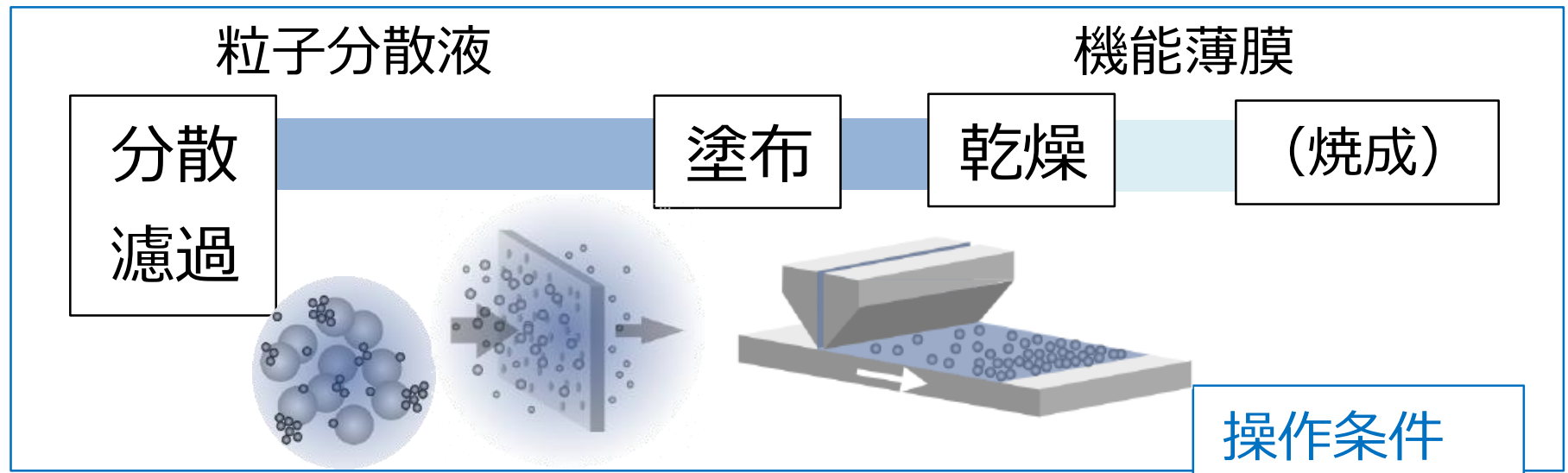


サブミクロンスケール数値シミュレーションによる 粒子分散液の流動・乾燥操作の考察

- 辰巳 怜 (東大環安セ)
- 小池 修 (PIA)
- 山口由岐夫 (PIA)
- 辻 佳子 (東大環安セ/東大院工)

粒子分散液を用いたものづくり



操作効率

- ・レオロジー特性 (粘度)
- ・粒子充填層の透水性

材料性能

- ・強度
- ・電気／熱伝導性
- ・光学特性

操作条件
粒子の性質

粒子系構造

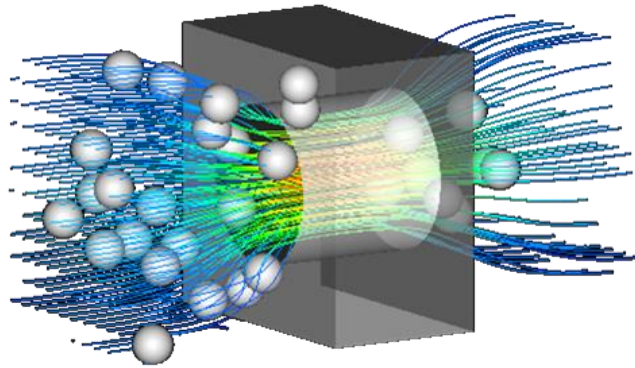
- ・充填性
- ・配向性
- ・粒子種分布

粒子系構造形成

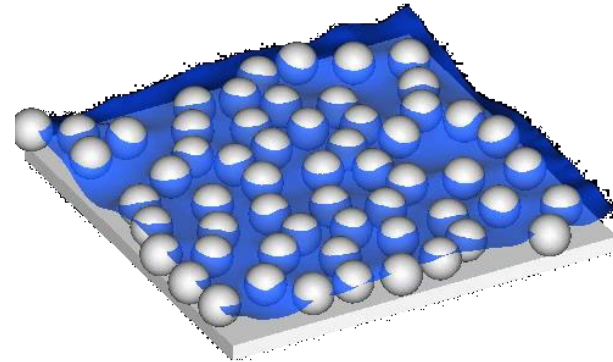
非平衡構造

操作：外場の印加

・流動 → 流体力



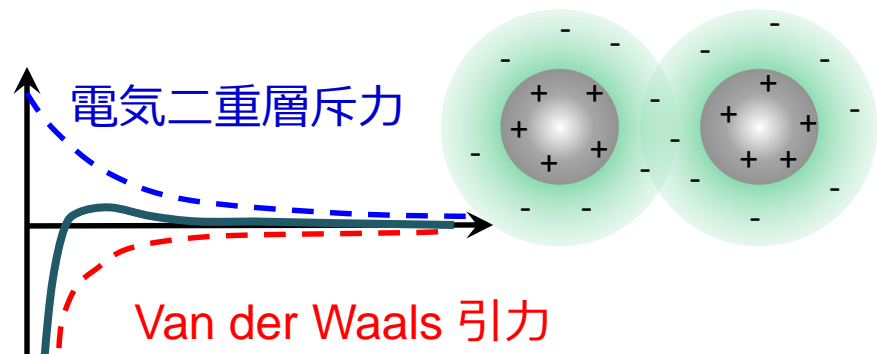
・乾燥 → 毛管力（自由表面）



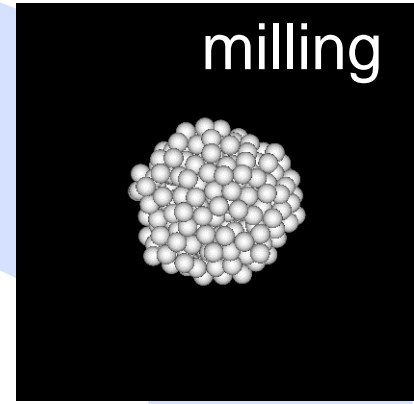
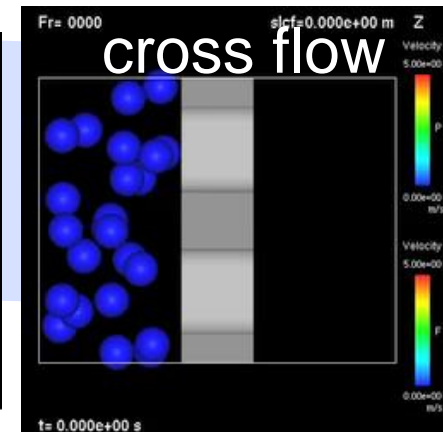
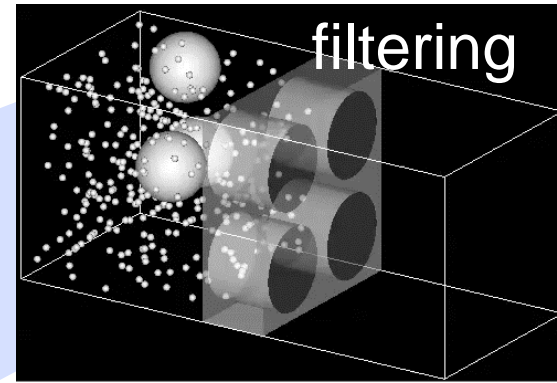
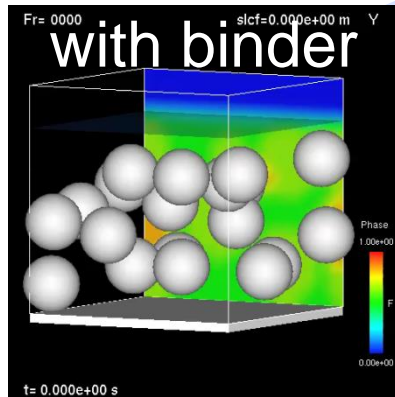
粒子による流動場・自由表面の擾乱 → 多体相互作用

