

A numerical analysis on mixing process of constituent particle and dispersant by fracture simulation of fine particle aggregates

O. Koike^{*}, R. Tatsumi[†], Y. Yamaguchi^{*}

* PIA, † UTokyo

微粒子凝集体の解砕シミュレーションによる
粒子及び分散剤混合過程の解析

小池 修^{*}・辰巳 怜[†]・山口 由岐夫^{*}

一連のプロセス

含水量

ペンジュラー状態
ファニキュラー状態

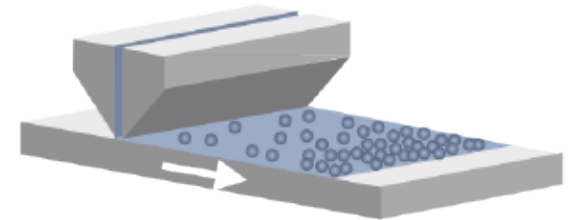
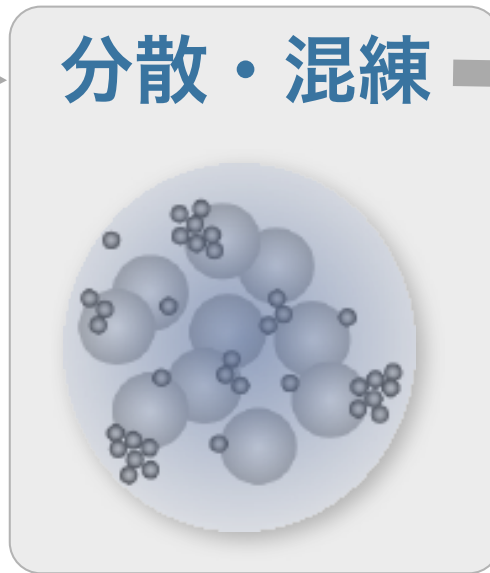
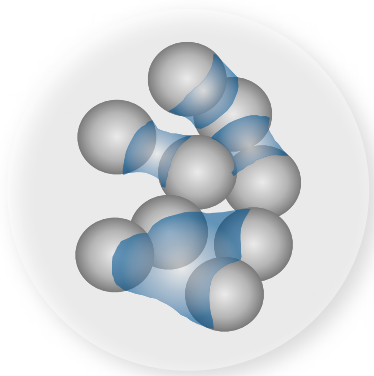
キャピラリー状態
スラリー状態 (ペースト)

