

せん断場での非凝集系分散液の shear-thinningシミュレーション

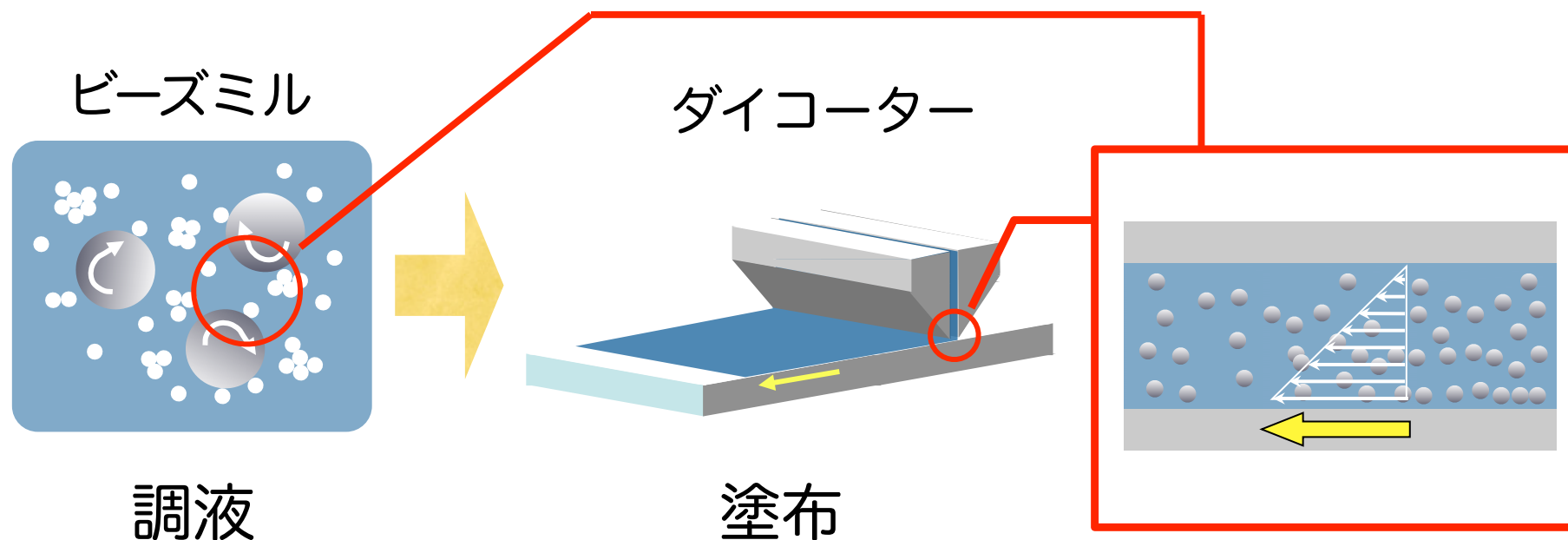
－ 粒子系構造と粘度 －

○安藤 努・小池 修・藤田昌大・山口由岐夫

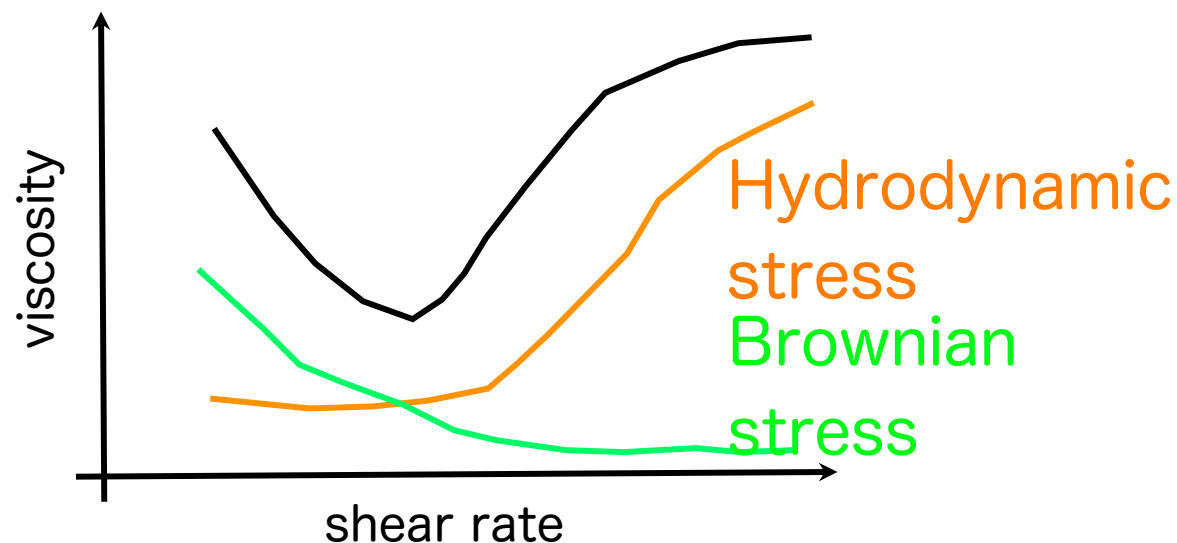
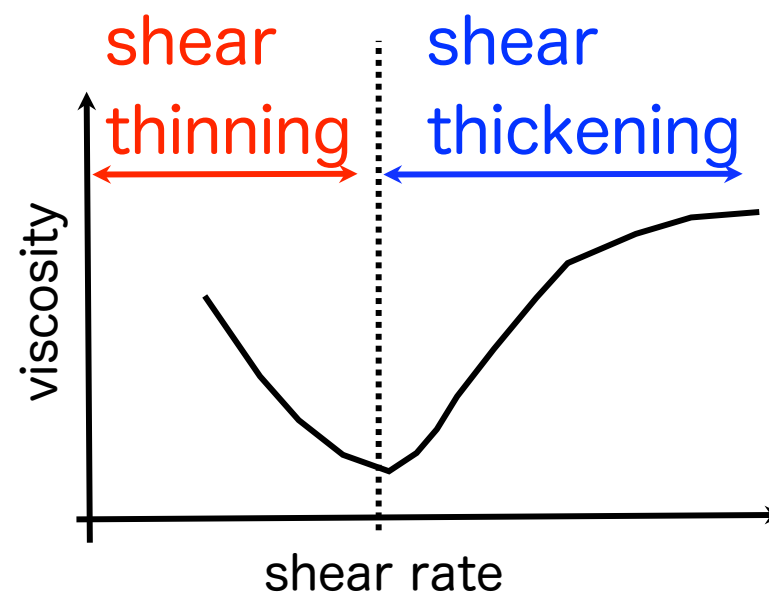
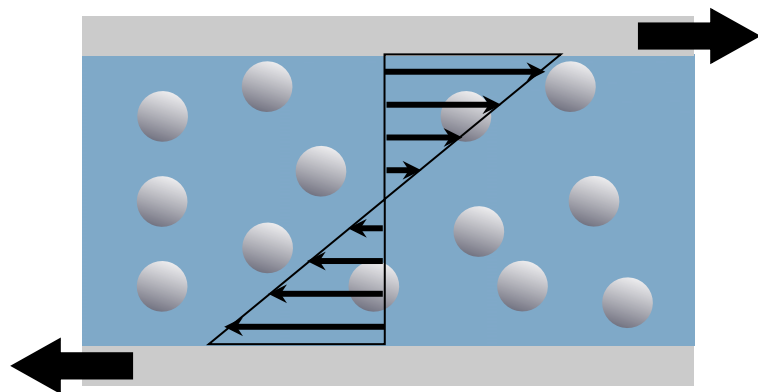
東京大学大学院工学研究科