平衡構造

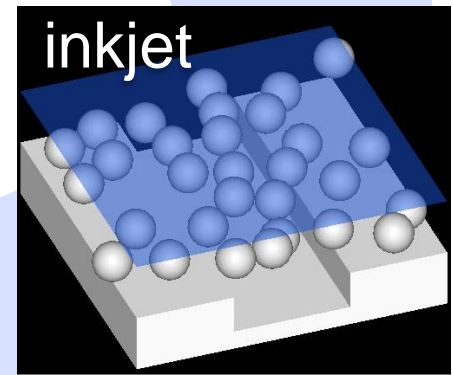
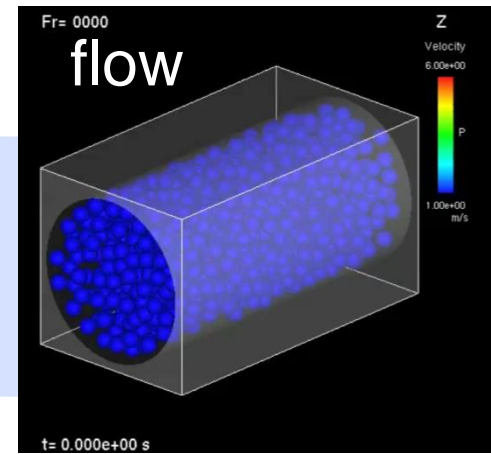
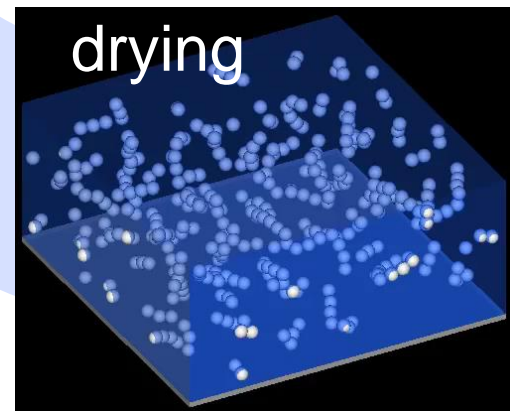
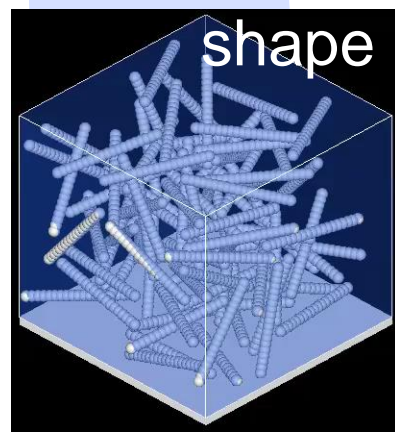
- ・ブラウン運動
- ・粒子間ポテンシャル
例：DLVO理論



数値シミュレータ：SNAP



コロイド科学から
コロイド工学へ



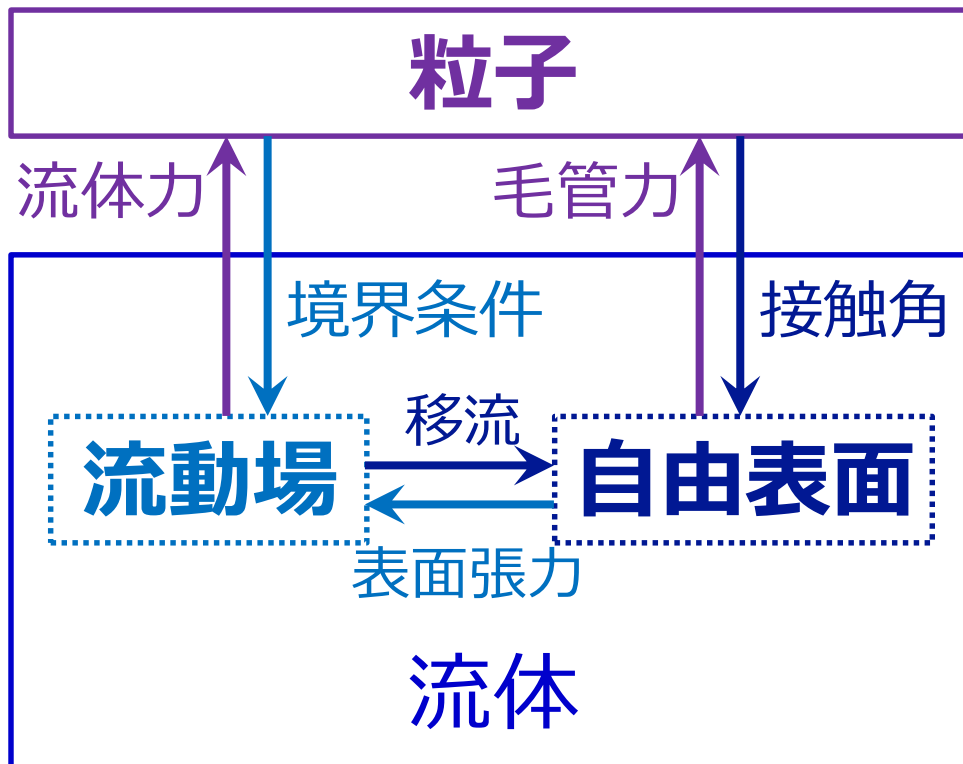
シミュレーション手法

直接数値シミュレーション (**D**irect **N**umerical **S**imulation)

粒子：Lagrangian approach 運動を追跡

流体：Eulerian approach 場の定点観測 (流動場, 自由表面)

