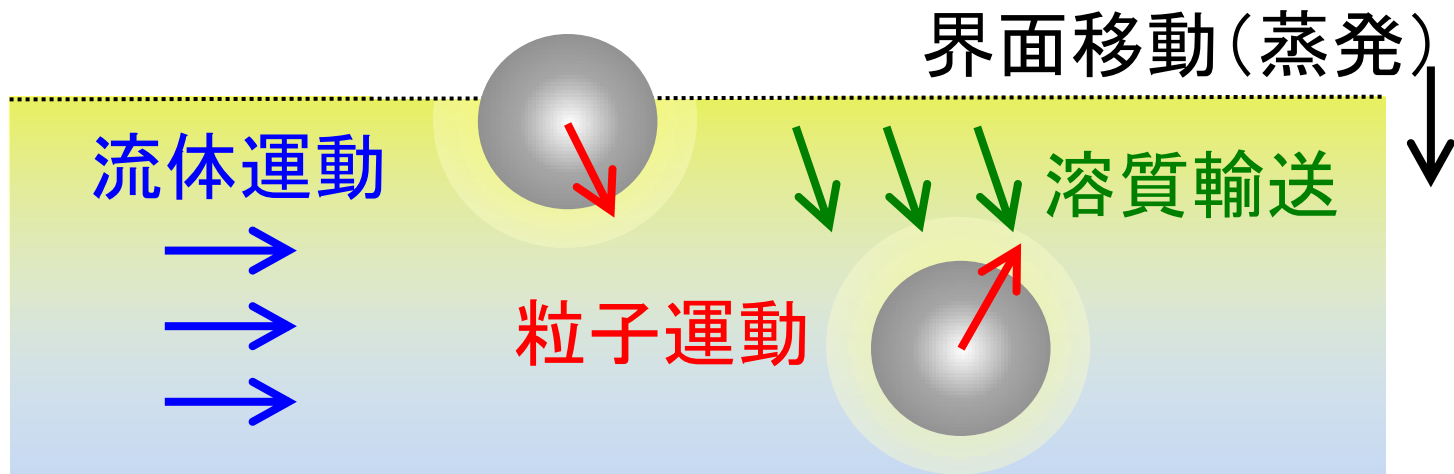
モデル化

- モデル コロイド粒子：剛体球粒子
流体：ニュートン流体（2成分：溶媒+溶質）
吸着：粒子-溶質間相互作用

支配方程式

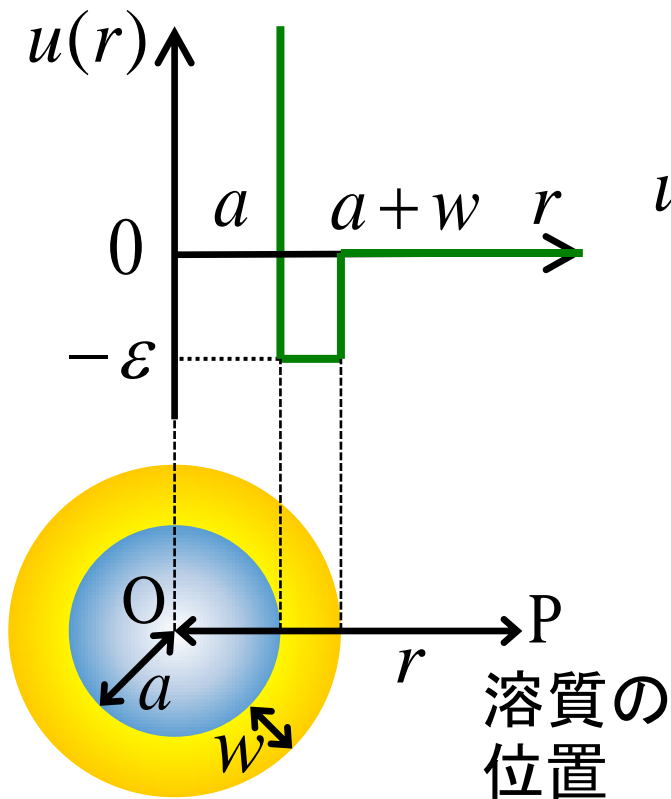
時間発展

- ・コロイド粒子
- ・流体流動場
- ・溶質濃度場
- ・気液界面



吸着のモデル化

粒子-溶質相互作用：井戸型ポテンシャルモデル



$$u(r) = \begin{cases} \infty & r < a & \text{剛体斥力} \\ -\varepsilon & a \leq r < a + w \\ 0 & r \geq a + w & \text{引力} \\ & & \rightarrow \text{吸着層形成} \end{cases}$$

