

微粒子分散液の 円管内非ニュートン流れの シミュレーション

小池修・藤田昌大・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

背景

山口研, 真野涼平, 2008年度修論

微粒子分散液＋流れ場

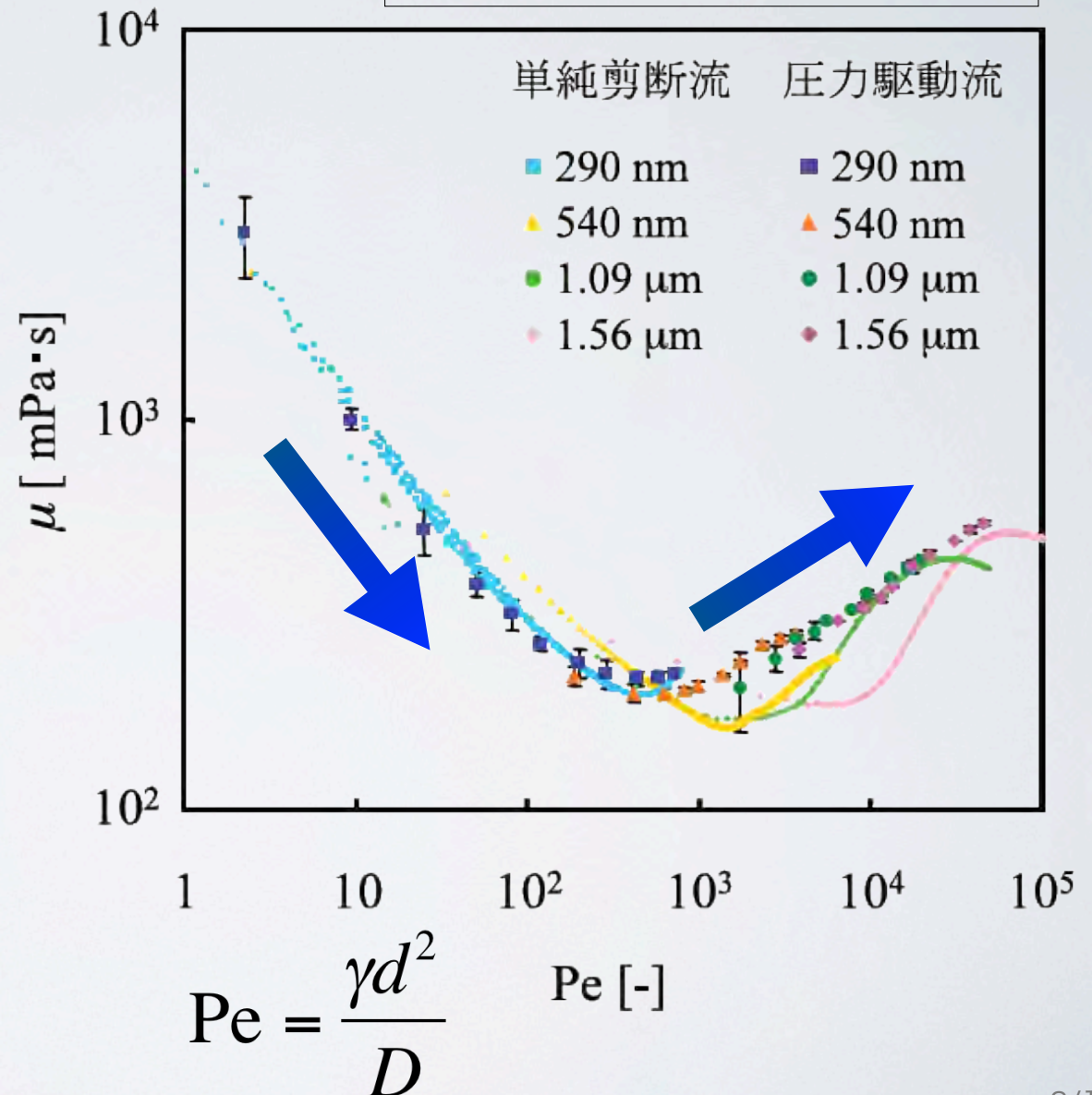
→非ニュートンの流れ

Shear-thinning

Shear-thickening

塗布/研磨/解砕の

効率や品質に影響



目的

- 流れ場における粒子系構造と粘度の相関を獲得する
- 粒子系構造の形成と粘度変化のメカニズムを解明する

手段と条件

- SNAP-Fでの 固液連成 直接数値シミュレーション
- 円管内の微粒子分散液に圧力を印加

計算条件

粒子

粒径 d : 100 nm

体積率 : 30 %