浸潤

分散・混練

ろ過/鋳込み

塗布・乾燥



要となるプロセス

機能材料へ
e.g. 電池電極

疑問

- 混練とはどういうことか？：後工程のためにどこを目指すか？
- 分散剤はどう分布しているか？：粒子間相互作用の(非)球対称性
- 分散剤の主目的以外の役割は？

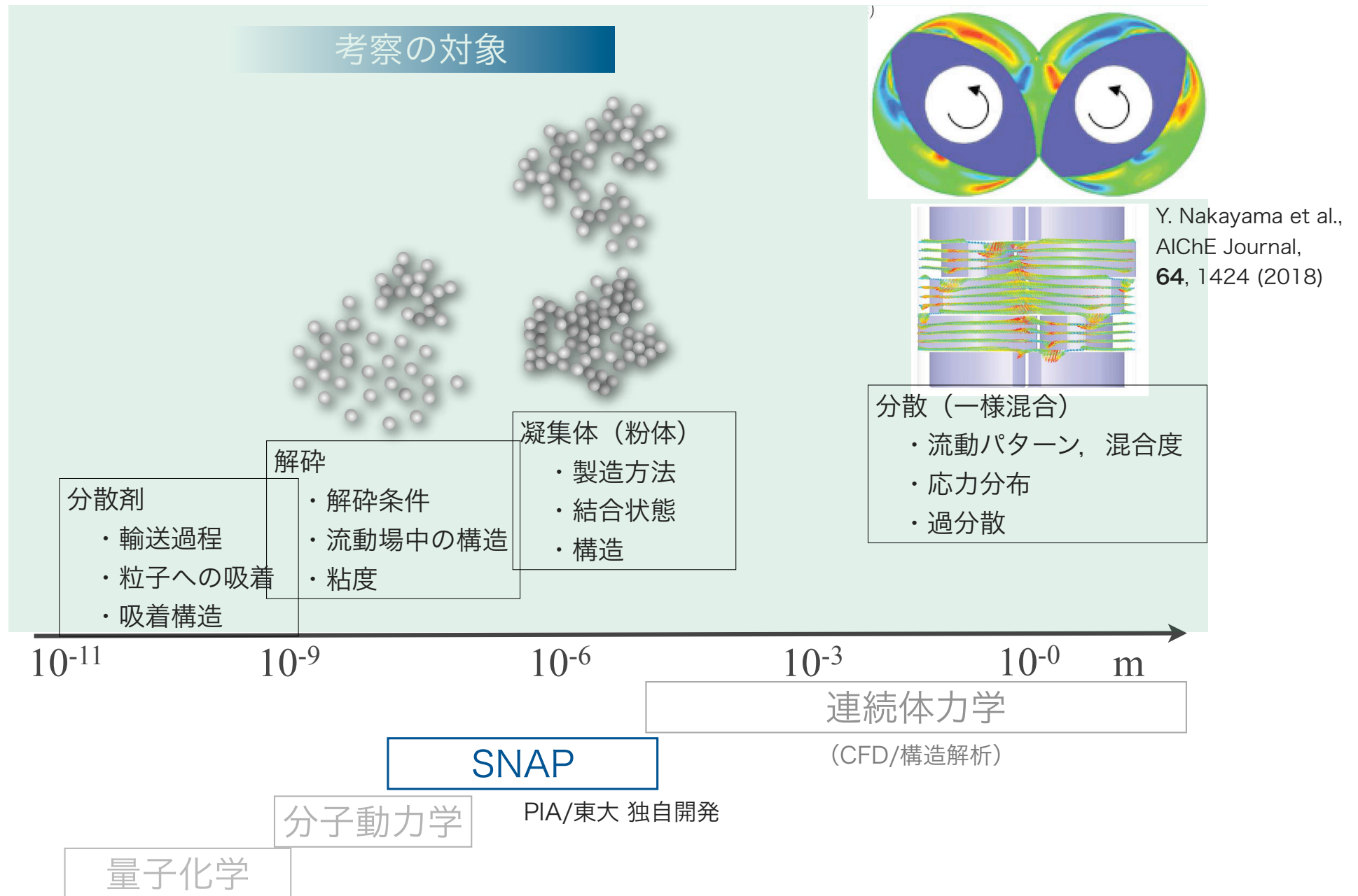
*企業関係者からよく耳にする
イメージ作りに困っている

本日の概略

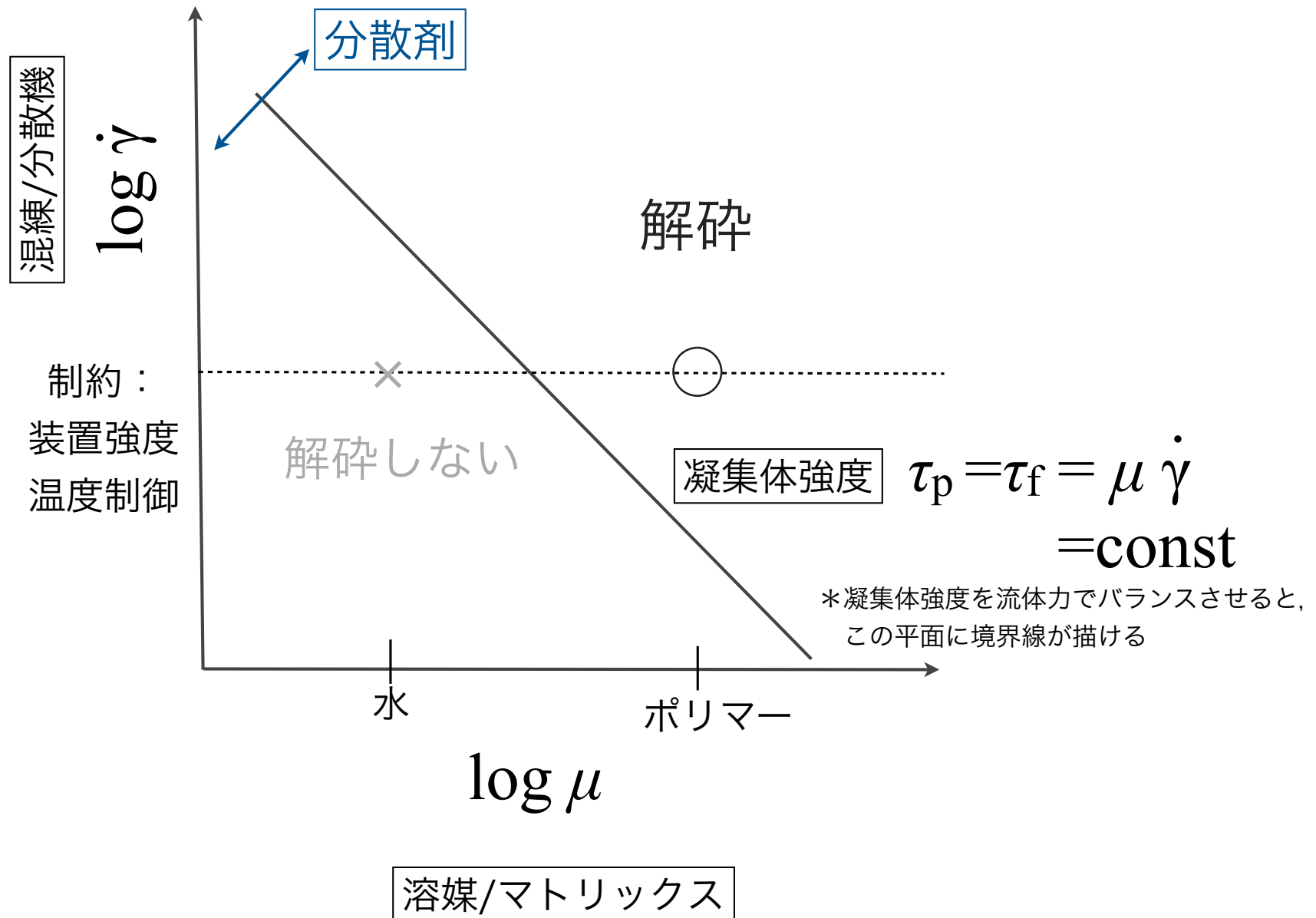