研究の背景

微粒子分散液を扱う製造プロセスにおいて、塗液のレオロジー特性は品質と効率に影響を与える。



微粒子分散液のレオロジー



『粒子系の構造形成が分散液のレオロジーに影響を及ぼす』という考えが一般的

D.R. Foss and J.F. Brady, J. Fluid Mech. (2000), 407 p.167.

本研究の目的

非凝集分散液におけるせん断速度と粘度の関係を
シミュレーションによって得られた結果を
もとに粒子の構造形成の観点から議論する.

シミュレーションには、固液混相流シミュレーター
SNAP-F (Structure of NAno Particles – Flow)
を使用する.

SNAP-Fは,

- 粒子運動と流体運動の2 way coupling
- 粒径以下の解像度で溶媒流れをモデル化

⇒濃厚系を扱うことが可能

シミュレーション手法

流体場

支配方程式

非圧縮流体の連続の式

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

非圧縮揺動Navier-Stokes 方程式

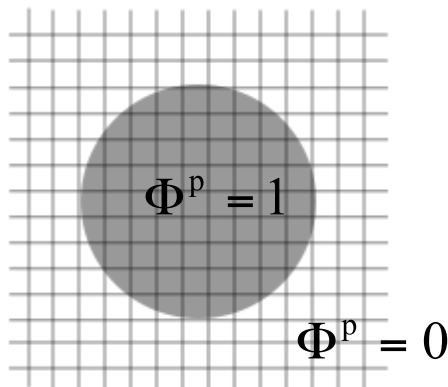
$$\frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \times \nabla \mathbf{v} = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \nu \nabla^2 \mathbf{v} + \frac{1}{\rho} \nabla \times \mathbf{S} + \Phi^p \dot{\mathbf{a}}$$

$\mathbf{S}$ 揺動ストレステンソル

$\dot{\mathbf{a}}$ 粒子による加速度

Φ^p 相関数

$$\dot{\mathbf{a}} = \frac{\mathbf{v}^p - \mathbf{v}}{\Delta t} + \frac{1}{\rho} \nabla p + \mathbf{v} \times \nabla \mathbf{v} - \nu \nabla^2 \mathbf{v} - \frac{1}{\rho} \nabla \times \mathbf{S}$$



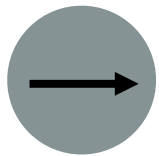
$$\Phi^p = 0 \Rightarrow \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} + \mathbf{v} \times \nabla \mathbf{v} = -\frac{1}{\rho} \nabla p + \nu \nabla^2 \mathbf{v} + \frac{1}{\rho} \nabla \times \mathbf{S}$$

$$\Phi^p = 1 \Rightarrow \mathbf{v} = \mathbf{v}^p$$

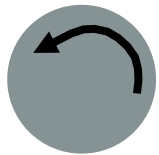
$\mathbf{v}^p$ 粒子の速度

シミュレーション手法

粒子運動



$$m \frac{dV}{dt} = \mathbf{F}^c + \mathbf{F}^D + \mathbf{F}^h + \mathbf{F}^{lb}$$