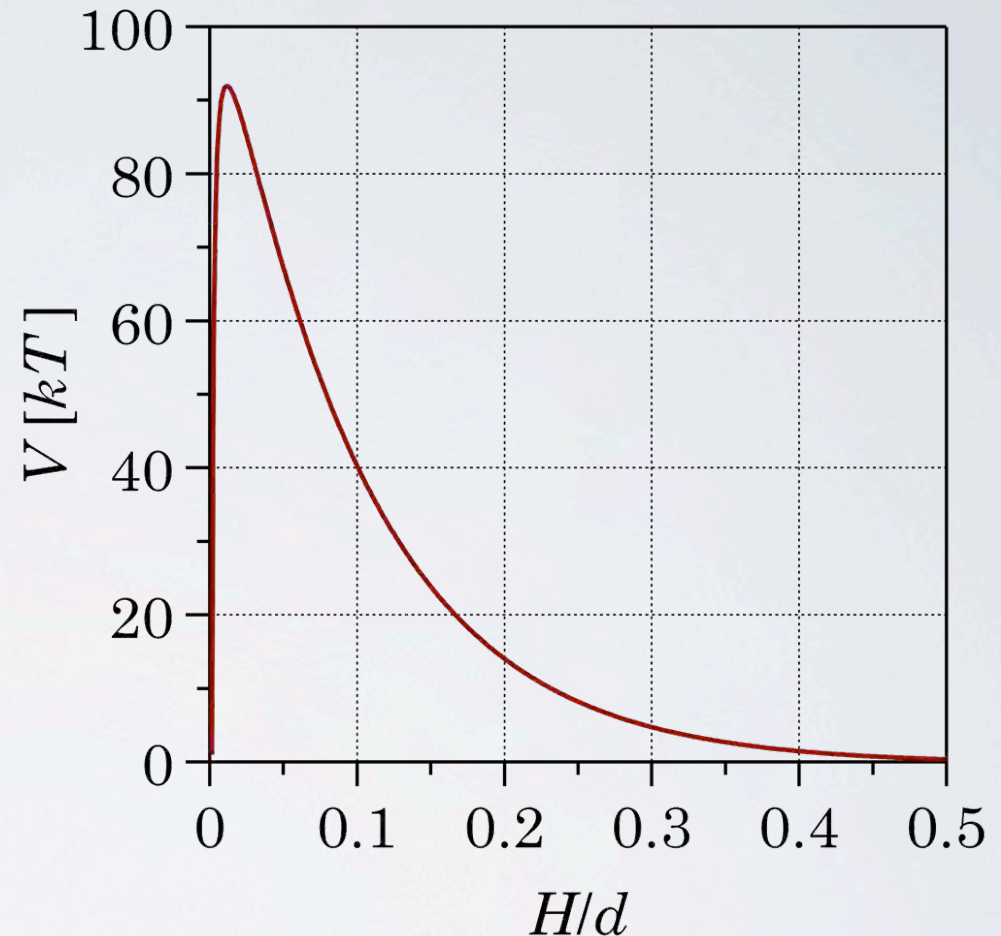
ζ 電位 : -50 mV

溶媒 (水)

温度 : 20 °C

電解質濃度 : 1 mM/l

DLVOポテンシャル



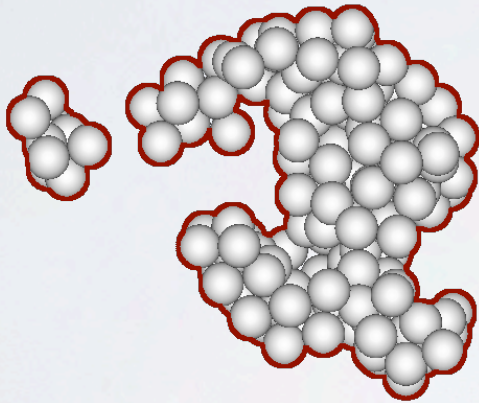
管径 : $10d$, 管長 : $20d$

Pe : $50 \sim 10^5$ (流れ方向周期境界)

構造評価指標 NBA

Nondimensional Boundary Area

NBAの幾何学的意味



$$\text{NBA} = \frac{\text{凝集体の表面積}}{\text{粒子の表面積の和}}$$

定義

$$\text{NBA} = \frac{1}{N} \left[\frac{1}{12} \sum_{c=0}^{12} (12 - c)n(c) \right]$$