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

吸着層厚さ： w

支配方程式

流動場 $\nabla \cdot \mathbf{v} = \dot{\omega} |\nabla(1/\rho)|$

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} \right) = \nabla \cdot \vec{\sigma} + \underline{\rho \Phi \mathbf{a}} - \underline{c \nabla U_{\text{ad}}} + \gamma \kappa \nabla f$$

$$\vec{\sigma} = -(p + \pi) \vec{\mathbf{I}} + \eta [\nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^T] - \frac{2}{3} \eta (\nabla \cdot \mathbf{v}) \vec{\mathbf{I}}$$

粒子 $M_i \frac{d}{dt} \mathbf{V}_i = \underline{\mathbf{F}_i^H} + \underline{\mathbf{F}_i^S} + \mathbf{F}_i^{ca}$ $\mathbf{F}_i^H = -\int \rho \Phi \mathbf{a} d\mathbf{r}$ $\mathbf{F}_i^S = \int c \nabla U_{\text{ad}} d\mathbf{r}$

$$\mathbf{I}_i \cdot \frac{d}{dt} \boldsymbol{\Omega}_i = \underline{\mathbf{N}_i^H}$$

$$\mathbf{N}_i^H = -\int (\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \times \rho \Phi \mathbf{a} d\mathbf{r}$$

気液界面 (Level Set 法)

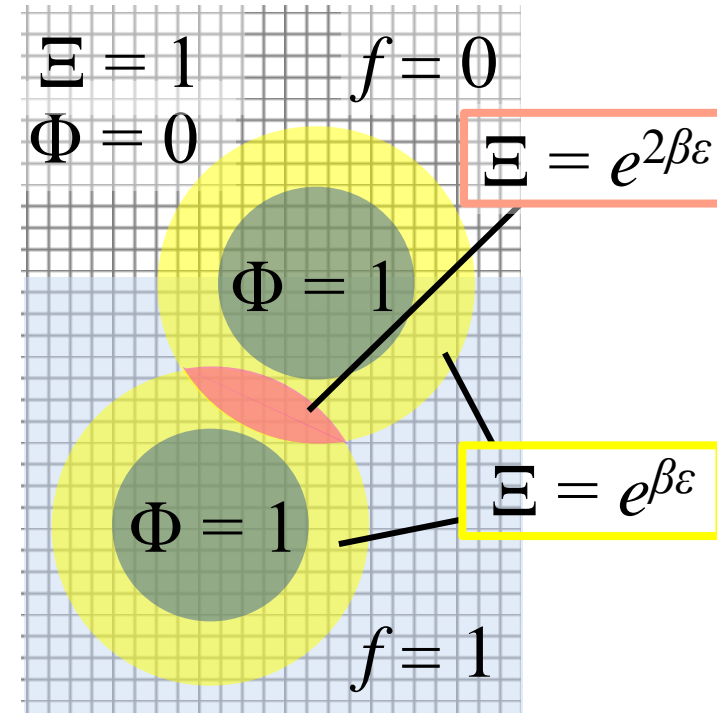
$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \left(\mathbf{v} + \frac{\dot{\omega}}{\rho} \mathbf{n} \right) \cdot \nabla \phi = 0$$

支配方程式

溶質濃度場 $\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot (c \mathbf{v}_s) = 0$

指示函数	粒子領域	$\Phi \in [0, 1]$
	吸着層	$\Xi \in [1, e^{n\beta\varepsilon}]$
	液相	$f \in [0, 1]$