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

$\mathbf{F}^c$ Contact force

$\mathbf{F}^D$ DLVO force

$\mathbf{F}^{lb}$ Lubrication force

$\mathbf{T}^c$ Contact torque

$$\mathbf{F}^h = -\int \rho \mathbf{a} dr$$

$\mathbf{F}^h$ Hydrodynamic force

$$\mathbf{T}^h = -\int (\mathbf{r} \times \rho \mathbf{a}) dr$$

$\mathbf{T}^h$ Hydrodynamic torque

シミュレーション条件

計算対象

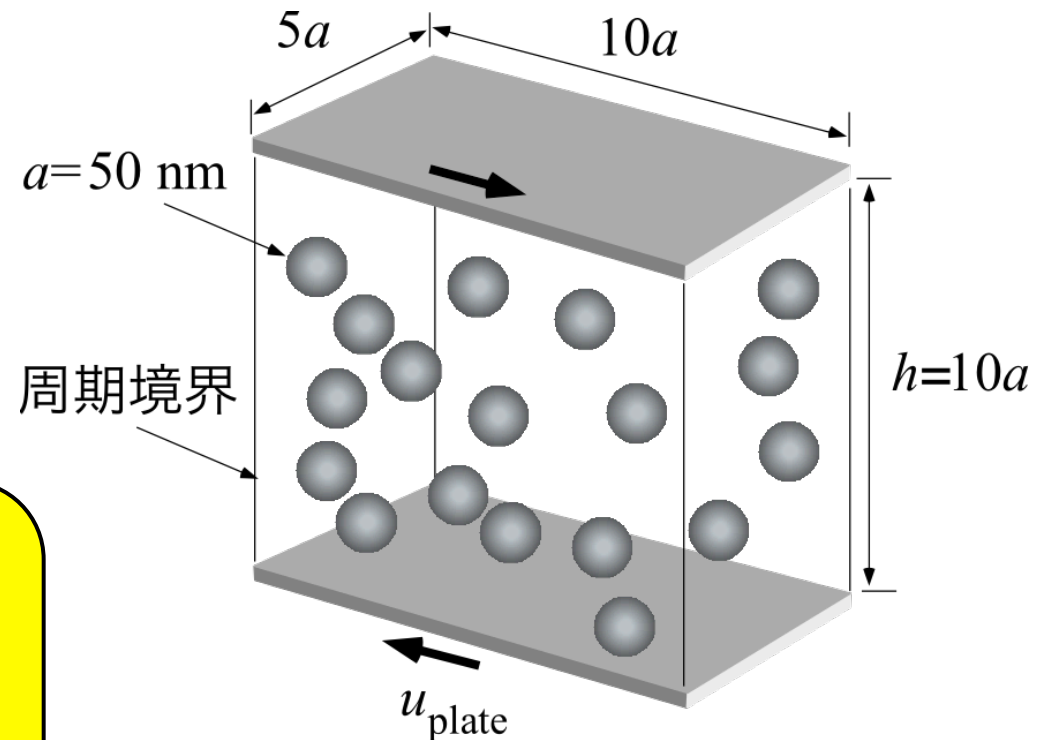
ポリスチレン球形粒子の水分散

- 粒径： $a=50$ nm,
粒子濃度： 20 vol%,
粒子と電位： -50 mV
- 上下移動壁と電位： 0 mV

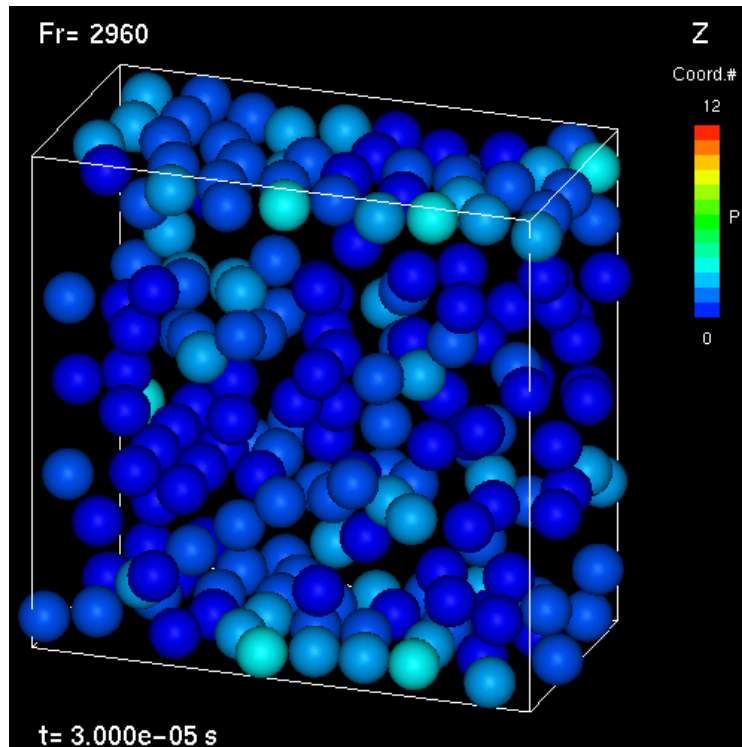
$$Pe = \frac{\dot{\gamma} a^2}{4D}$$

$$\dot{\gamma} = \frac{2|u_{\text{plate}}|}{h} \quad D = \frac{kT}{3\pi\eta a}$$

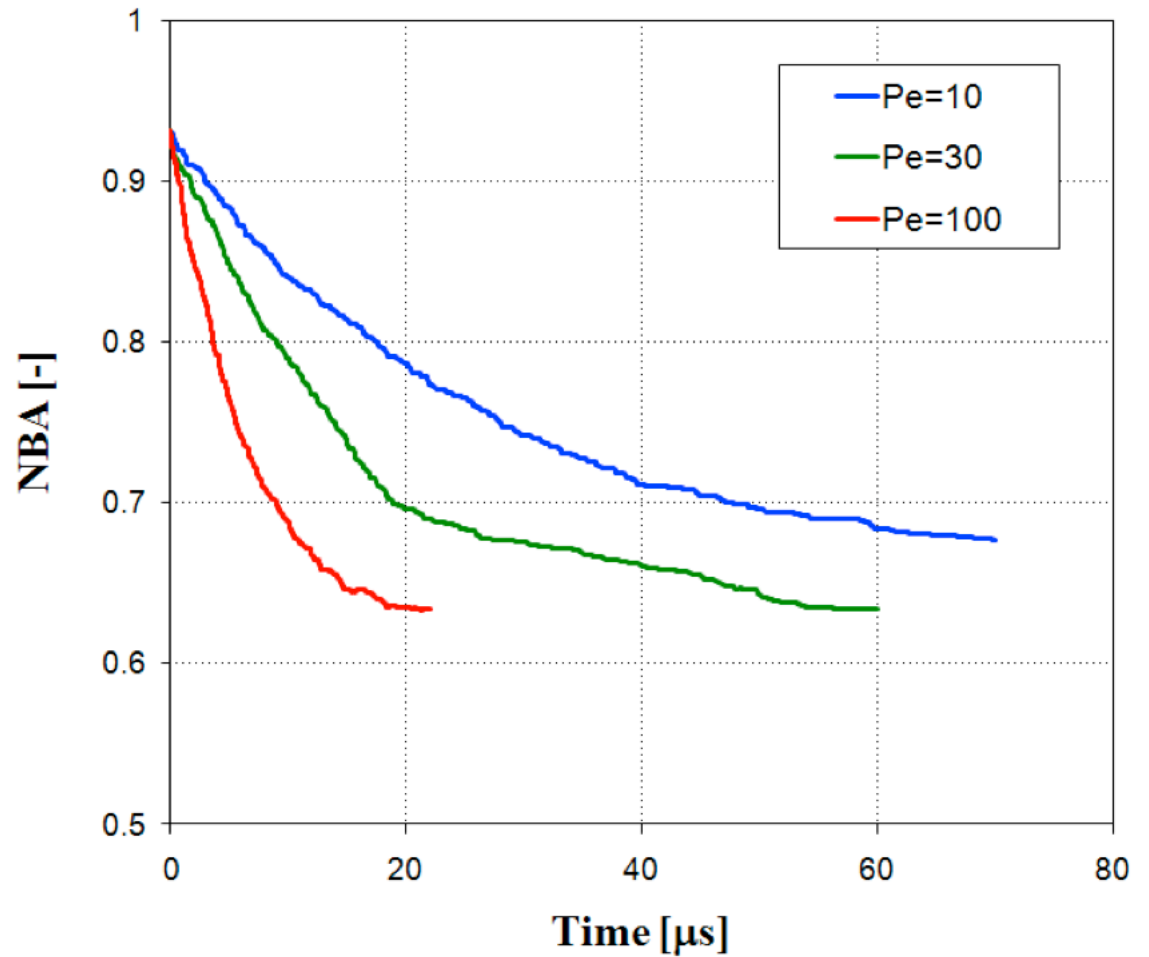
計算領域



初期状態と安定判定



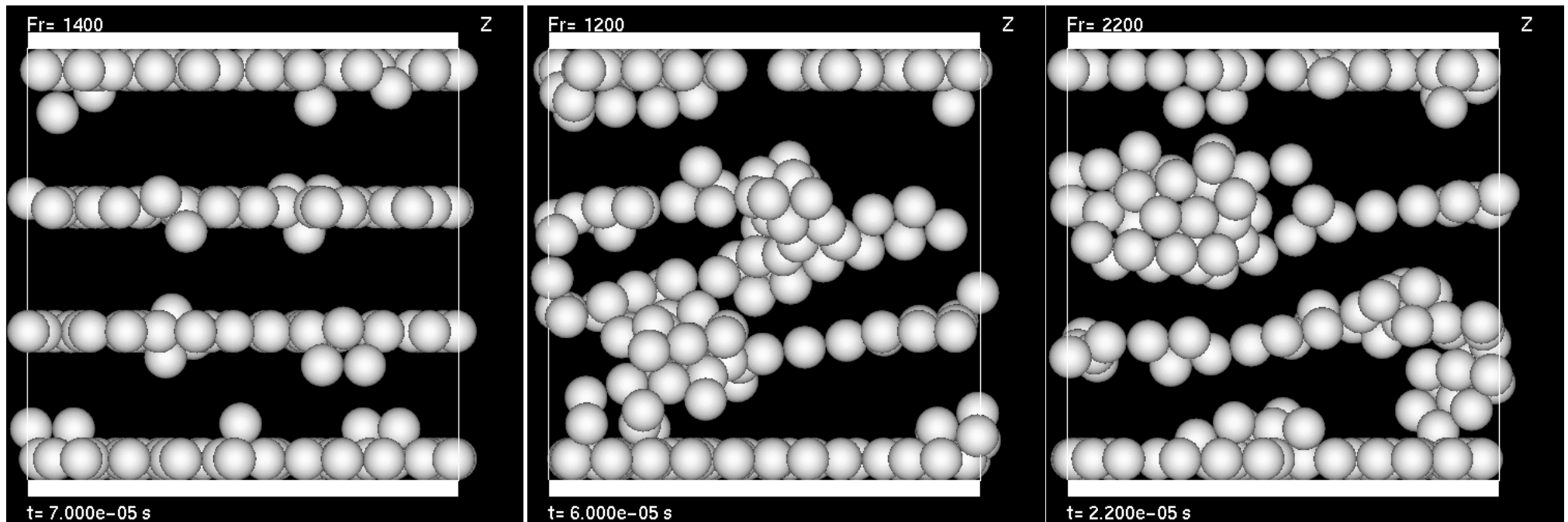
初期状態
(一定時間静置後)