$n(c)$: 配位数 c の粒子数

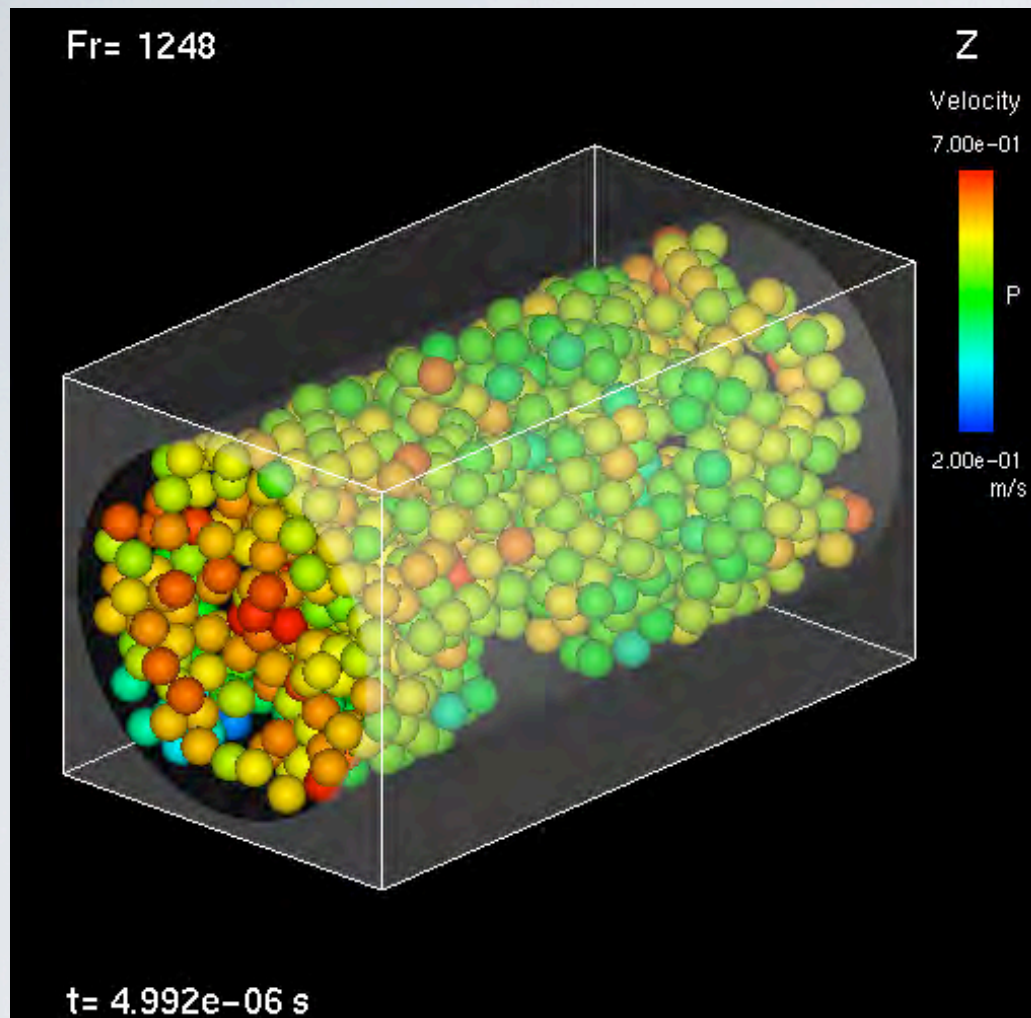
N : 全粒子数



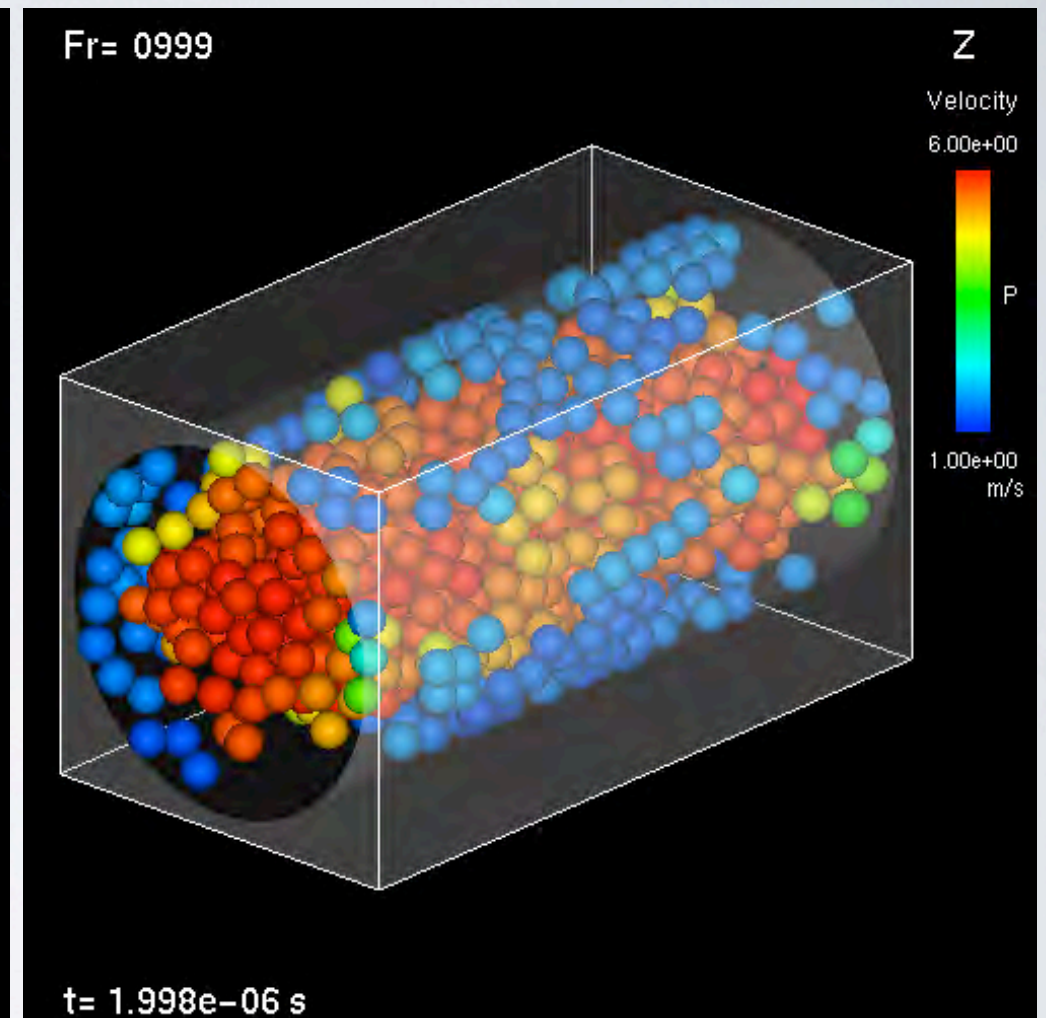
NBA = 1 : 完全分散