$c = f(1 - \Phi)\Xi c^*$ 仮想濃度場



$c \mathbf{v}_s = c \mathbf{v} + \mathbf{J}$

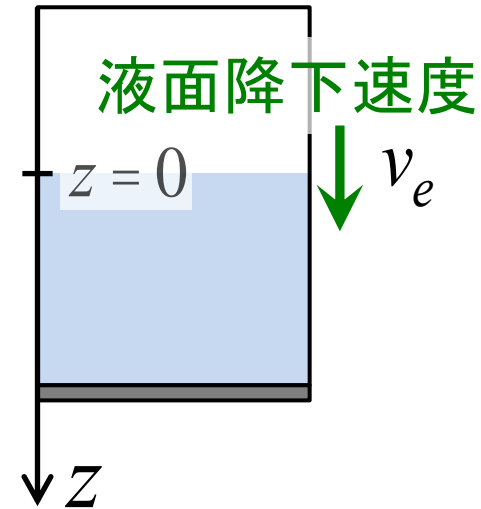
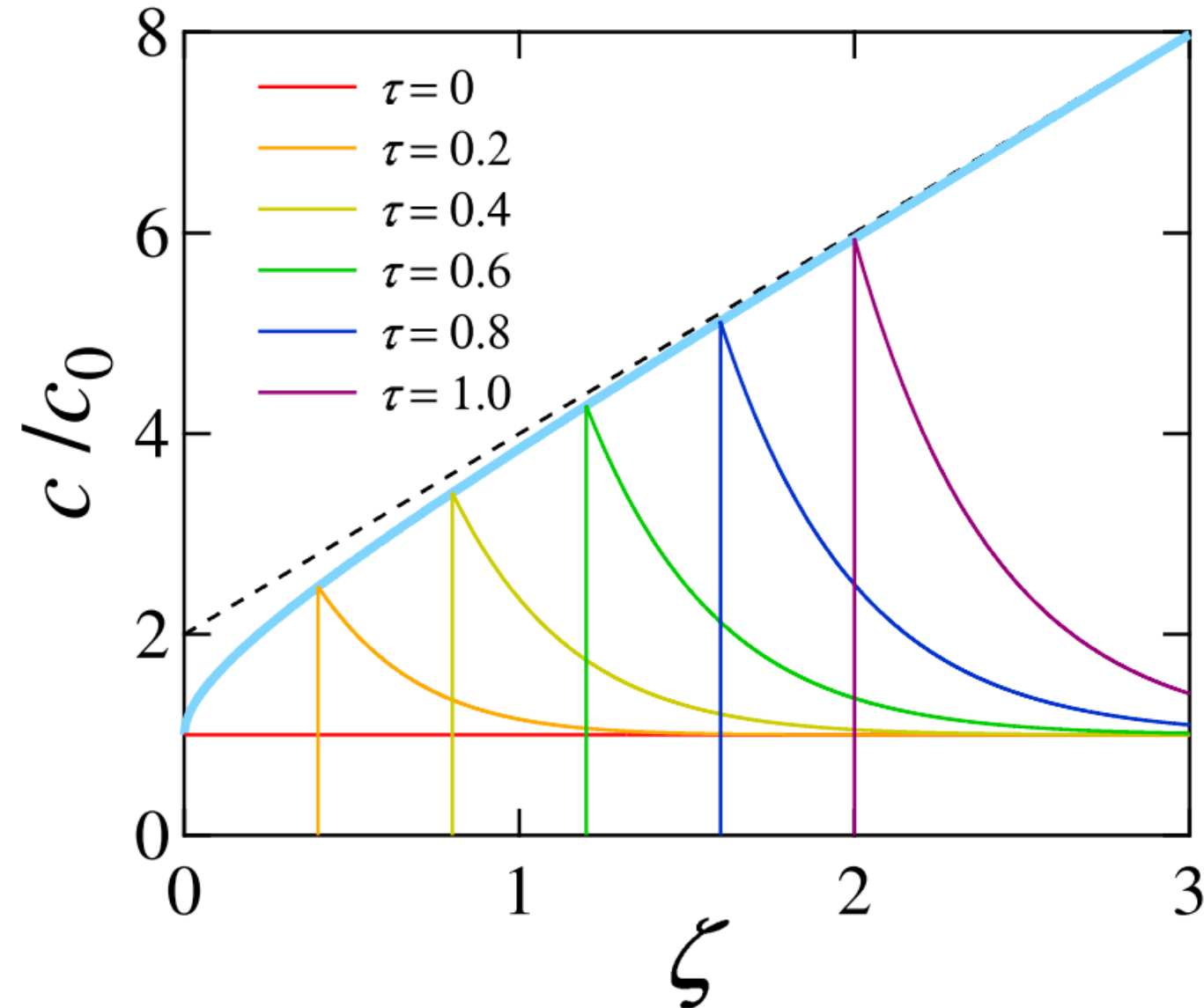
$= (1 - \Phi)\Xi [f(c^* \mathbf{v} - D \nabla c^*) + (1 - f)c^* v_e \hat{\mathbf{n}}] + \Phi \Xi c^* \mathbf{v}_p$