NBAの時間推移

NBA: Nondimensional Boundary Area

シミュレーション結果（定常状態）

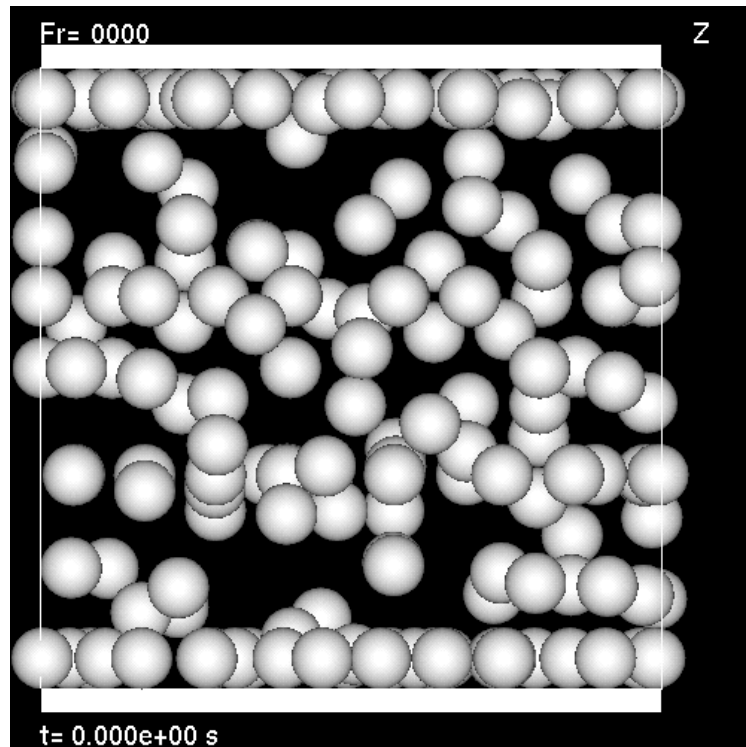


Pe=10

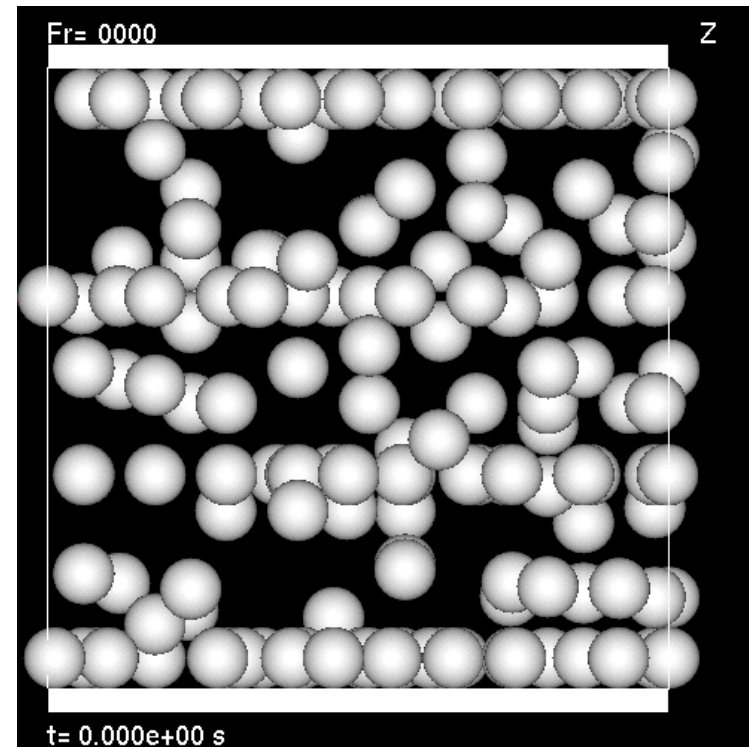
Pe=30

Pe=100

シミュレーション結果

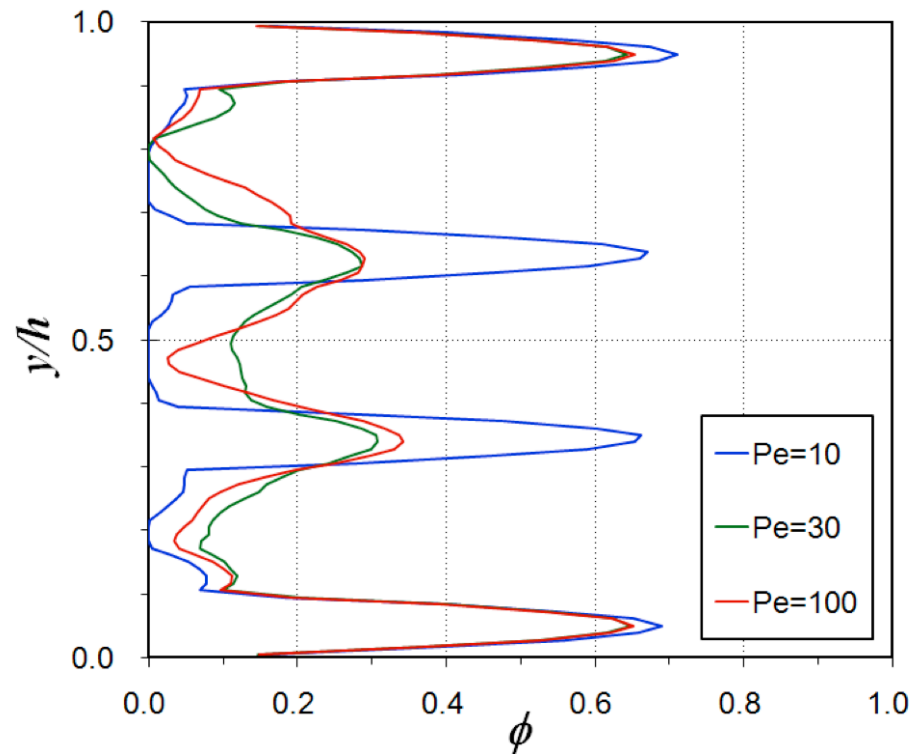