NBA = 0 : 最密充填

計算結果

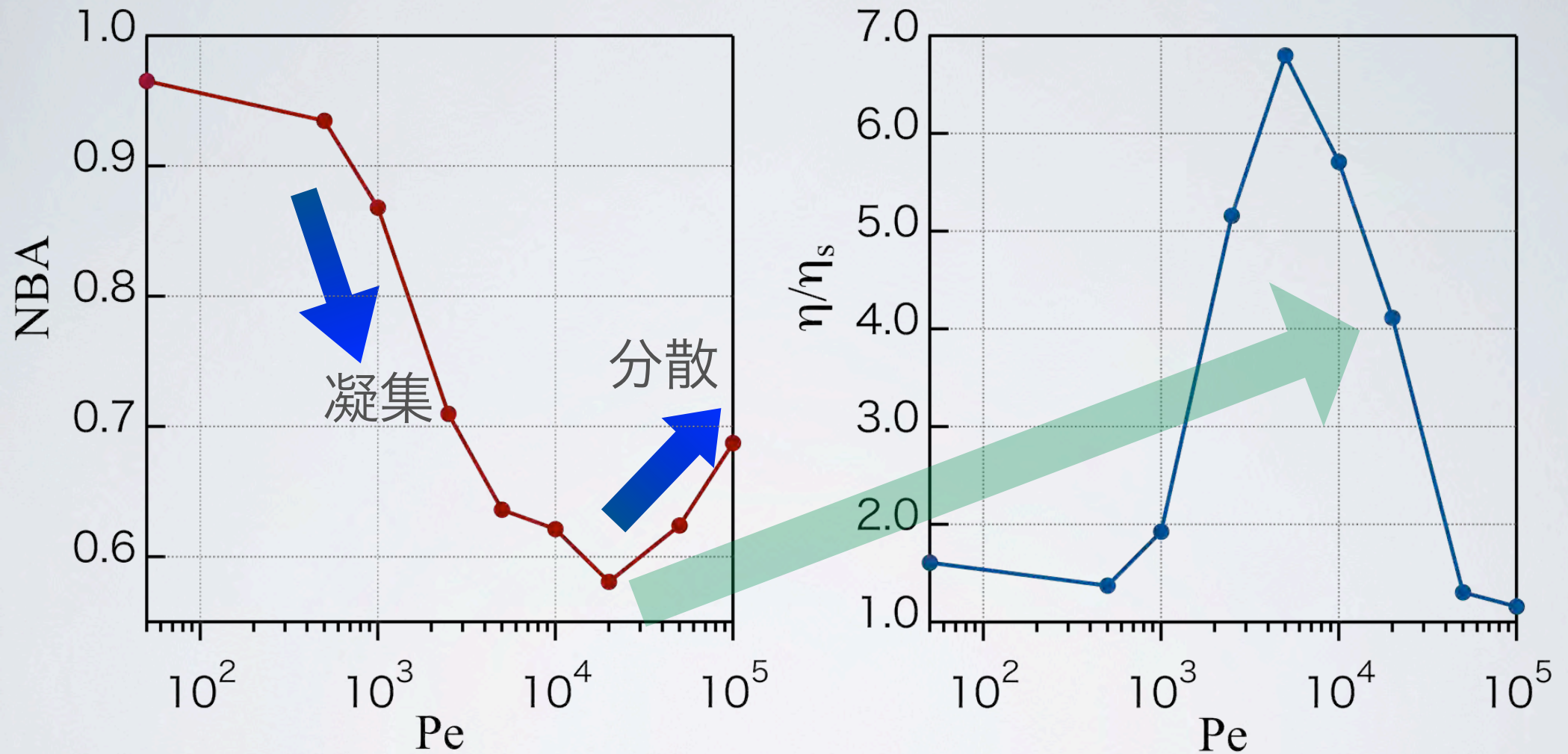


$$Pe = 2 \times 10^4$$



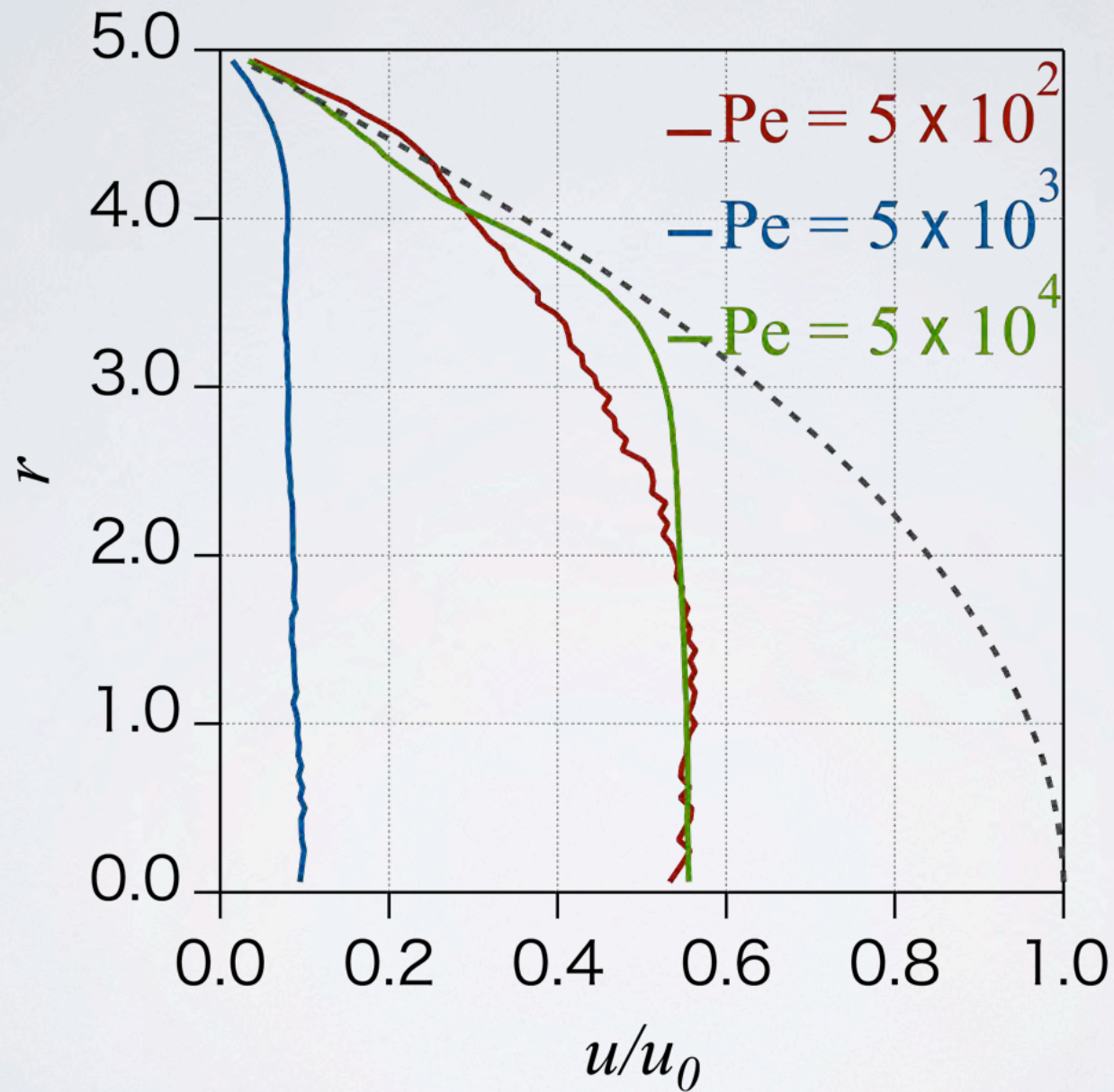