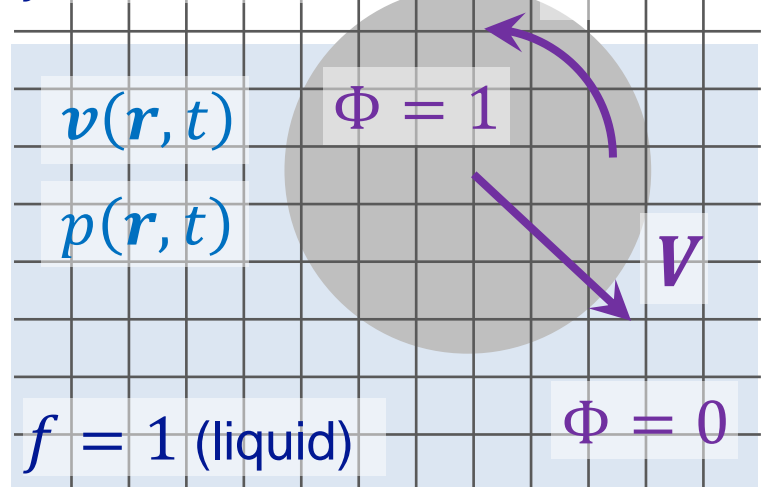
粒子 - 流体連成：Immersed Boundary 法



領域指示函数

粒子： $\Phi(\mathbf{r}, t)$ 液： $f(\mathbf{r}, t)$

$f = 0$ (gas)



基礎方程式

粒子

接触力

$$M\dot{\mathbf{V}} = \mathbf{F}^C + \mathbf{F}^{\text{DLVO}} + \mathbf{F}^H$$

$$I\dot{\boldsymbol{\Omega}} = \mathbf{N}^C + \mathbf{N}^H$$

流体力・毛管力

$$\mathbf{F}^H = \int \Phi \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} d\mathbf{r}$$

$$\mathbf{N}^H = \int \Phi(\mathbf{r} - \mathbf{R}) \times \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} d\mathbf{r}$$

流動場 $\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$

$$\rho \left(\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \nabla \mathbf{v} \right) = \nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} + \Phi \mathbf{K} \quad \text{粒子速度の強制} \quad \Phi \mathbf{v} = \Phi [\mathbf{V} + \boldsymbol{\Omega} \times (\mathbf{r} - \mathbf{R})]$$

$$\text{応力: } \boldsymbol{\sigma} = -p\mathbf{I} + [\nabla \mathbf{v} + (\nabla \mathbf{v})^T] + \gamma(\mathbf{I} - \hat{\mathbf{n}}\hat{\mathbf{n}})|\nabla f| + \mathbf{s}$$

表面張力 熱揺動

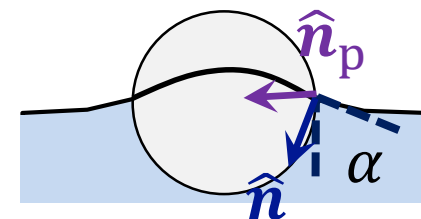
自由表面

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \left(\underbrace{\mathbf{v}}_{\text{流動}} + (1 - \Phi) \frac{\dot{\omega}}{\rho} \hat{\mathbf{n}} \right) \cdot \nabla f = 0$$

Level set 法

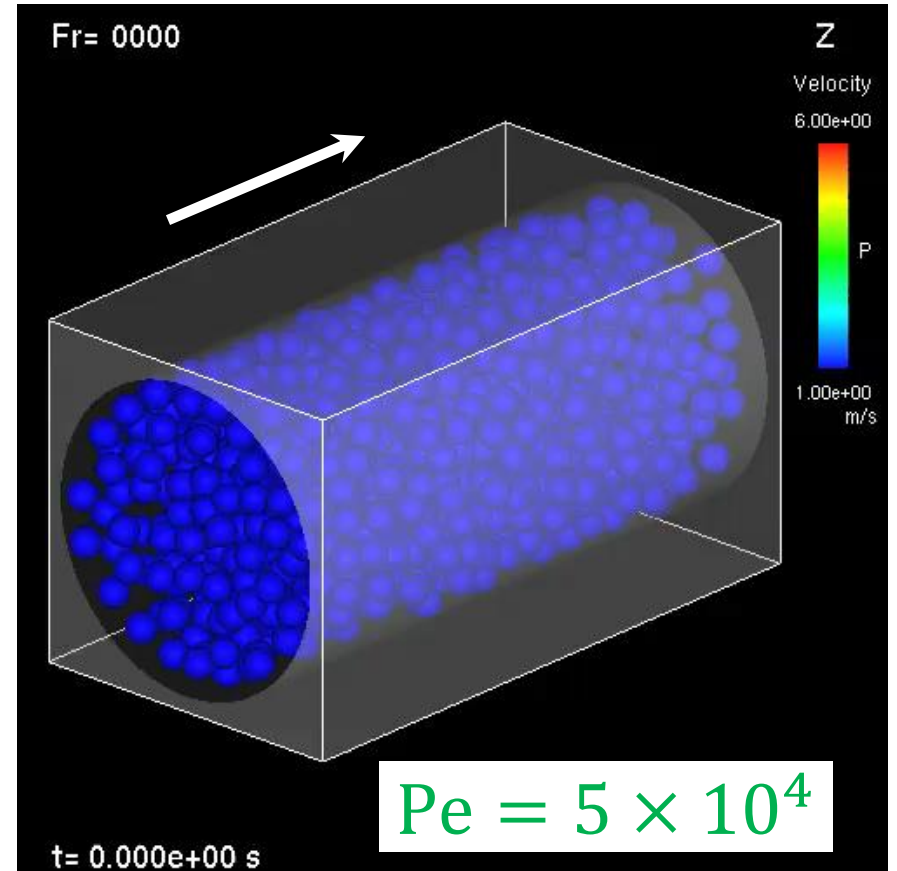
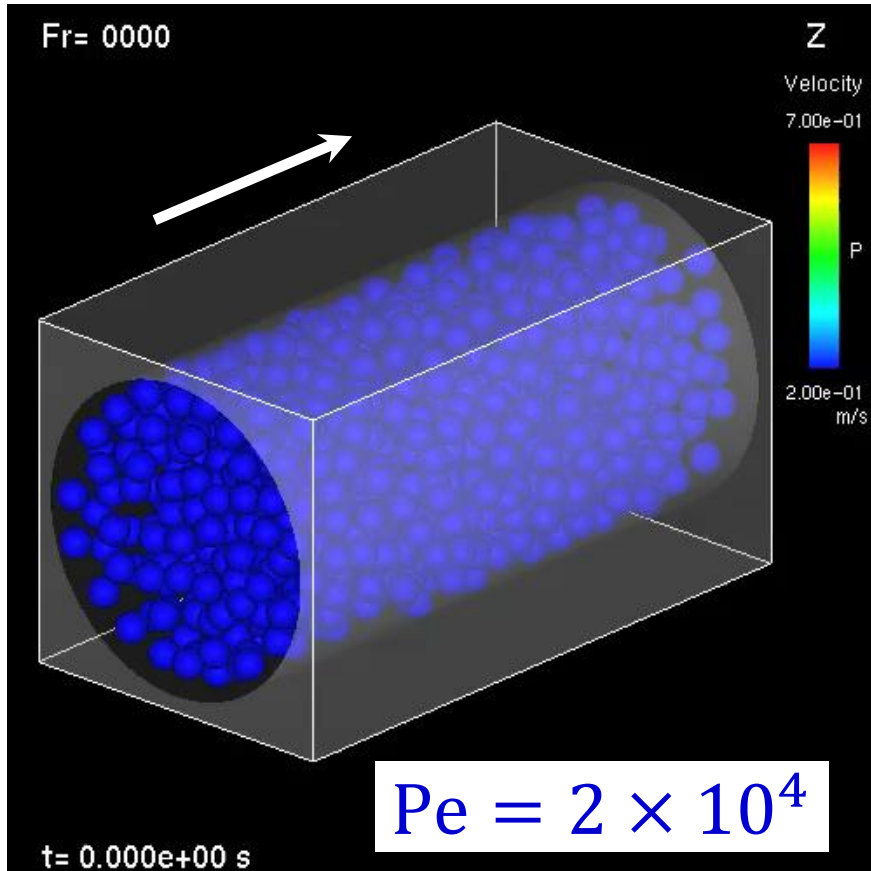
$$\hat{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{n}}_p = \cos \alpha \quad \text{接触角条件}$$