- 解砕ミュレーションから、

粒子サイズスケールでの粒子・分散剤の分散度を解析

混練のマルチスケール性

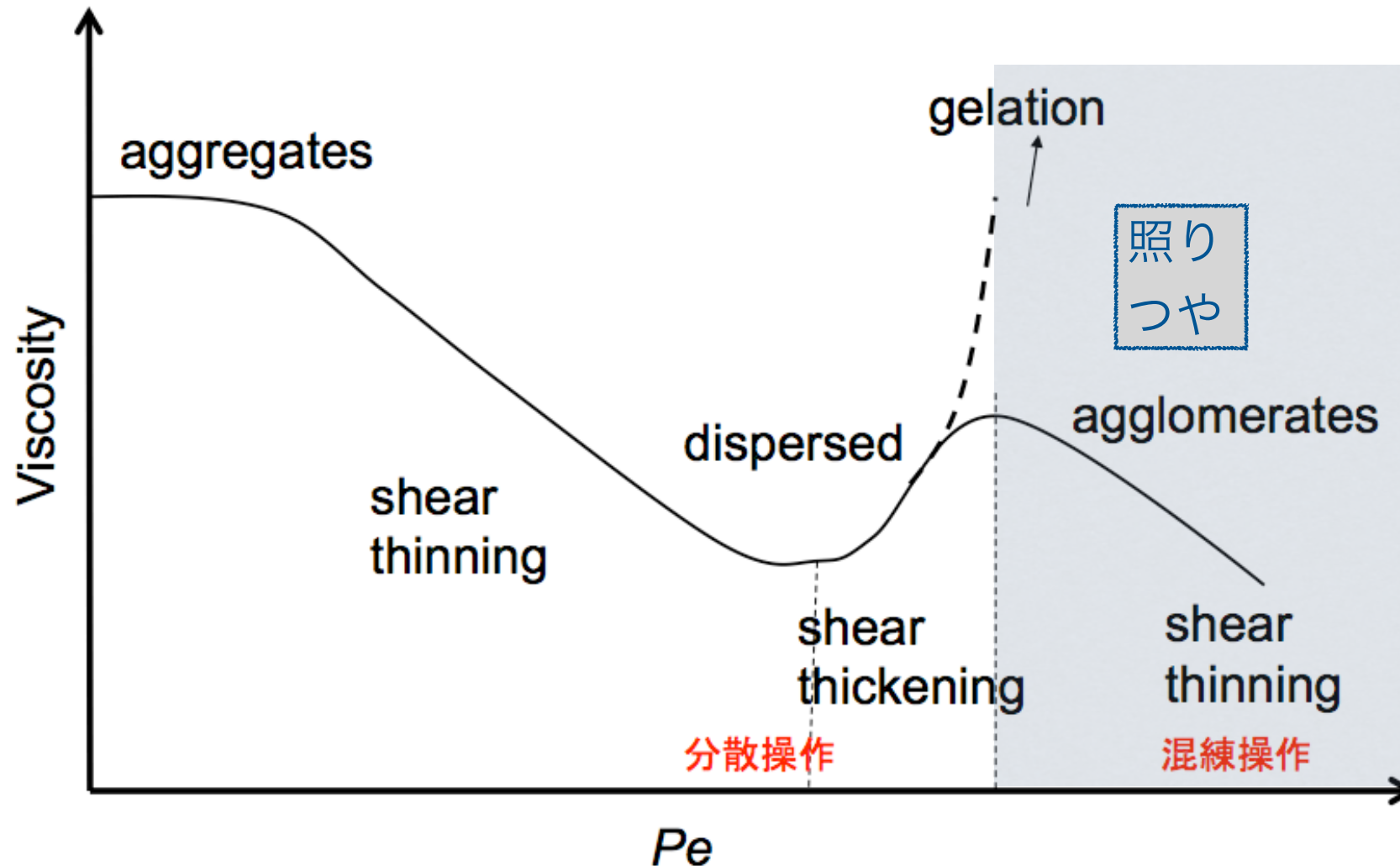


解砕の力学条件



混練とレオロジー特性①

-混練評価指標として-



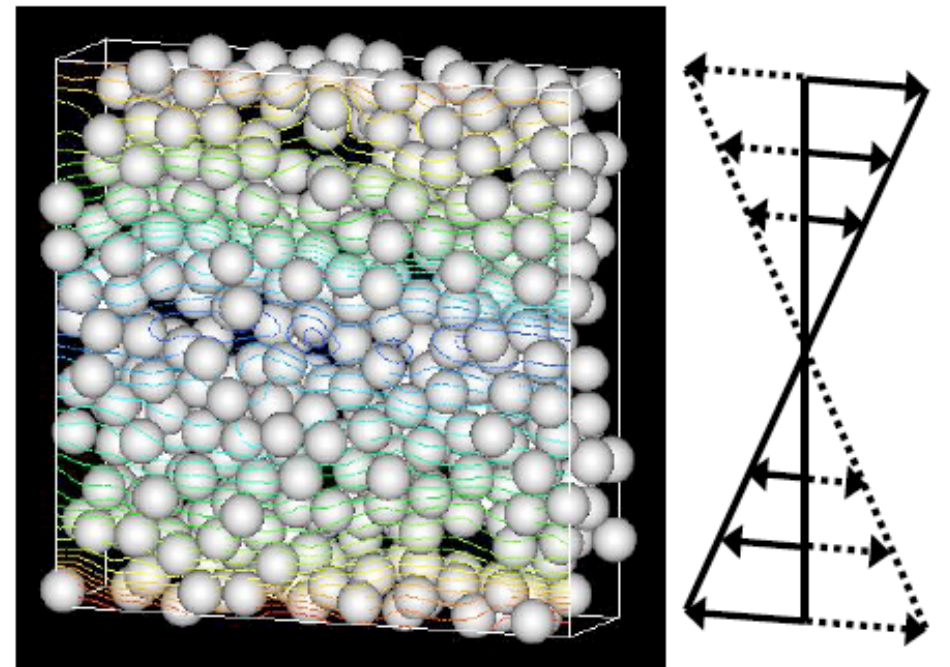
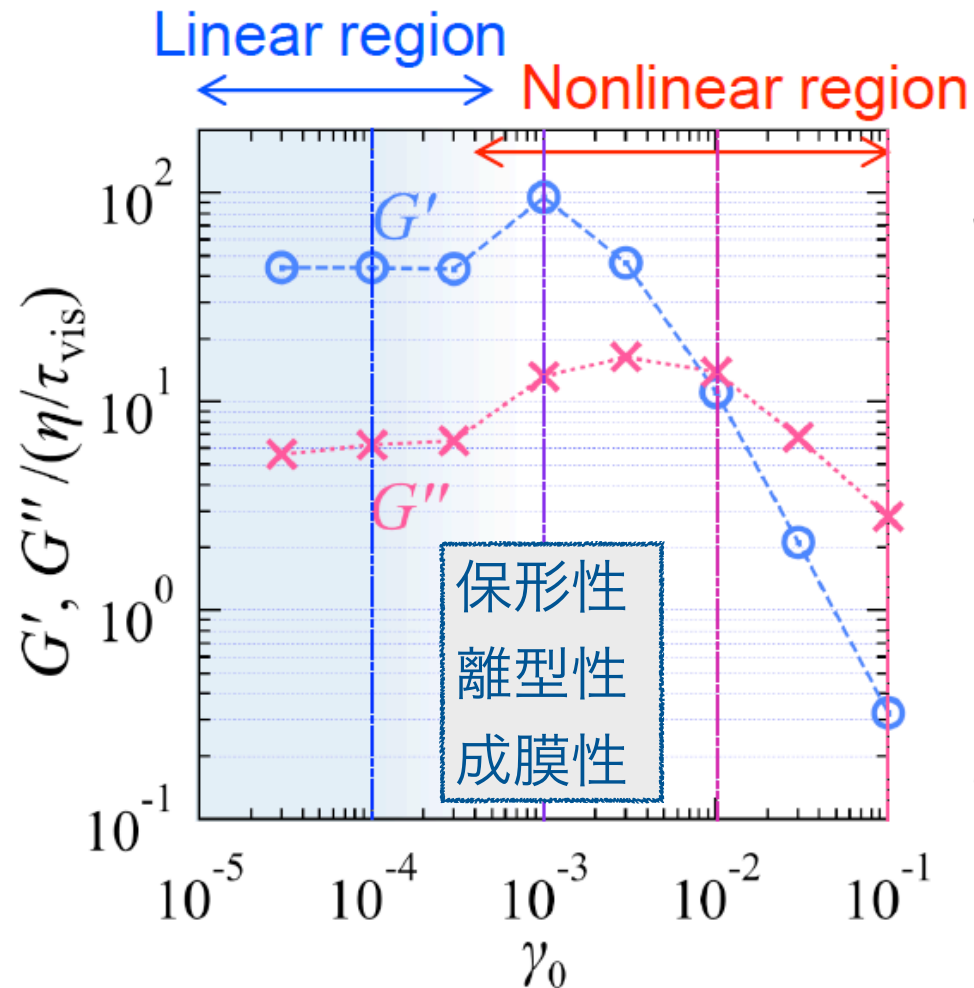
*山口由岐夫；