$$Pe = 5 \times 10^4$$

NBAとみかけ粘度



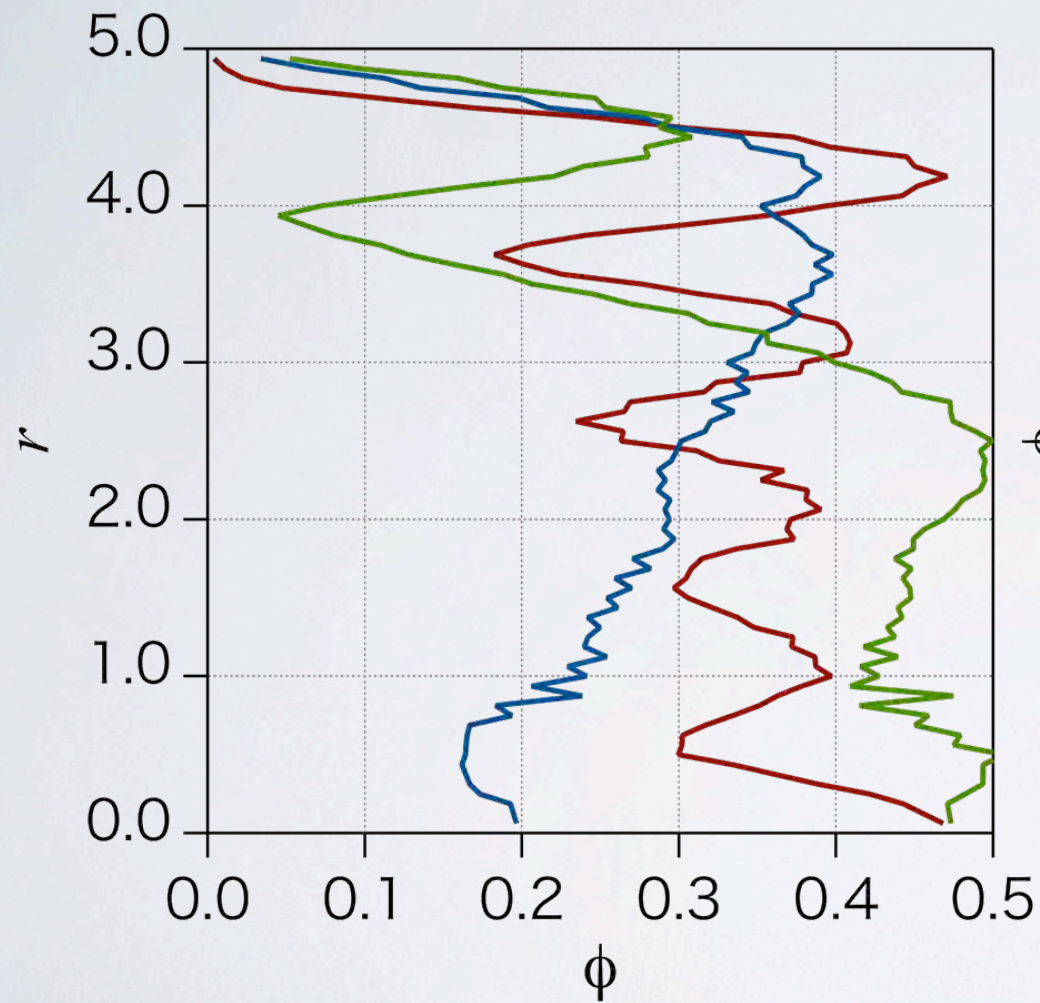
NBA最小時には粘度が下がっている

管径方向速度分布