$$\hat{\mathbf{n}} = \nabla f / |\nabla f|$$



粘度 vs. 剪断率

円管圧力駆動流におけるレオロジー特性



Péclet 数

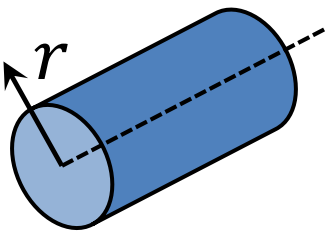
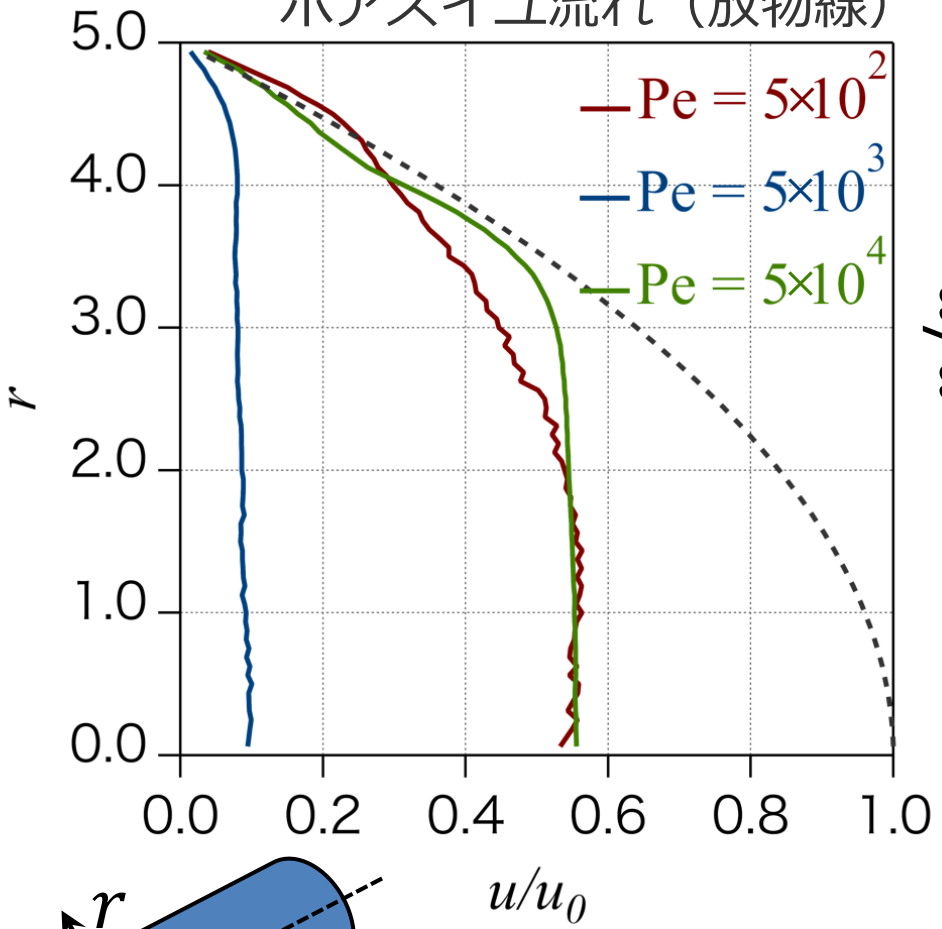
$$Pe = \frac{\dot{\gamma} d^2}{D}$$

$\dot{\gamma}$: 剪断率 d : 粒径
 D : 粒子拡散係数

粒径	100 nm
ゼータ電位	-50 mV
粒子体積分率	30 vol. %

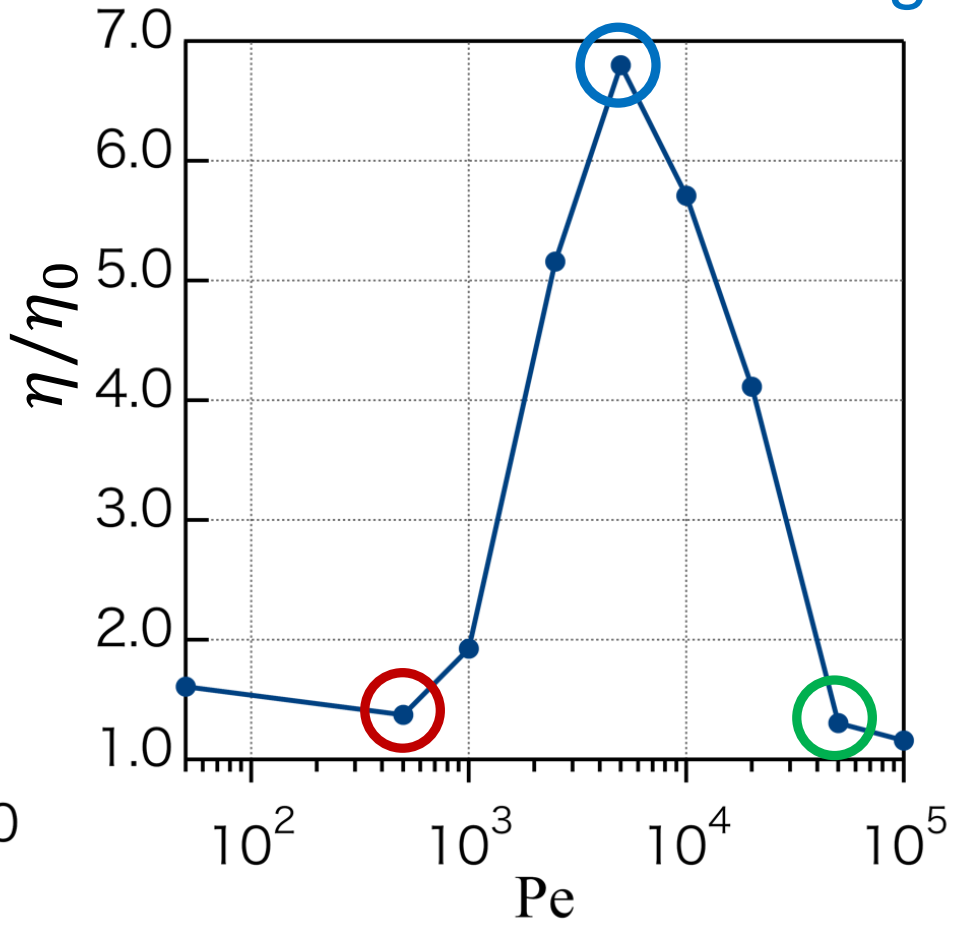
粘度 vs. 剪断率

粒子なしの場合：
ポアズイユ流れ（放物線）



流速分布
(管径方向)