$Pe=10$

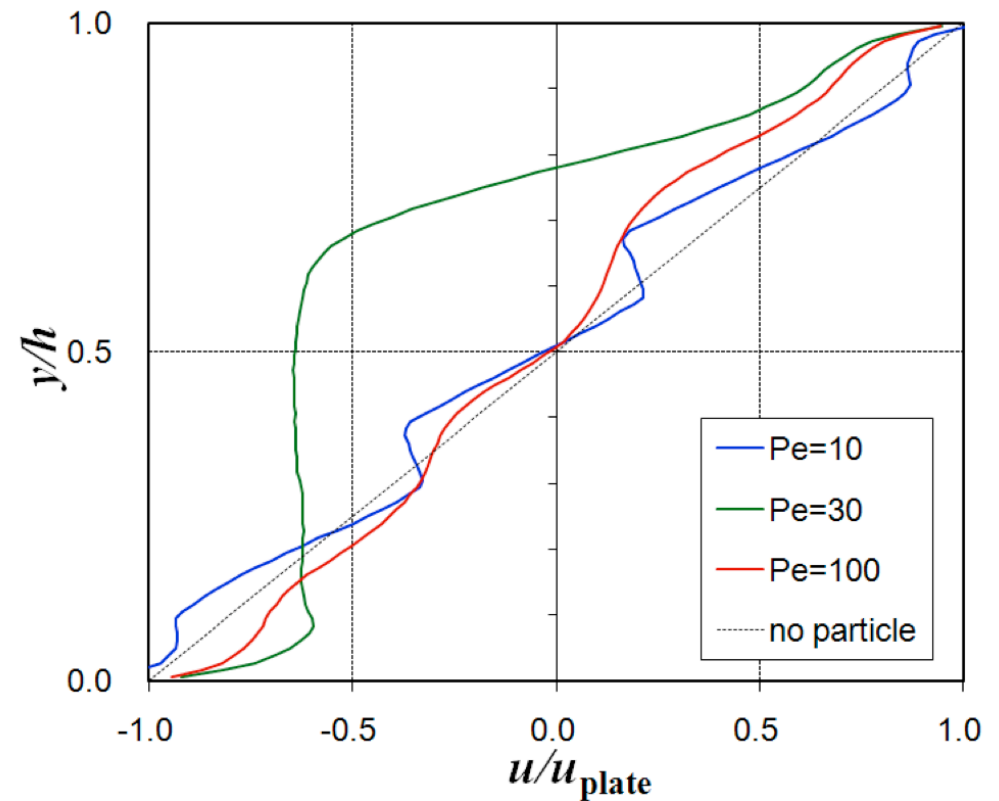


$Pe=100$

粒子構造と流体の速度分布

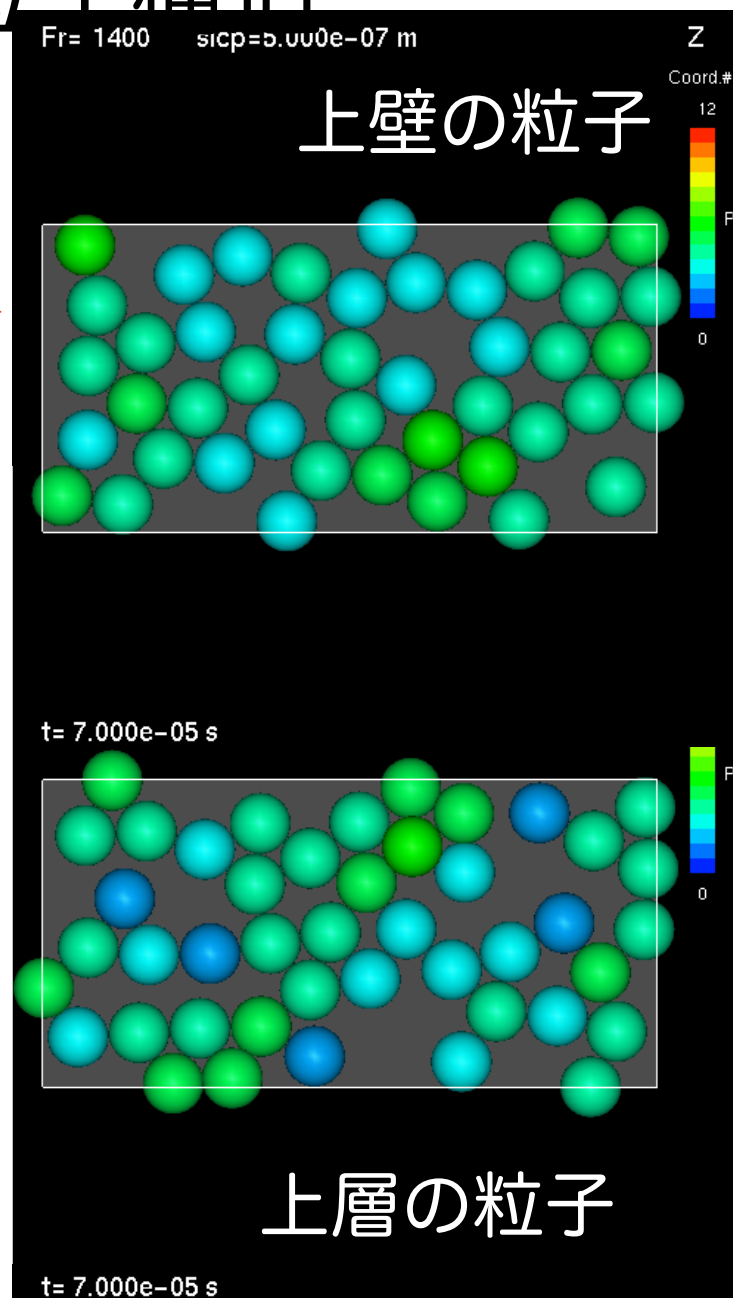
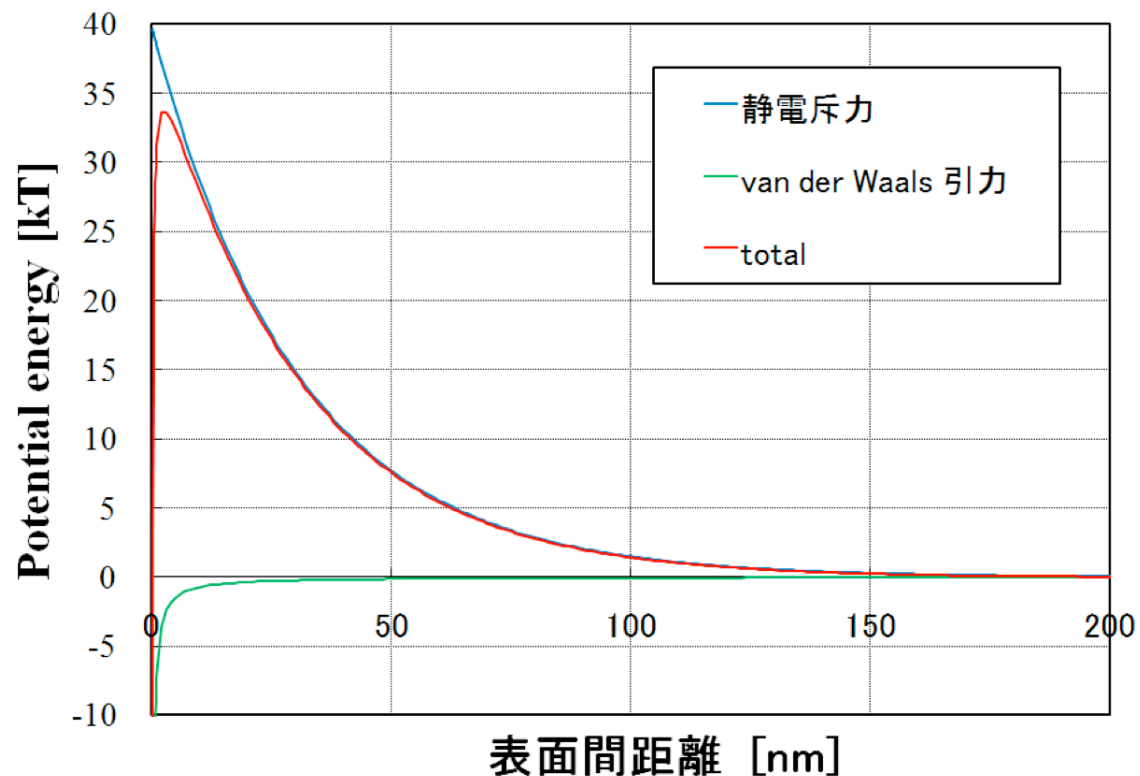
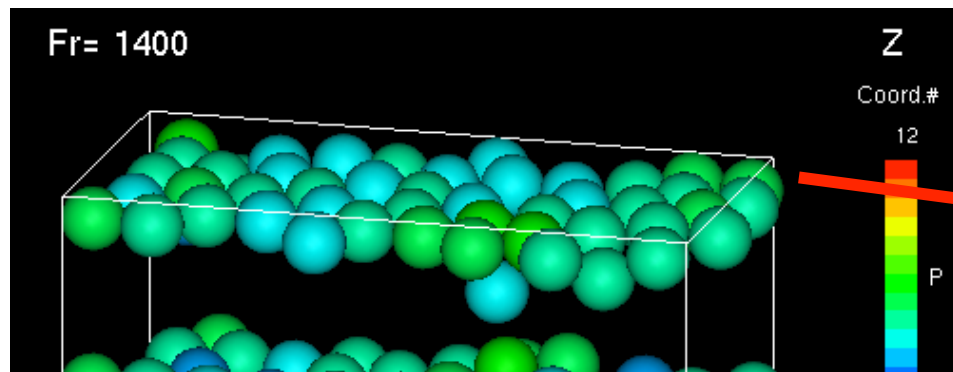