「機能材料の製造におけるテクノロジー&サイエンス」 LA106 (9/22)

「ものづくりの化学工学」丸善

混練とレオロジー特性②

-混練評価指標として-



Oscillatory shear

プロセス - 構造 - 機能 (応答)

*辰巳怜ら；

「粒子系濃厚溶液の粘弾性特性の直接数値シミュレーション」 LF306 (9/24)

解砕シミュレーション →混合の解析

流体運動（連続）

質量保存（非圧縮）

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$$

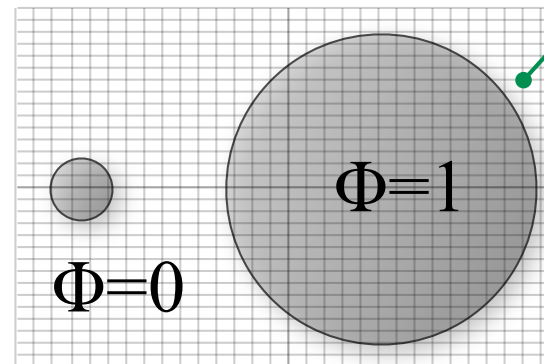
*高粘度系に対し， Stokes方程式でアプローチ
*非Newton性は， 考慮しない

運動方程式

$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \cancel{\mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v}} = -\nabla p + \nu \nabla^2 \mathbf{v} + \frac{1}{\rho_f} \nabla \cdot \mathcal{S} + \Phi \alpha$$

$\text{Re}_p = ud/\nu \rightarrow 0$ $\text{Pe}_p^{-1} = D_p/ud \rightarrow 0$

対流項 熱揺動項 粒子-流体連成項



粒子運動（離散）

並進運動

$$m \frac{d\mathbf{v}}{dt} = \mathbf{F}^{\text{co}} + \mathbf{F}^{\text{D}} + \mathbf{F}^{\text{h}}$$

接触力 付着力 流体力

$$\mathbf{F}^{\text{h}} = - \int_V \rho_f \phi_p(\mathbf{x}) \alpha(\mathbf{x}) dV$$

回転運動

$$I \frac{d\omega}{dt} = \mathbf{T}^{\text{co}} + \mathbf{T}^{\text{h}}$$

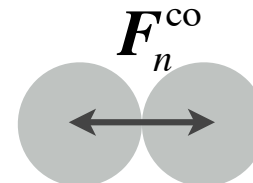
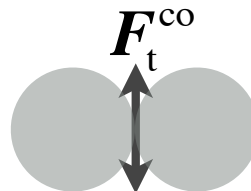
接触トルク 流体トルク

$$\mathbf{T}^{\text{h}} = - \int_V \{ \mathbf{r}_p(\mathbf{x}) \times \rho_f \phi_p(\mathbf{x}) \alpha(\mathbf{x}) \} dV$$