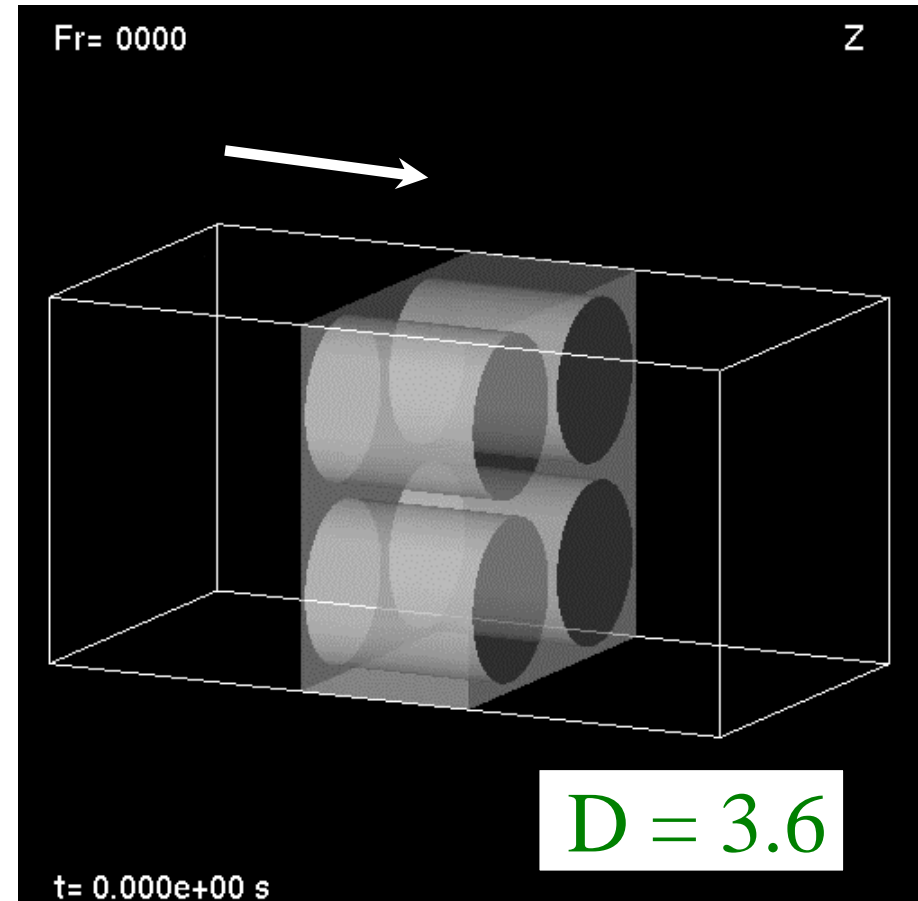
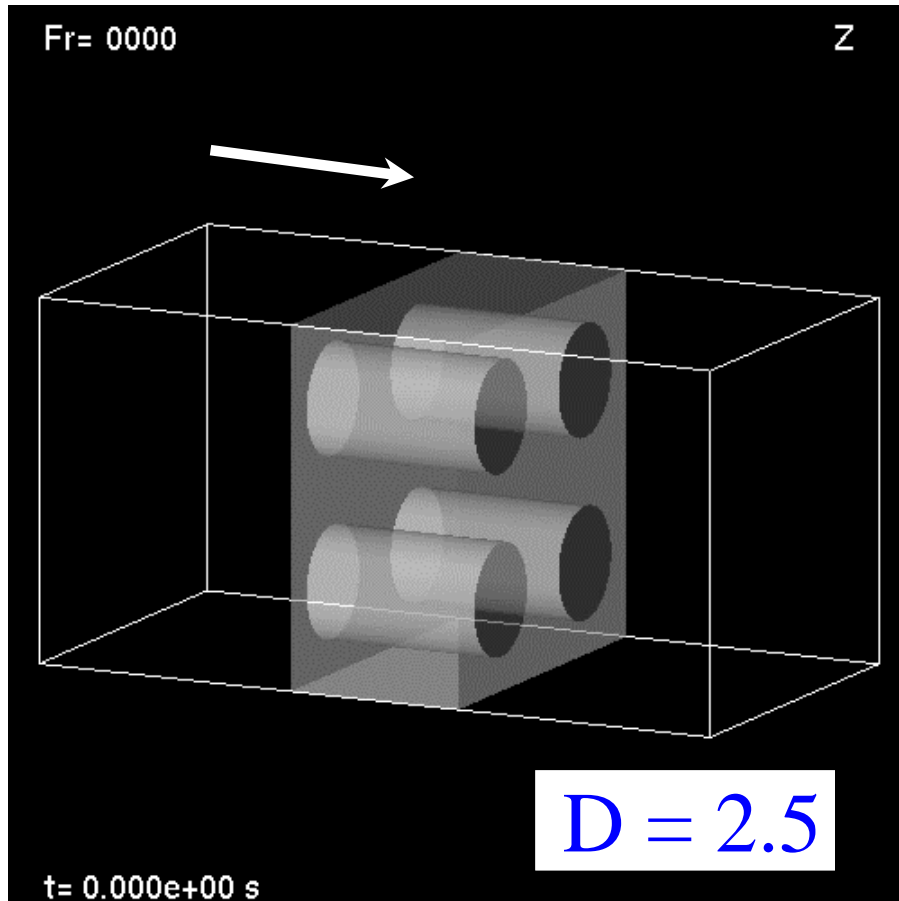
Shear-thickening