液相: 移流 + 拡散

気相: 液面降下速度で移流

粒子相: 粒子移動に追従

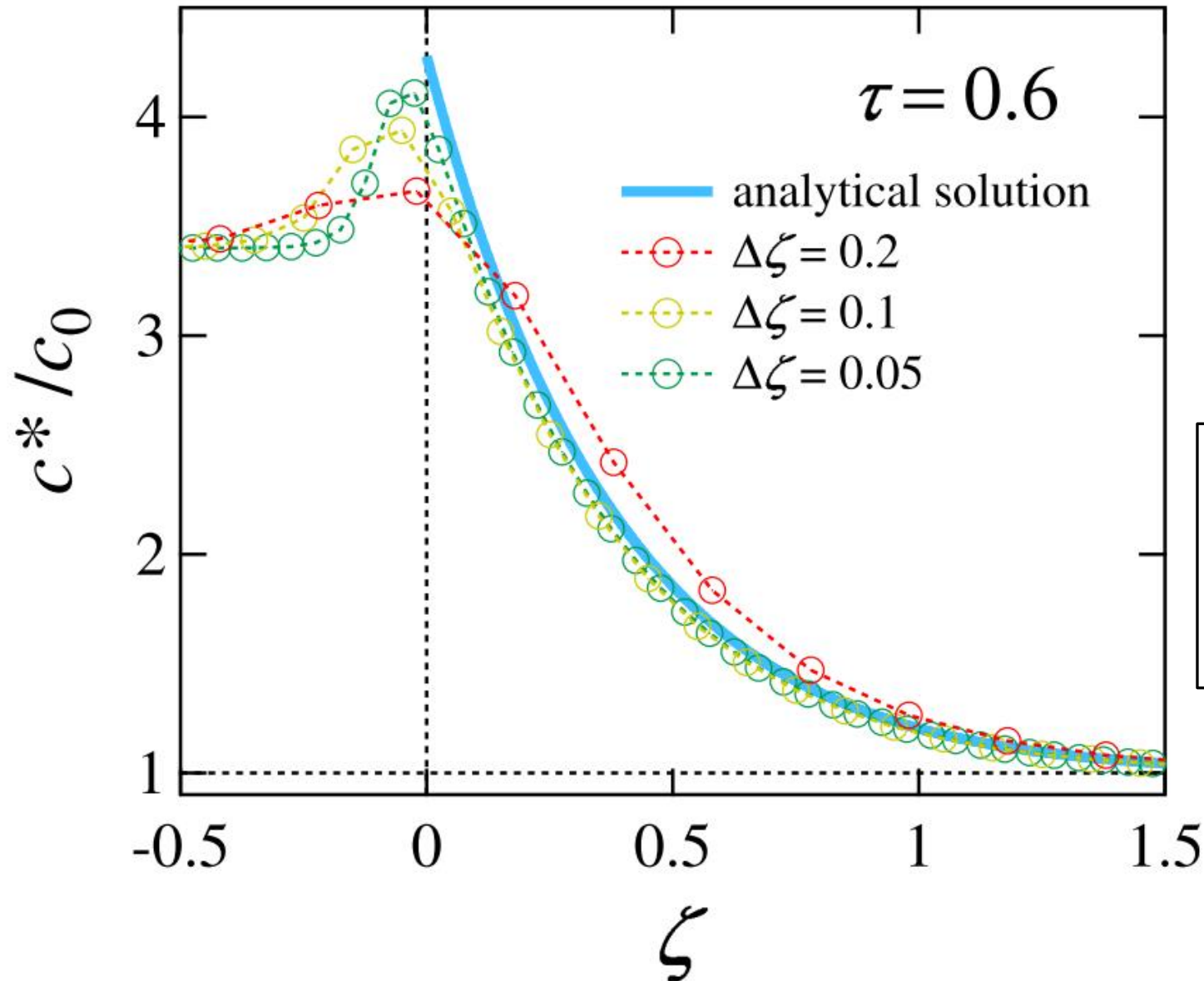
乾燥過程での溶質分布



$$\zeta = \frac{v_e}{2D} z$$