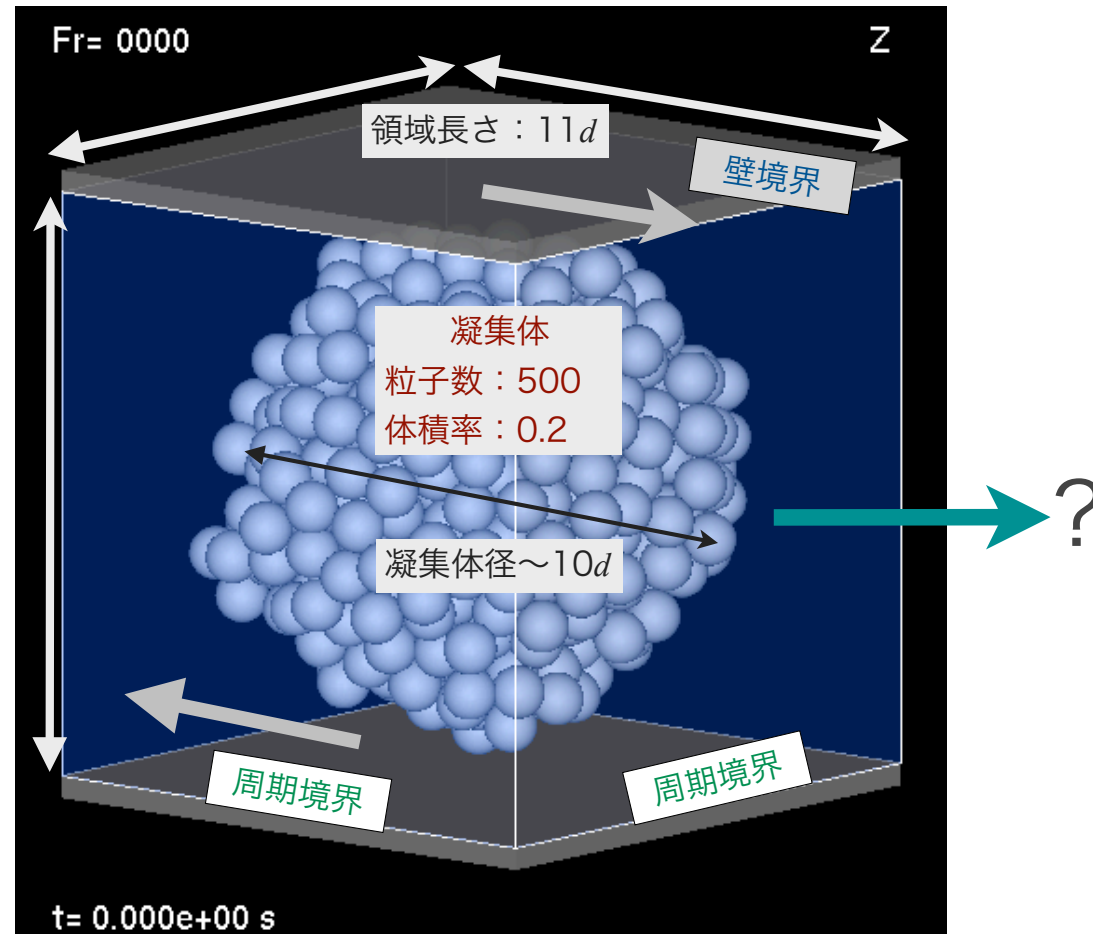
接触相互作用：離散要素法DEMのモデルを採用

- 接触力：粘弾性
- 摩擦則：アモントン-クーロン則

$$|\mathbf{F}_t^{\text{co}}| = \min(|\mathbf{F}_t^{\text{co}}|, \mu |\mathbf{F}_n^{\text{co}}|)$$