みかけ粘度 $\frac{\eta}{\eta_0} = \frac{Q_0}{Q}$
 \propto 流量の逆数

透過抵抗 vs. 細孔径

デッドエンド濾過：細孔を通過する圧力駆動流

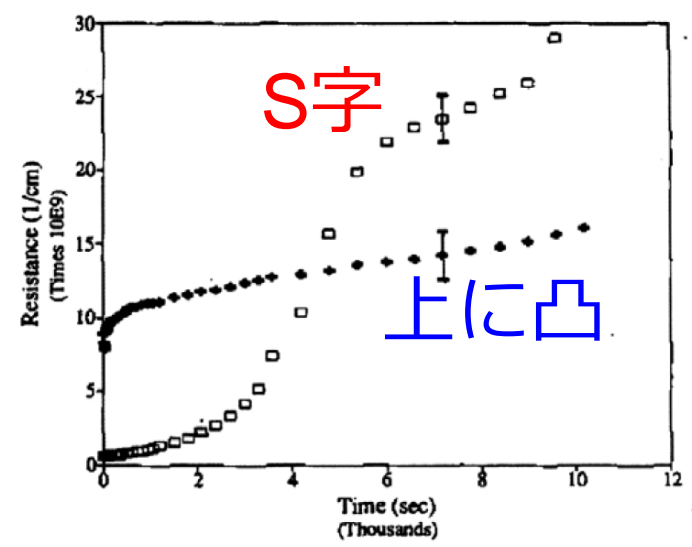
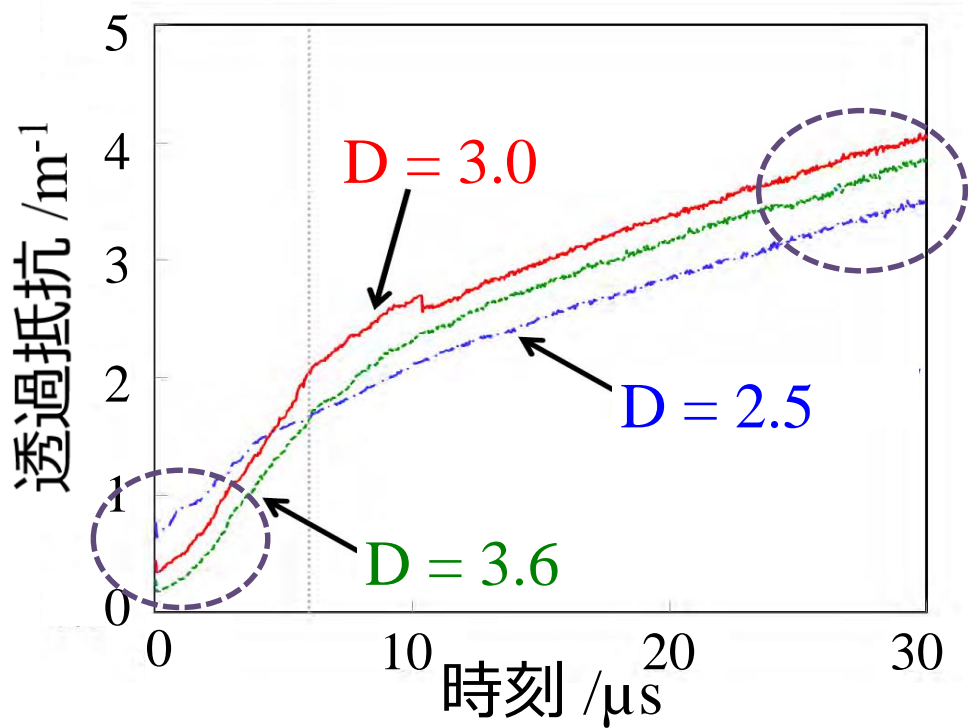
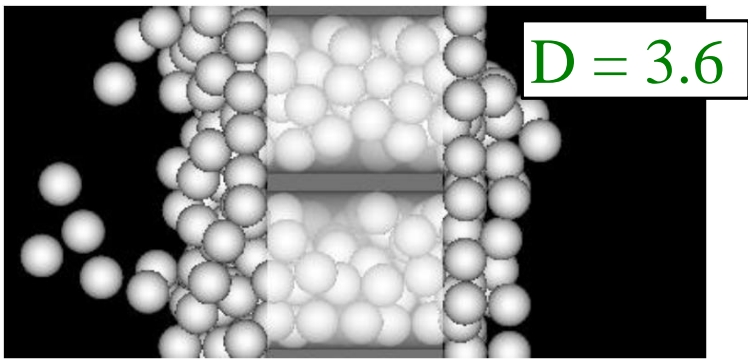
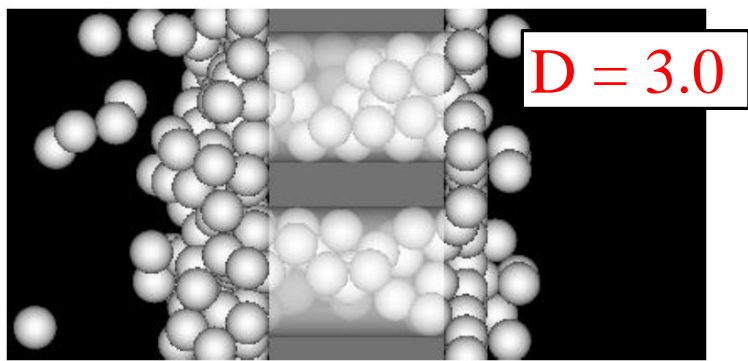
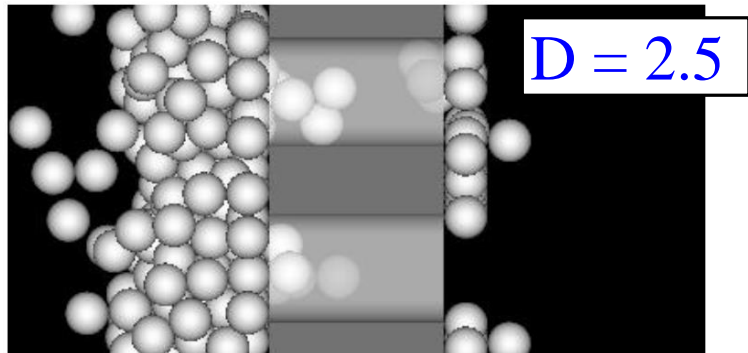