粒子の存在比率

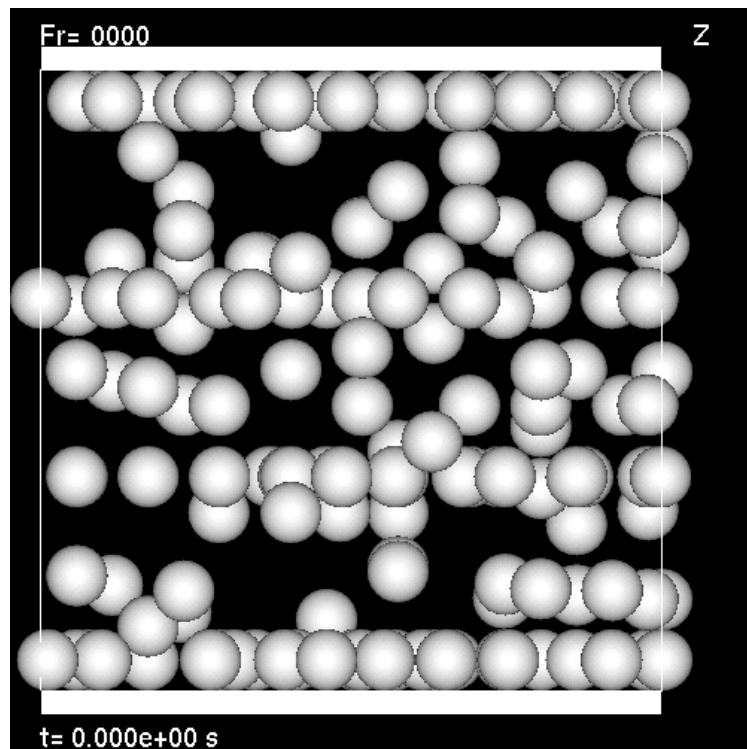


流体の速度分布

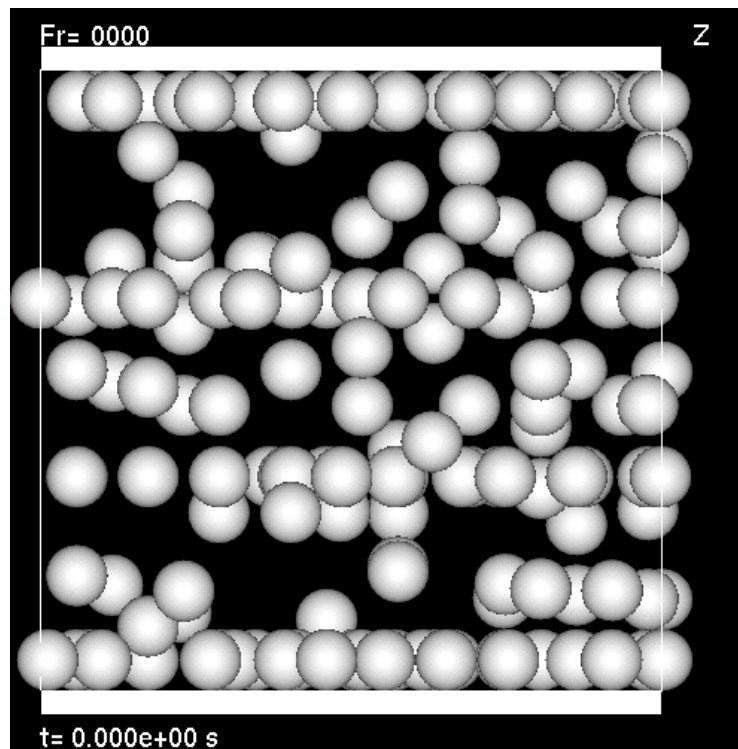
Pe=10における粒子構造



シミュレーション結果（高せん断場）

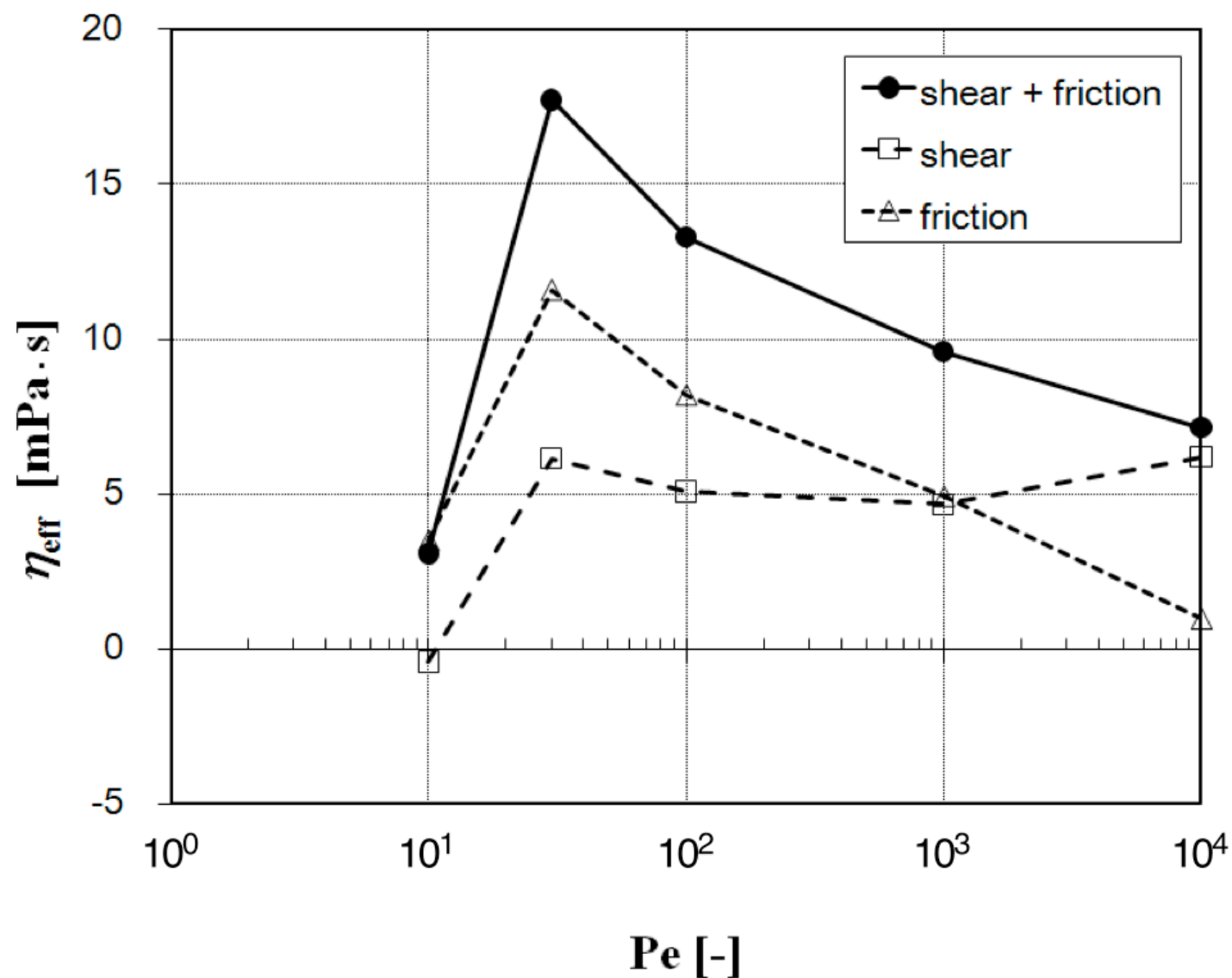


Pe=1000

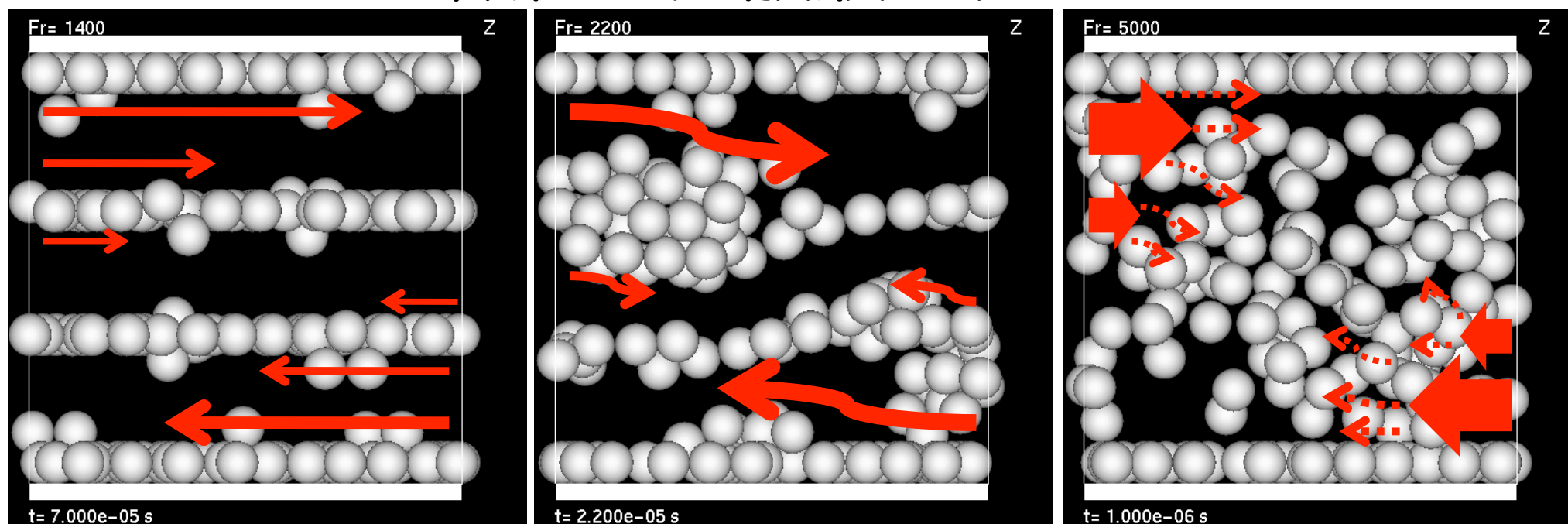


Pe=10000

せん断速度(Pe)とみかけ粘度の関係



