

単純剪断場におけるナノ粒子凝集体の解砕シミュレーション

Numerical simulation of breakup of nanoparticle aggregates under simple shear flow

(東大) ○(学)八木 貴之・(正)小池 修・(正)辰巳 怜・(正)山口 由岐夫

背景・目的

様々な業界で微粒子分散液の利用が増加

- ・容易に凝集体を形成
 - ・凝集および解砕メカニズム不明
- 運転条件を経験的なものに頼っている

直接シミュレーションによってナノ凝集体の解砕機構を検討する。特に摩擦力とDLVO力の影響に着目する。

手法

SNAP-F 計算モデル

粒子運動

$$m \frac{d\mathbf{V}_i}{dt} = \mathbf{F}_i^c + \mathbf{F}_i^v + \mathbf{F}_i^e + \mathbf{F}_i^h$$

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

m : 粒子質量
 \mathbf{V}_i : 粒子速度
 \mathbf{F}_i^c : 粘弾性接触力
 \mathbf{F}_i^v : Van der Waals力
 \mathbf{F}_i^e : 静電気力
 \mathbf{F}_i^h : 流体力

I : 粒子慣性モーメント
 $\boldsymbol{\omega}_i$: 粒子角速度
 \mathbf{T}_i^c : 粘弾性接触力トルク
 \mathbf{T}_i^h : 流体力トルク

流体運動

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

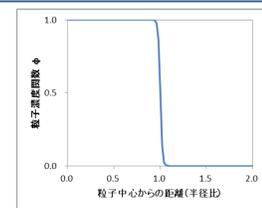
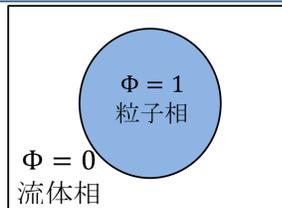
$$\frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = -\frac{1}{\rho_f} \nabla p + \nu \nabla^2 \mathbf{u} + \frac{1}{\rho_f} \nabla \cdot \mathbf{S} + \Phi \boldsymbol{\alpha}$$

$$\boldsymbol{\alpha} = \frac{\mathbf{u}_p - \mathbf{u}}{\Delta t} + \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} + \frac{1}{\rho_f} \nabla p - \nu \nabla^2 \mathbf{u} - \frac{1}{\rho_f} \nabla \cdot \mathbf{S}$$

\mathbf{u} : 流体速度
 ρ_f : 流体密度
 p : 圧力
 ν : 動粘度
 \mathbf{S} : 揺動ストレス
 Φ : 粒子濃度関数
 $\boldsymbol{\alpha}$: 粒子加速度
 \mathbf{u}_p : 粒子速度

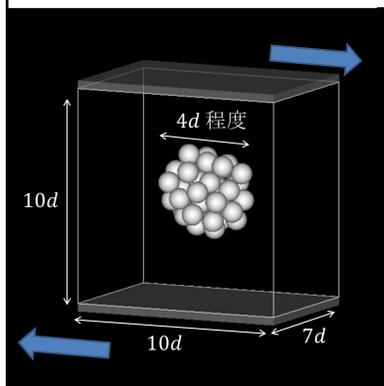
粒子・流体運動の連成

体積力型埋め込み境界法を採用



シミュレーション方法

- ① 液滴乾燥による初期凝集体の形成 (SNAP-L)
- ② 剪断印加による凝集体の解砕 (SNAP-F)



粒子 : シリカ ($d = 50 \text{ nm}$)
 溶媒 : 水
 電解質濃度 : 0.01 mol/L
 摩擦係数 : $\mu = 0.0 \sim 1.0$
 ゼータ電位 : $\varphi = 0.0, -50 \text{ mV}$
 水平方向 : 周期境界条件
 壁 : 滑りなし条件