$$\tau = \frac{v_e^2}{4D} t$$

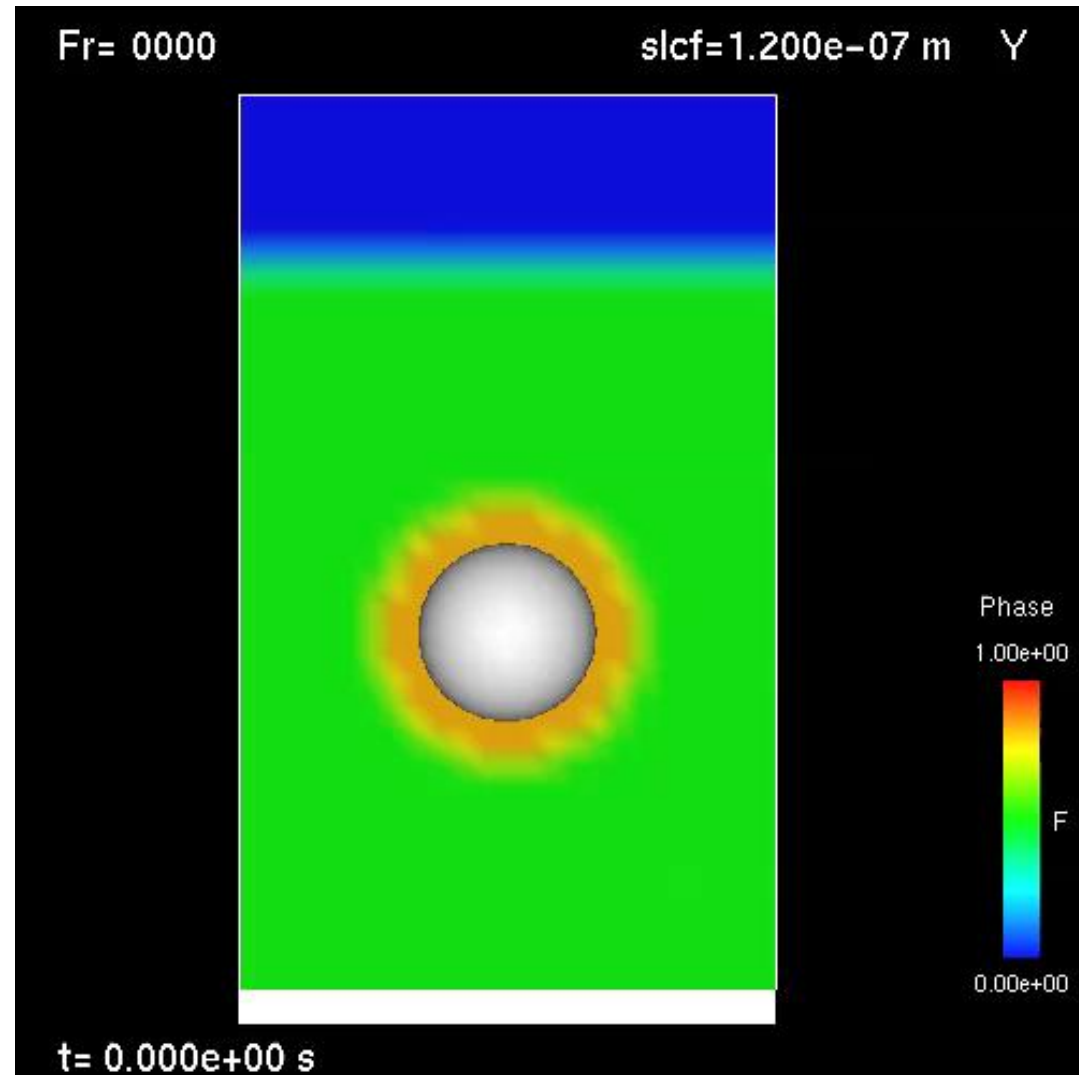
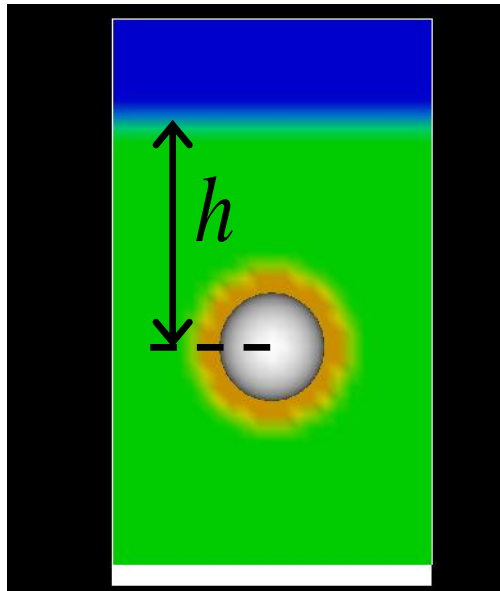
数値計算の検証(溶質分布)