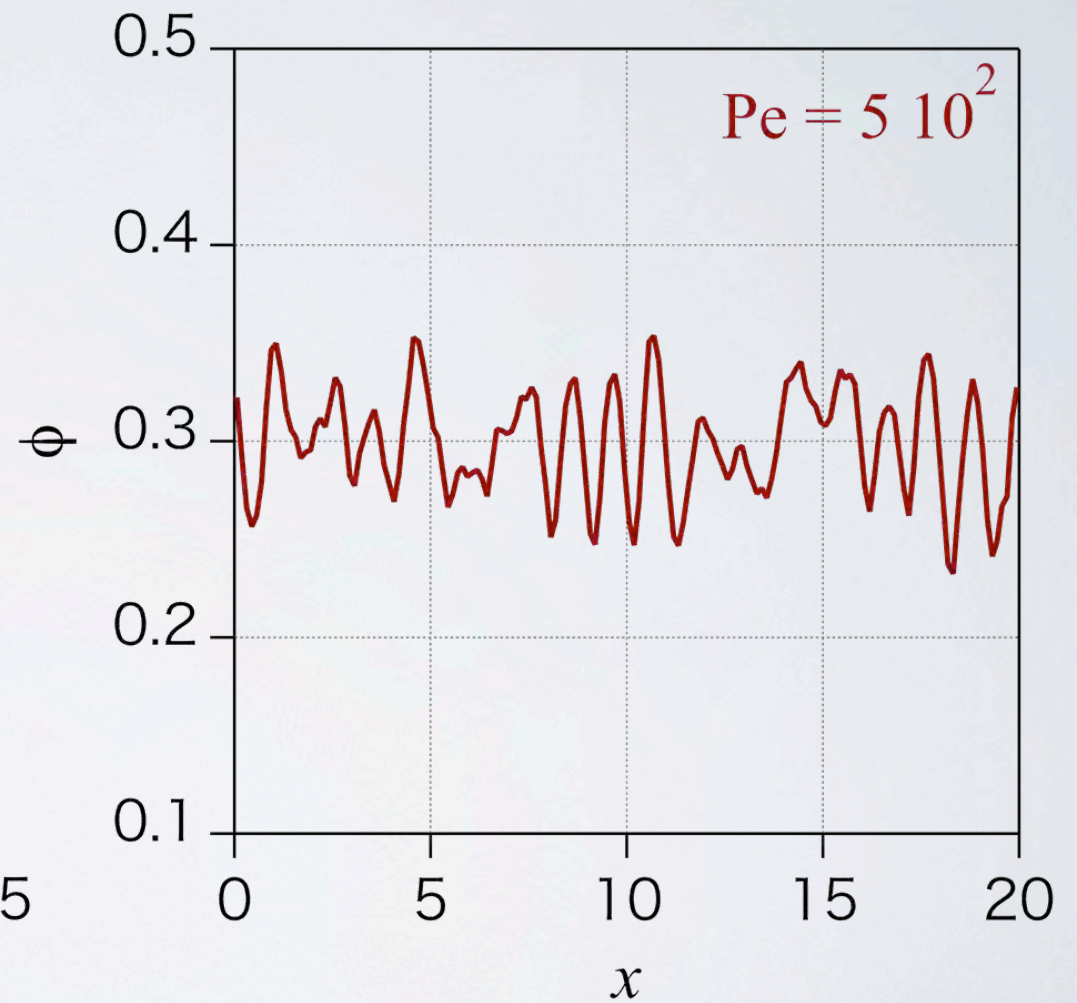


粒子体積率

管径方向

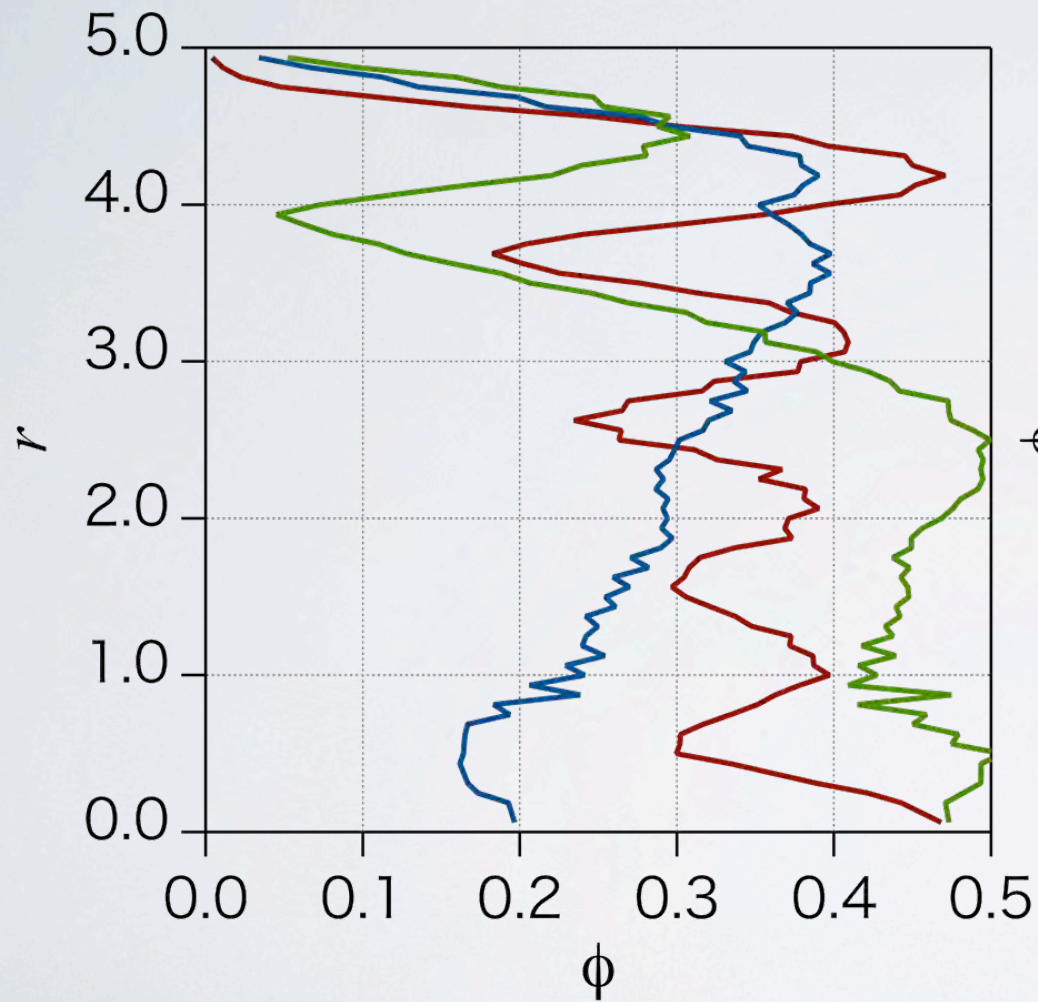


流れ方向

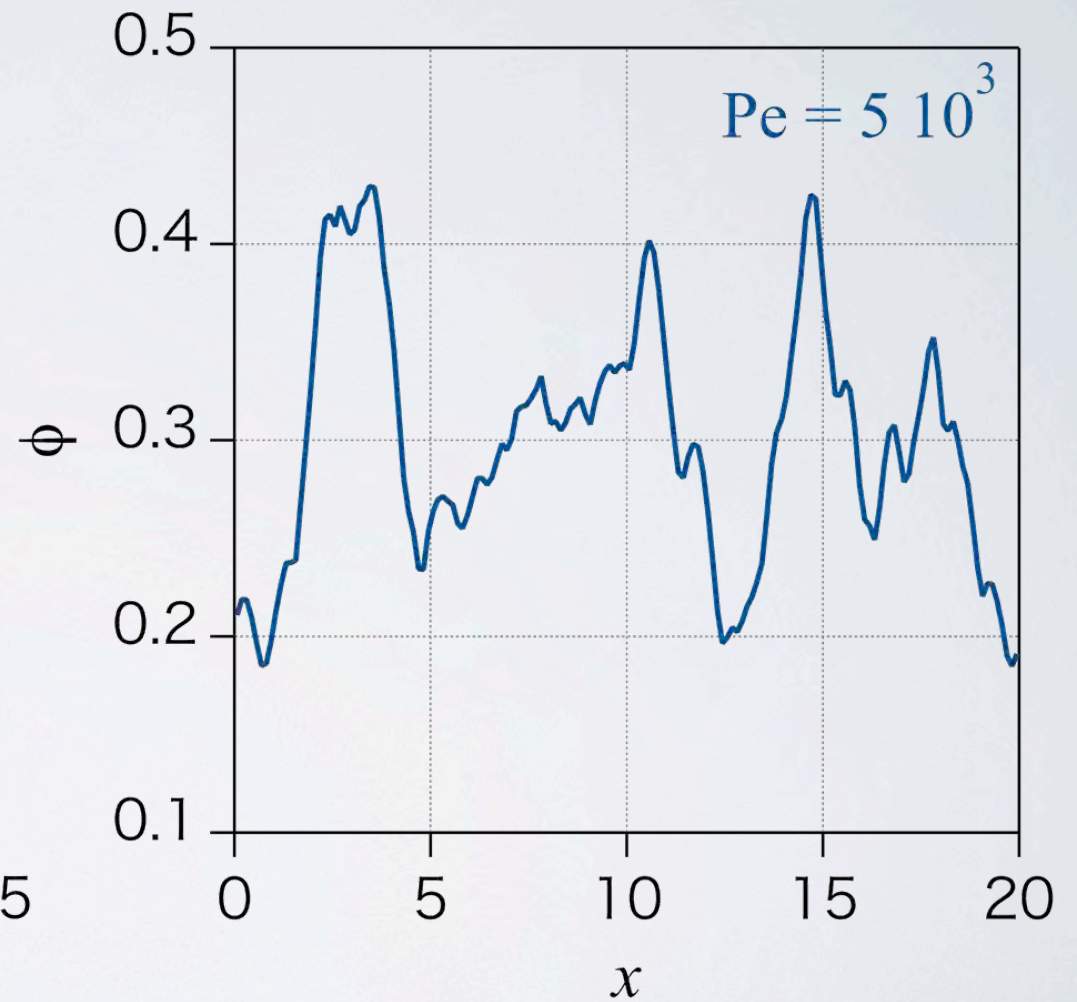