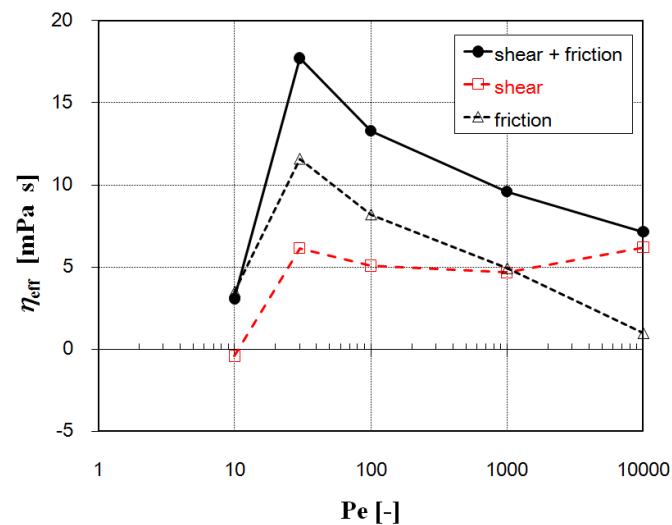
微粒子分散液の流れ



$Pe = 10$

$Pe = 30$

$Pe = 10000$



まとめ

- せん断場での非凝集系微粒子分散液のシミュレーションを行った。
 - 幅広いせん断速度を計算することで、みかけ粘度がせん断速度によって変化することを再確認した
 - 粘度の増減は粒子系構造とそれに伴う流体の流れに起因することを示唆した
- 壁面の物理条件の取り方によって得られる粒子構造が異なる。
 - ゼータ電位の有無
 - 接触（摩擦）の有無