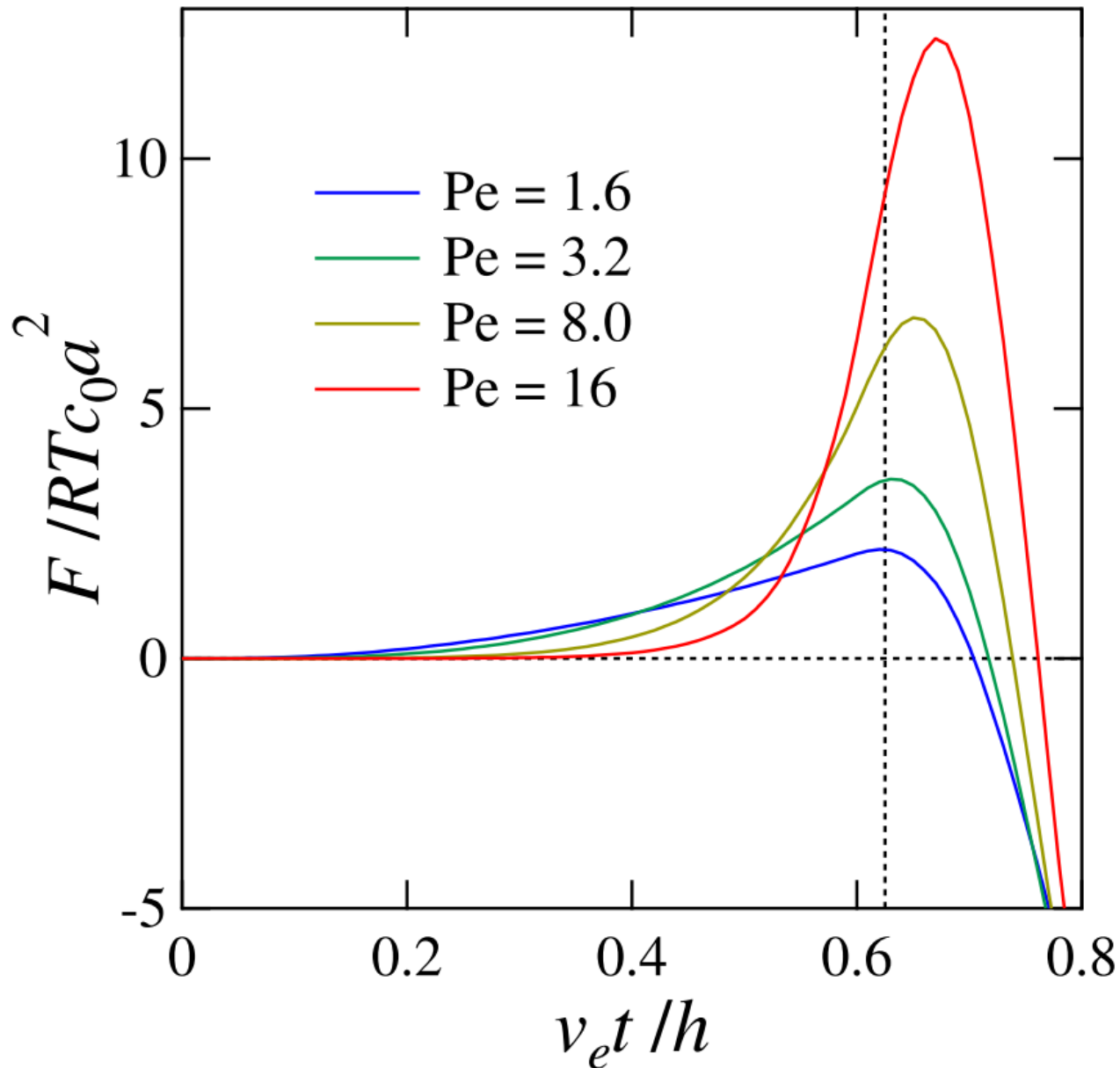
乾燥過程で粒子に働く力

- 粒子位置を固定
- $\beta\varepsilon = 0.5$, $w/a = 0.5$
- 溶質ペクレ数
 $Pe = v_e h / D$ を変化

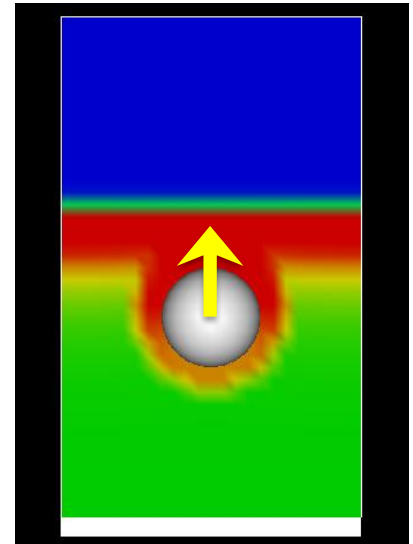