$D = \text{細孔径/粒径}$

粒径	100	nm
ゼータ電位	-40	mV

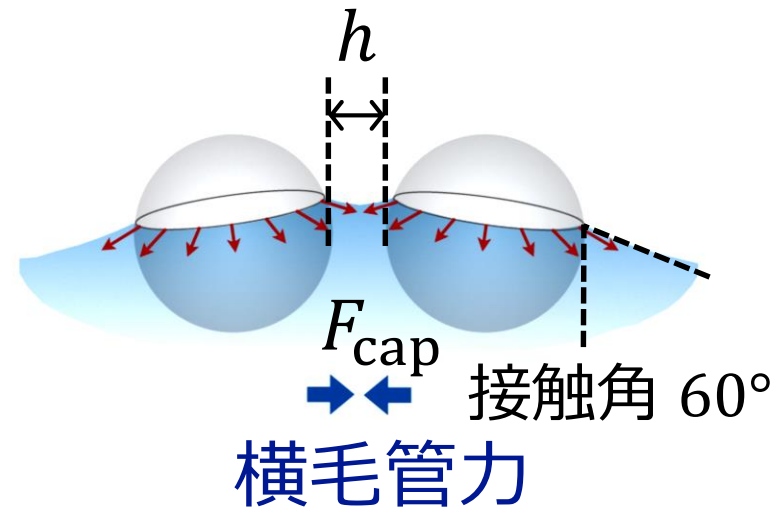
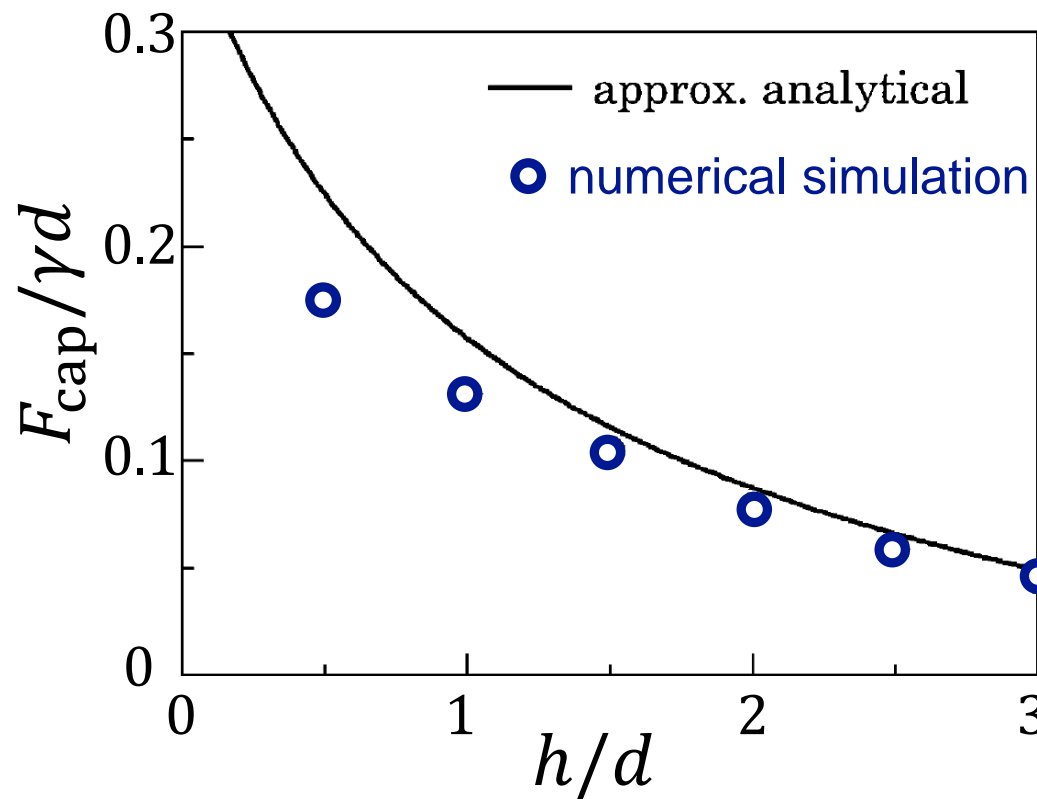
透過抵抗 vs. 細孔径

$D = \text{細孔径} / \text{粒径}$



毛管力：乾燥における構造形成

自由表面-粒子接触線に表面張力が作用



γ : 表面張力

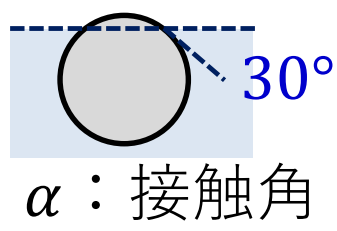
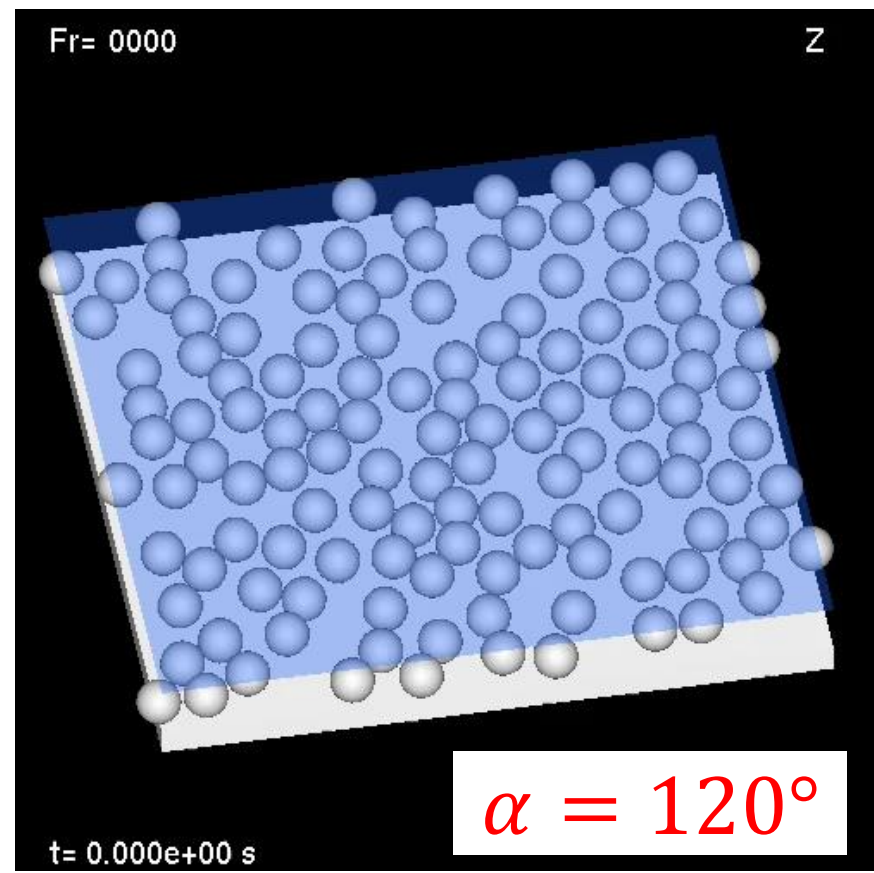
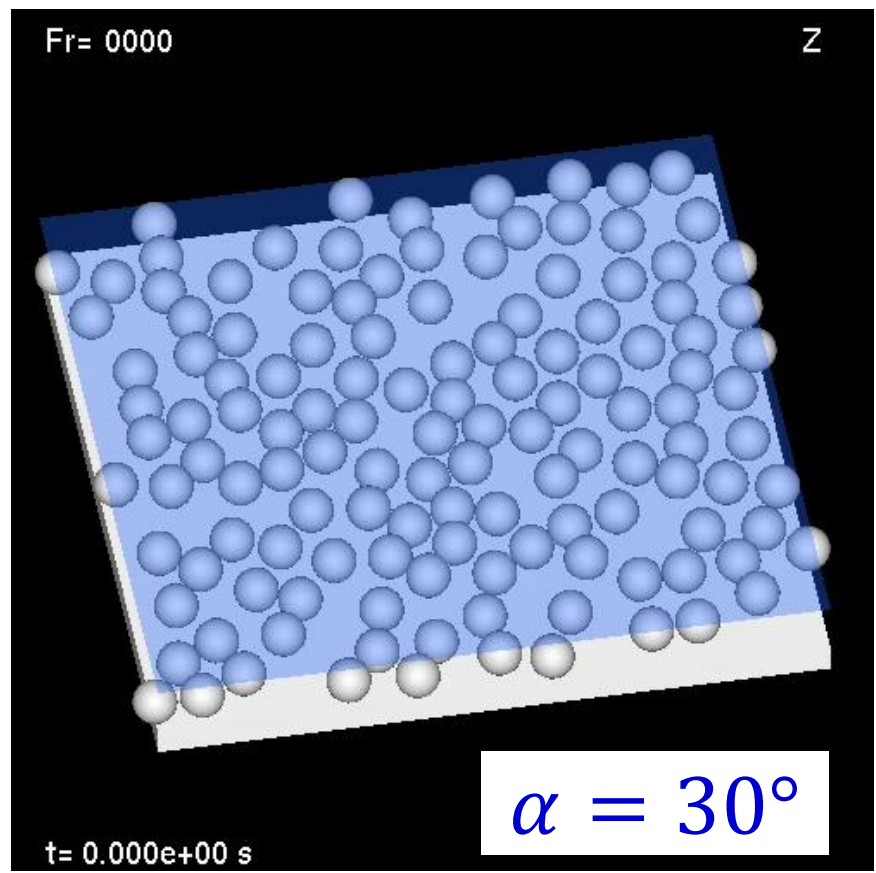
d : 粒径