粒子体積率

管径方向

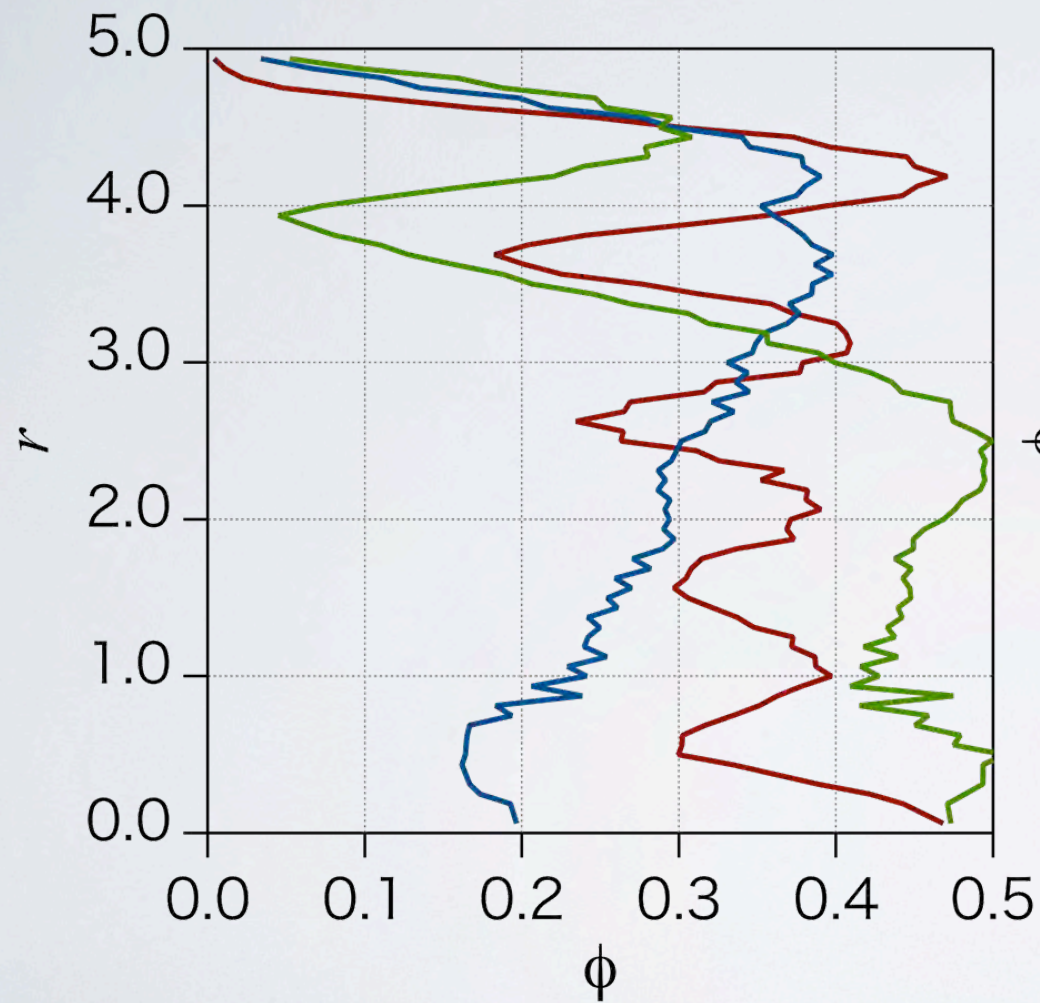


流れ方向

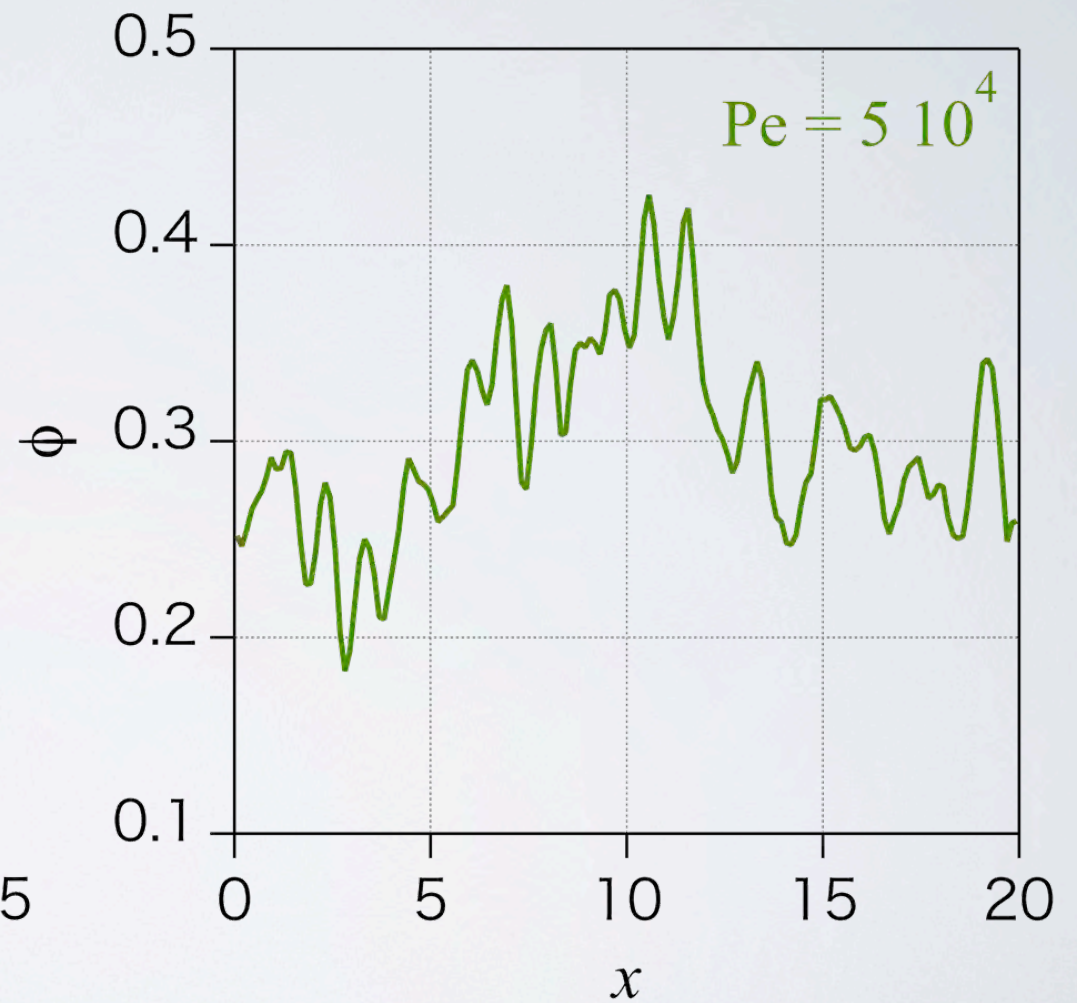


粒子体積率

管径方向



流れ方向



まとめ

- SNAP-Fで微粒子分散液の円管内流れのシミュレーションを行った
- 粒子系構造は流れ場の強さに応じて，流れ方向と管径方向に形成される
- 粘度最大時に，流れ方向に粗密が著しい粒子分布，管径方向に平坦な速度分布が発生する