$$Pe = 3.2$$



乾燥過程で粒子に働く力



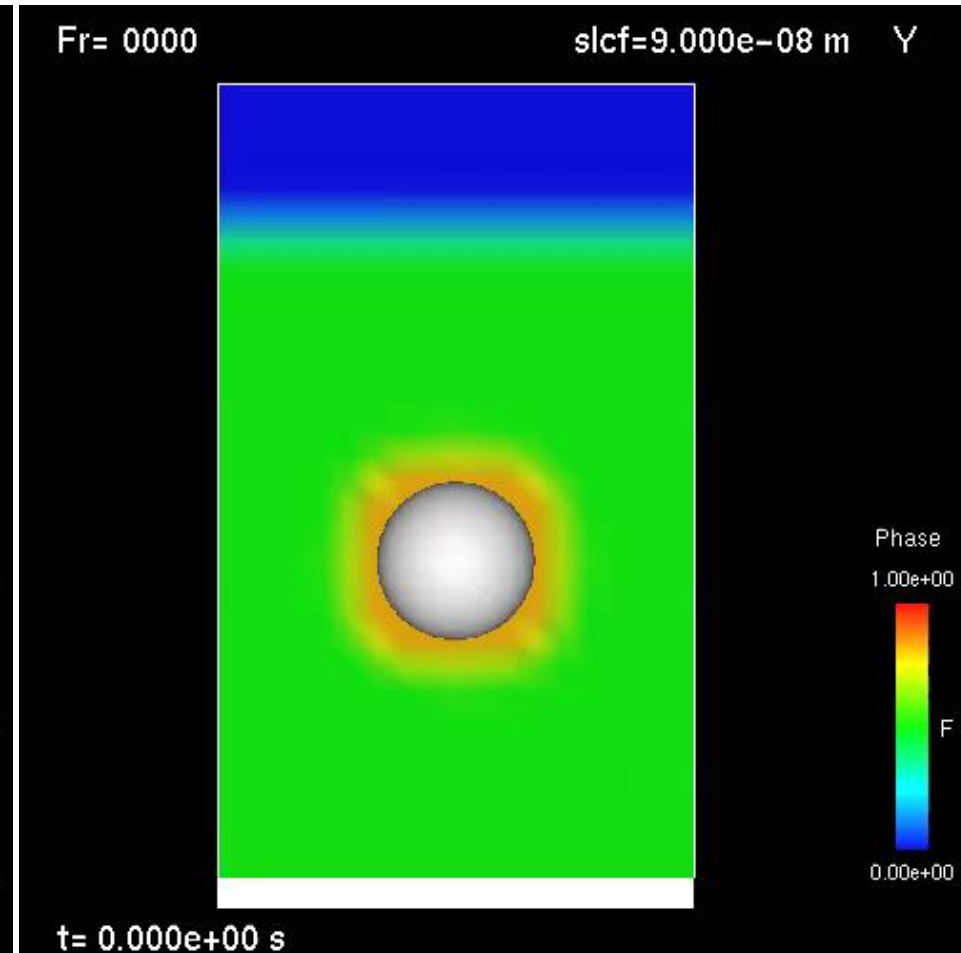
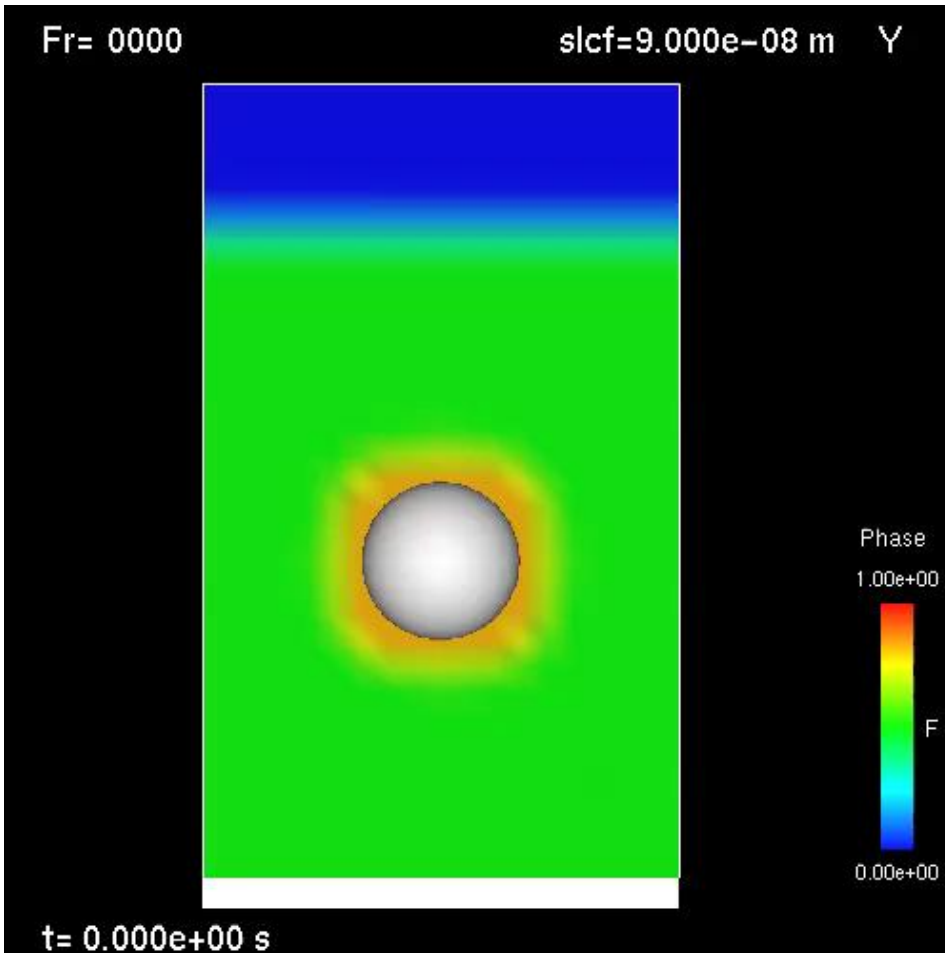
$$Pe = \frac{v_e h}{D}$$



乾燥過程での粒子運動

$Pe = 3.2$

$Pe = 16$



総括

- 微粒子分散溶液の乾燥・濃縮過程に対する粒子-溶媒-溶質連成モデルを構築した。
- このモデルは乾燥過程での溶質濃縮層の形成を正しく再現できる。
- 溶質濃縮層発達により粒子に発生する力が、溶質ペクレ数に対して変化することを示した。