粒子の縦方向自由度の拘束

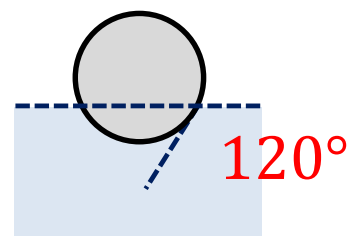
→ 自由表面の変形 → 横毛管力

粒子凝集 vs. 濡れ性

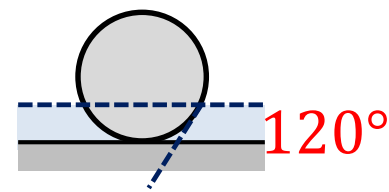
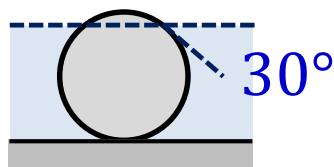
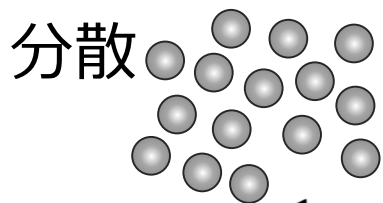
粒子分散液膜の乾燥



粒径	100	nm
初期液膜厚	120	nm
ゼータ電位	-50	mV



粒子凝集 vs. 濡れ性

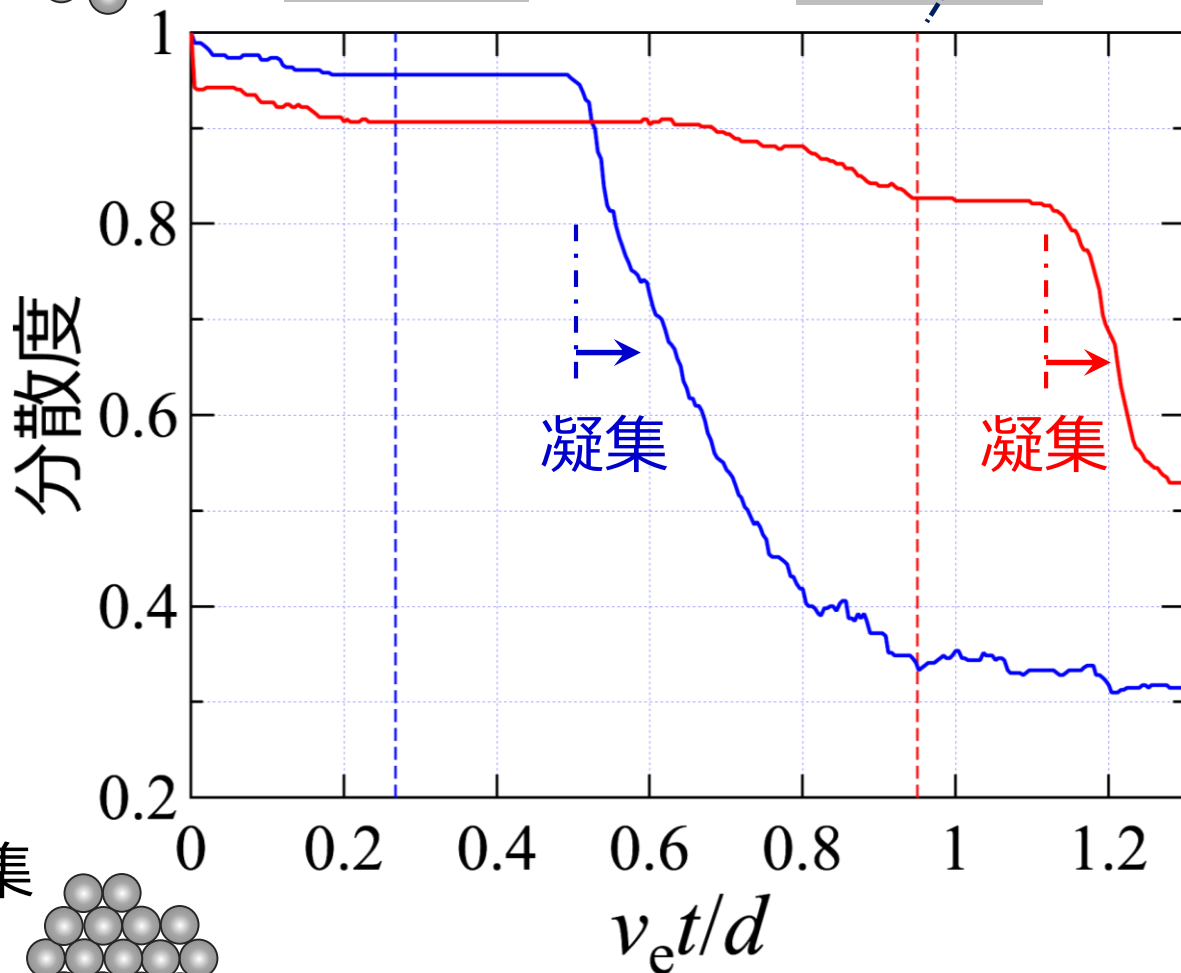


$$\text{分散度} = 1 - \frac{\langle N \rangle}{N_{\max}}$$

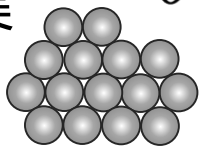
N : 接触粒子数

$N_{\max} = 6$:

最大接触数(2次元)



凝集



総括

数値シミュレーションによる原理追究

→ ものづくりの指針へ