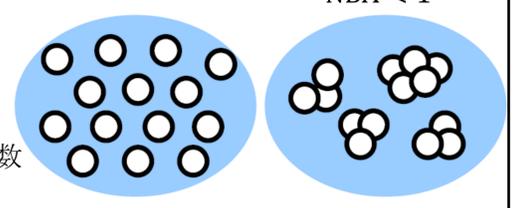
評価指標

無次元化境界面積 (NBA)
 → 粒子の凝集状態を表す指標

$$NBA \equiv \frac{1}{12N} \sum_{k=0}^{12} (12-k)N(k) \quad k: \text{接触数}$$

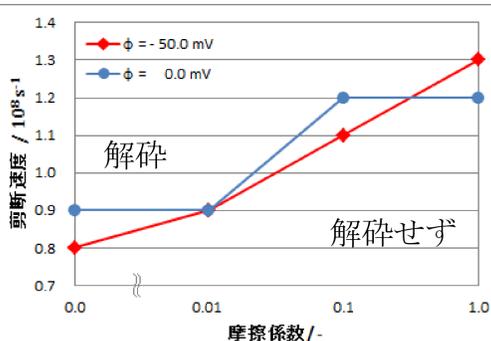
NBA = 1

NBA < 1

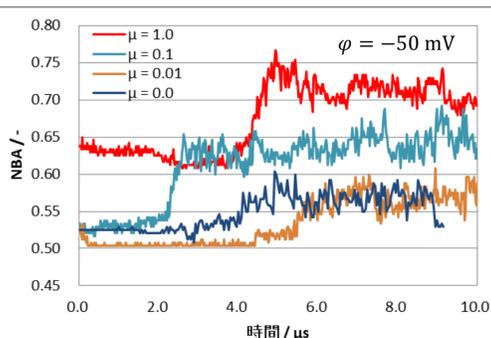


結果・考察

臨界剪断速度 $\dot{\gamma}_c$ の変化

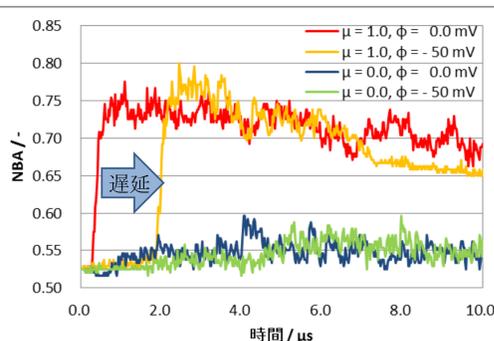


摩擦の増大に伴い増大
 静電気力では有意な差はなし



摩擦の増大に伴い
 解砕時の挙動も変化

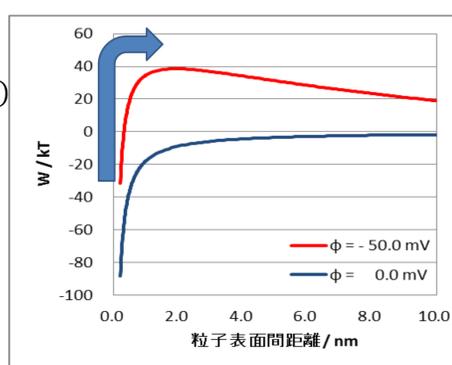
解砕時の挙動の違い



$(\mu, \dot{\gamma}) = (0.0, 0.8 \times 10^8 \text{ s}^{-1}), (1.0, 1.6 \times 10^8 \text{ s}^{-1})$

摩擦の存在により
 NBAが急激に変化

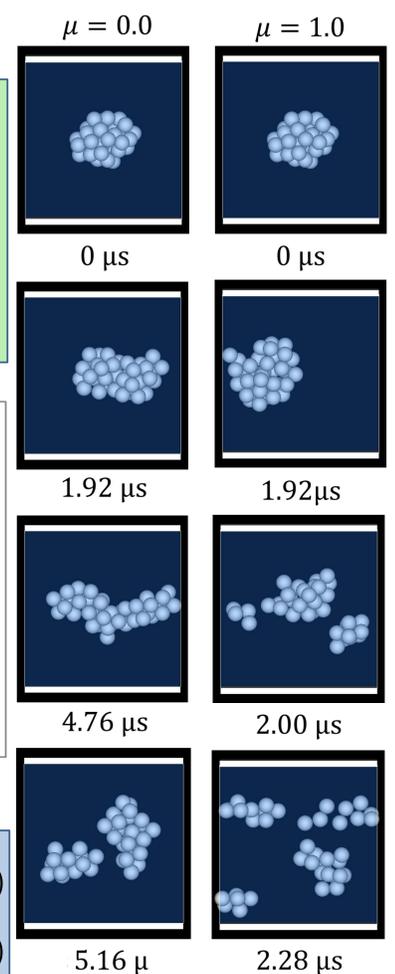
大きな摩擦の存在下では
 静電気力により解砕が遅延
 ↓
 ポテンシャル障壁を
 超える必要があるため



解砕モード

摩擦小... 伸長変形を伴いゆっくり解砕 (連続体様式)
 摩擦大... 唐突に割れるように解砕 (脆性材料様式)

摩擦が伸長変形を阻害し、剝離を誘起



解砕の様子
 $\varphi = -50 \text{ mV}$

結論

摩擦力は臨界剪断速度・解砕モードに強い影響を与えることがわかった。
 静電気力には解砕を遅延させる効果があることが示唆された。