シミュレーション条件

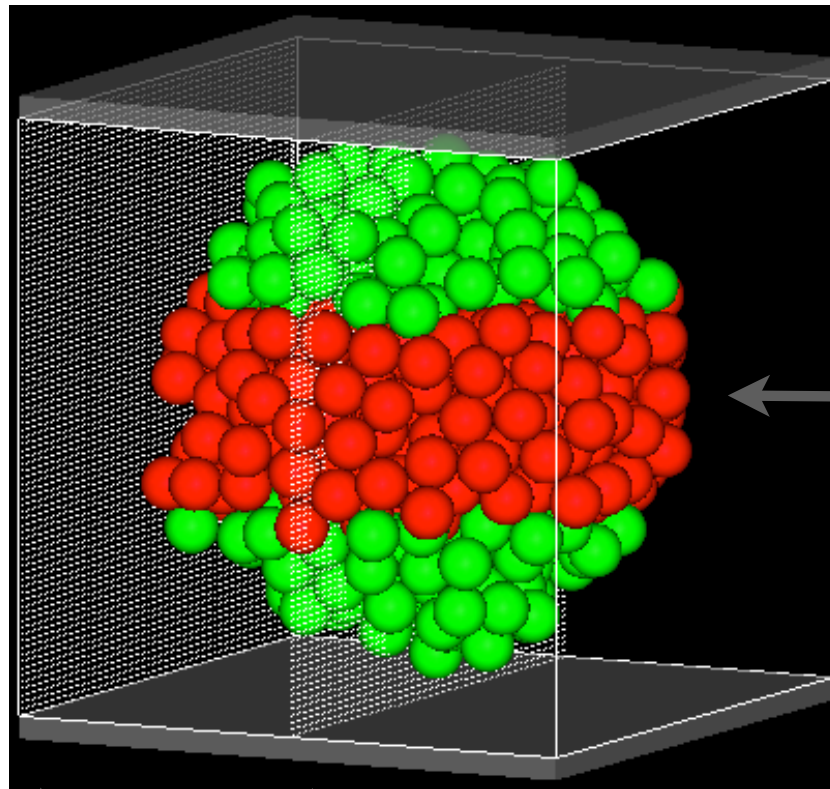


剪断応力 τ^* : 0.01 - 5.0

付着力 : van der Waals力型

印加ひずみ ε : $\dot{\gamma}t = 100$

流体・粒子運動＋トレーサー移動



粒子に色付けして
流動場中の混合度を観察

↑ ↑
粒子外部にトレーサー配置：
分散剤の代表点とみなす

*分散剤の移動は、
移流支配とみなしている

$$\text{Pe}^{-1} = D/ud \rightarrow 0$$

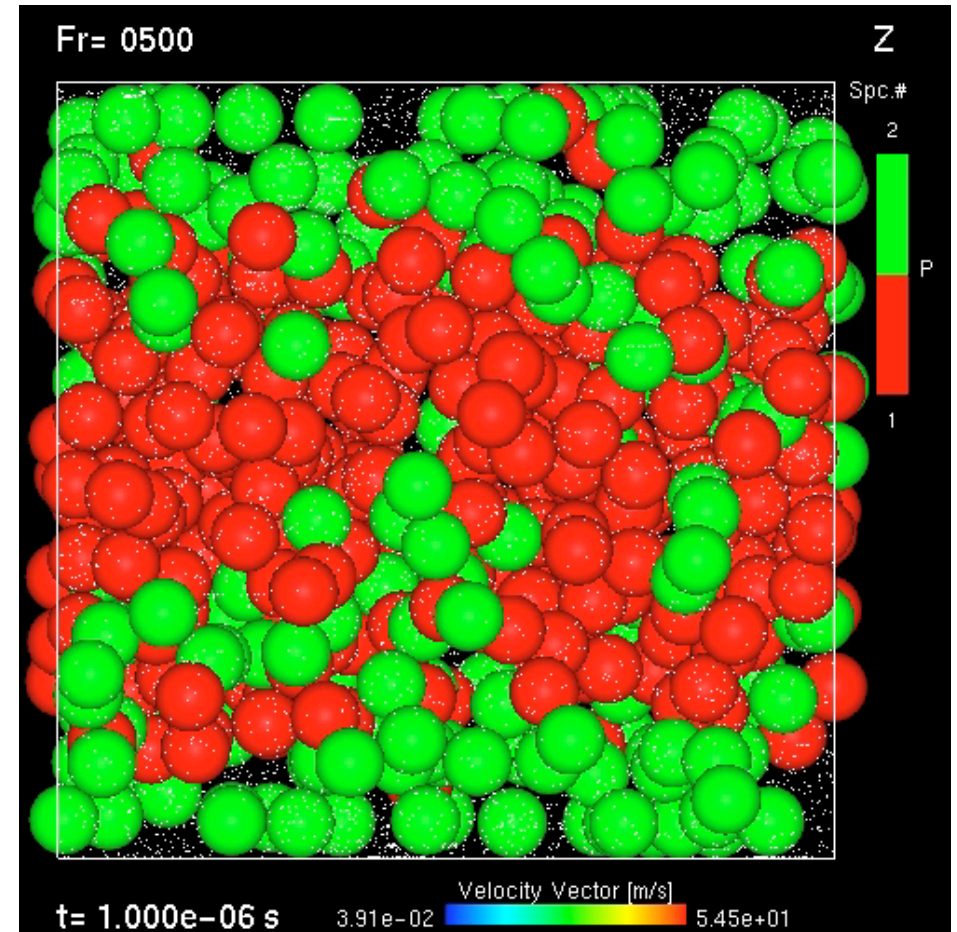
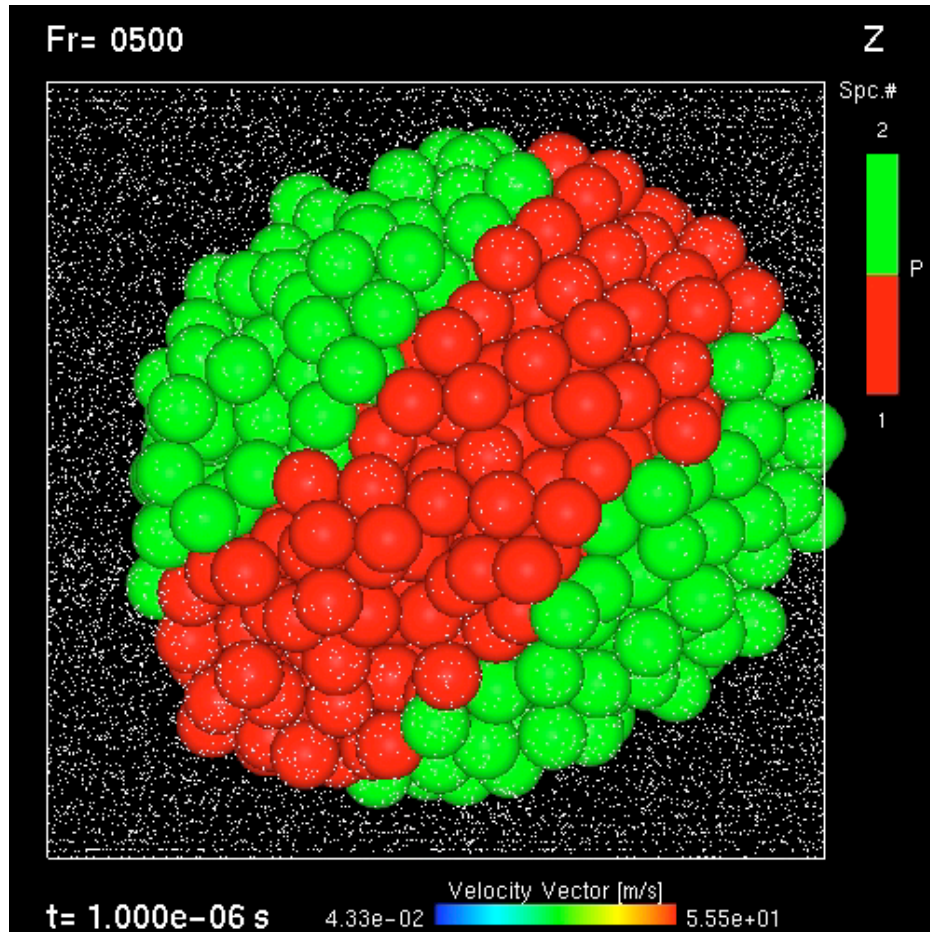
*トレーサー・粒子個数比

$$N_{\text{trc}}/N_p \sim 25$$

混合度：粒子・分散剤

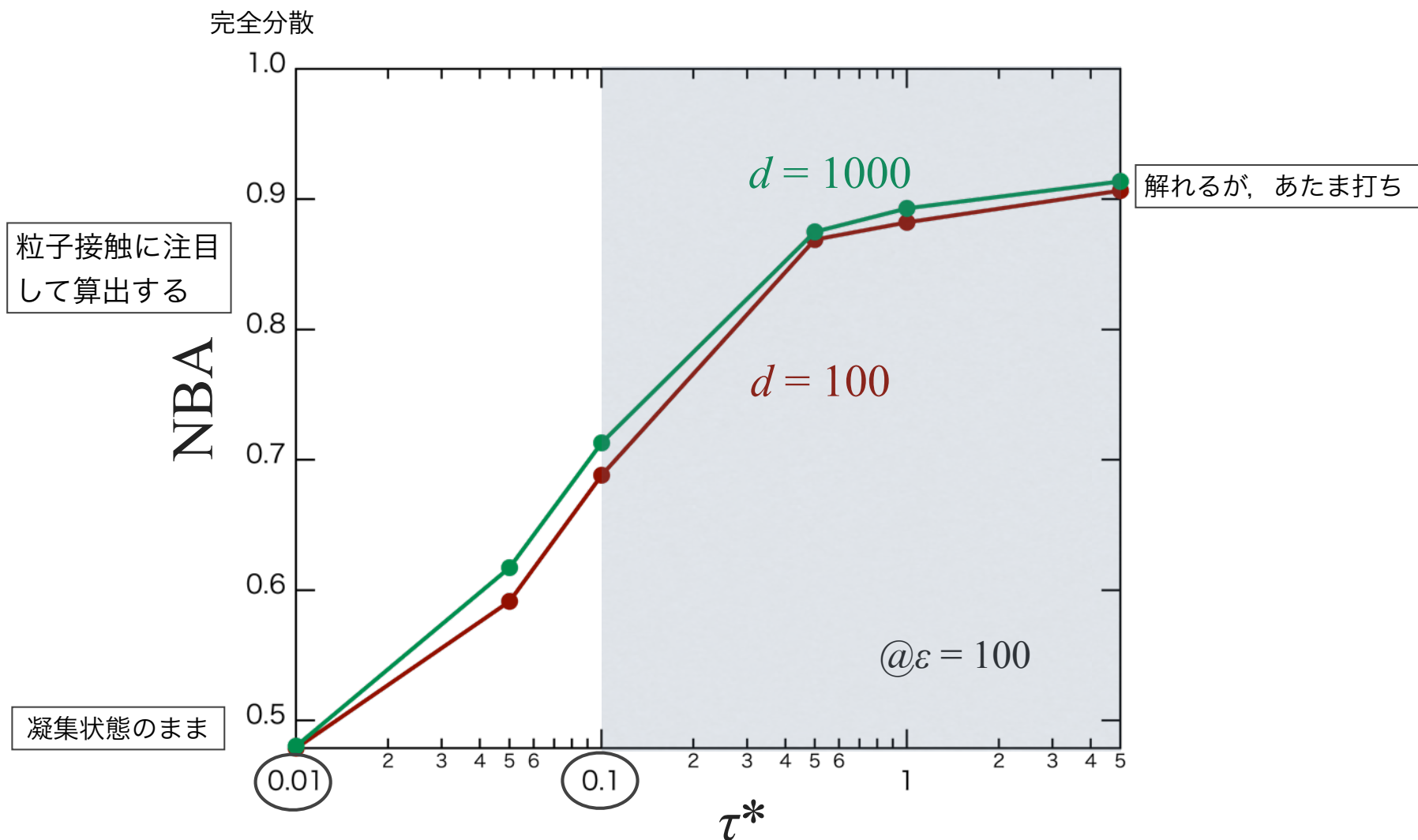
$\tau^*=0.01$

$\tau^*=1.0$



粒子：緩やかに混合，層状化する
分散剤：解砕すれば速やかに混合

無次元剪断応力とNBA



τ^* の対数 → 粒子接触に注目した分散度がS字状に変化
 τ^* の導入 → 解砕条件を基本的に議論できる

空間解像度と分散度 I_δ

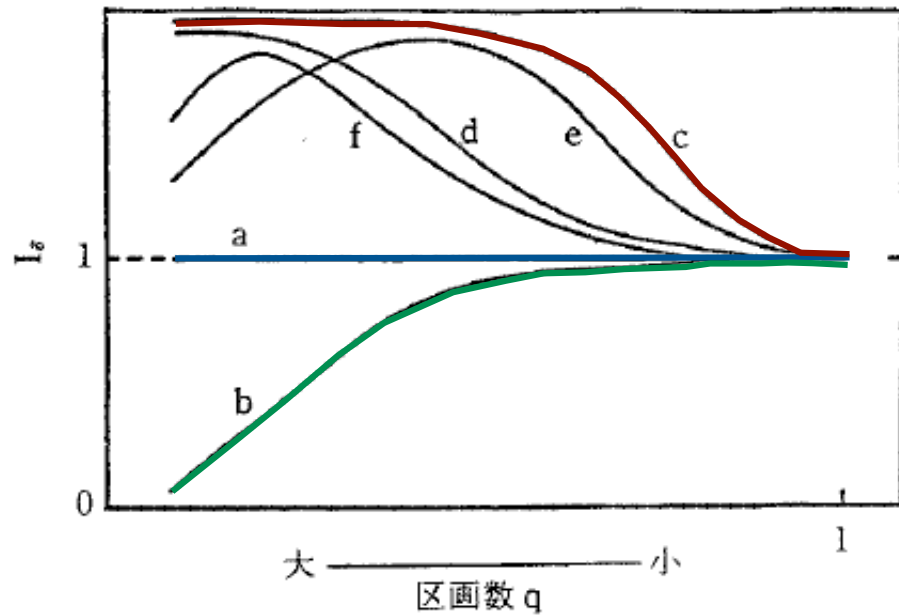
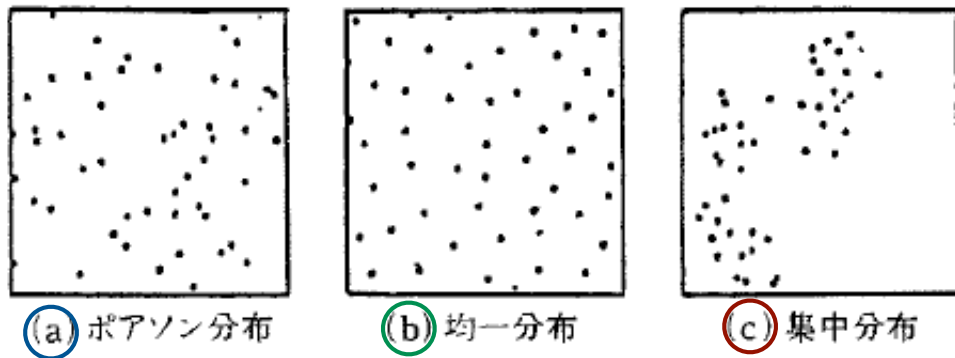
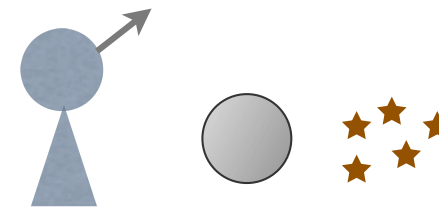
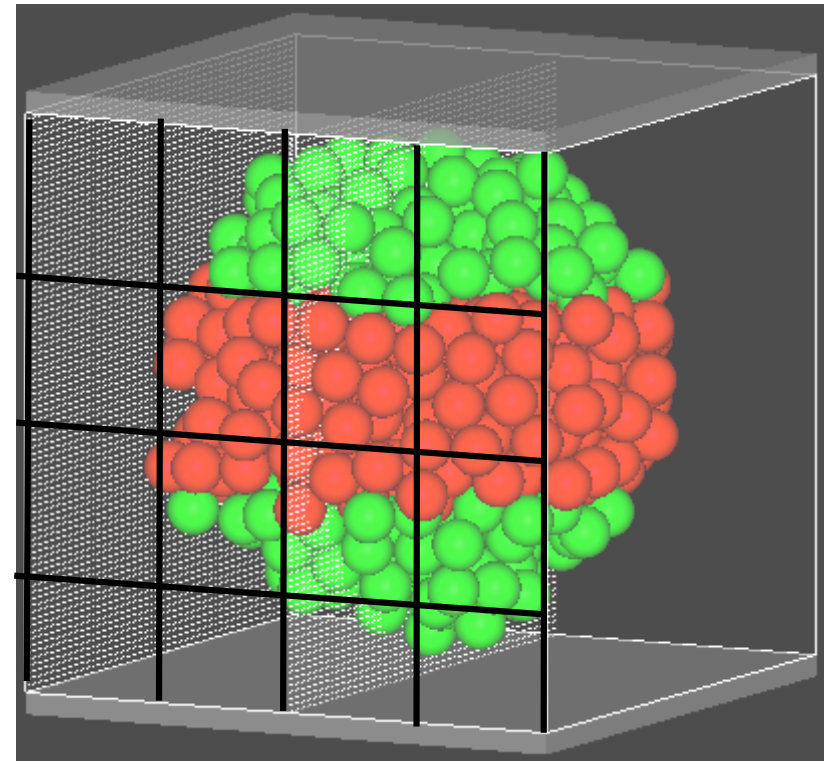


図2 森下の指数 I_δ と区画数 q

← 空間解像度

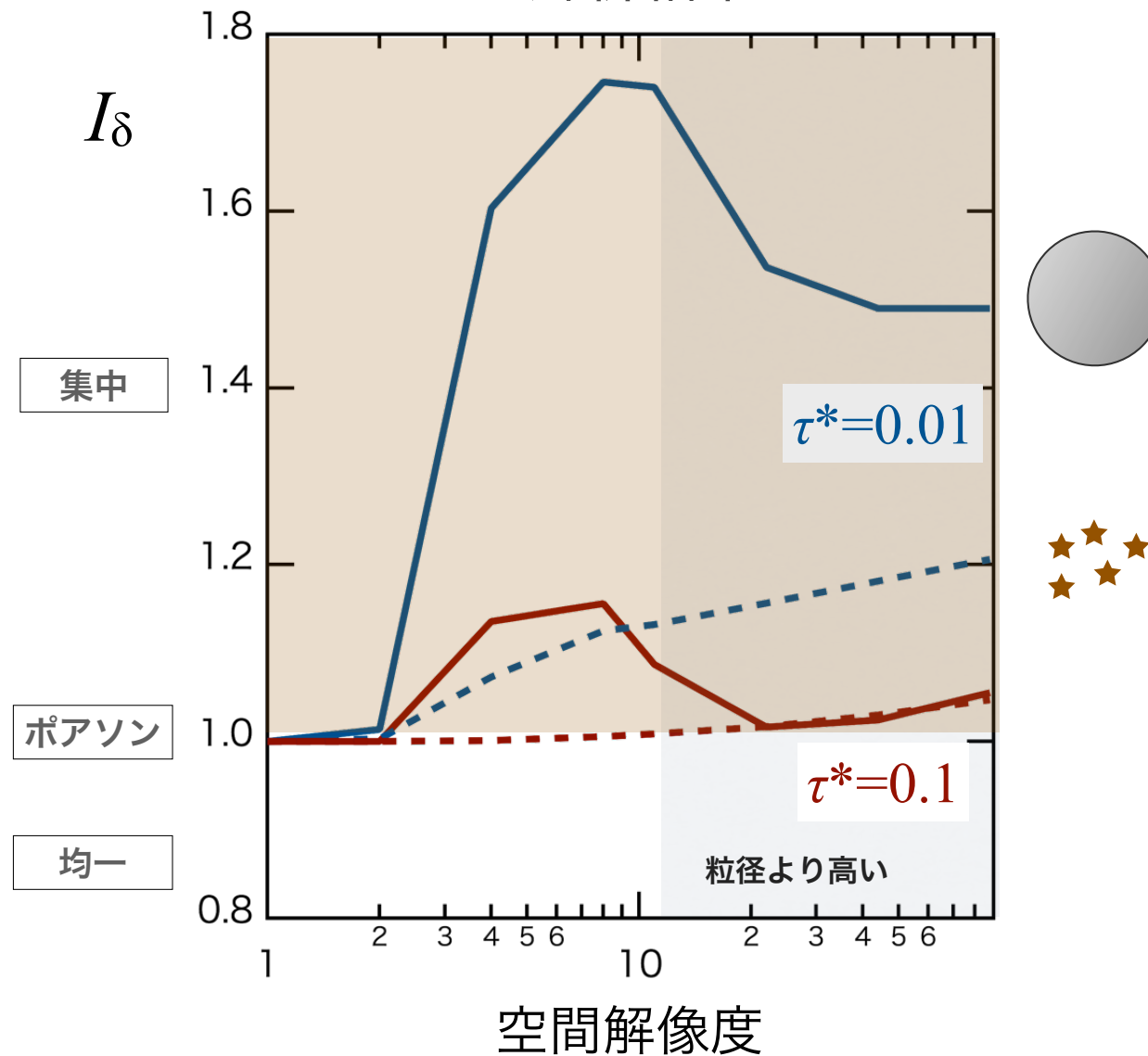
* 住田雅夫, 「高分子-充てん剤における粒子分散性」
日本ゴム協会誌 62 (1989) 438



- * 格子サイズ (解像度) を変化
- * 格子に入る粒子と分散剤をカウント
- * 分散度を I_δ を計算する

空間解像度と分散度 I_δ

- 解析結果 -



解砕によって高い解像度まで、
粒子・分散剤を分散可能となる

まとめ

- 直接的シミュレーション＋可視化手法で得たイメージ：
 - >> 粒子間の位置交換は遅い
 - >> 解砕と同時に分散剤を輸送させる。但し下記に留意する。
- 流体力に対する分散剤濃度（粒子への分配度）の最適条件
- 注目空間スケールに応じた分散度の存在