

分散・インク講座 (第7講)

J. Jpn. Soc. Colour Mater., 92 [11], 324-328 (2019)

統計型微粒子分散モデル

鈴木 洋*†

*神戸大学大学院工学研究科応用化学専攻 兵庫県神戸市灘区六甲台町1-1 (〒657-8501)

† Corresponding Author, E-mail: hero@kobe-u.ac.jp

(2019年8月30日受付, 2019年10月17日受理)

要 旨

微粒子分散系の制御を行うために、凝集体を形成する一次粒子の予測法について解説する。微粒子凝集速度と凝集体破壊速度のポピュレーションバランスをとり、計算負荷の小さな計算法で、凝集体の大きさを予測する。これを用いてサスペンション粘度を予測する方法を紹介する。さらに流動中の凝集体の分布を予測するモデルを開発し、微粒子分散系の流動全般に拡張する方法を述べる。これらを用いることで、適切な攪拌混合条件を設定することが可能となると考えられる。

キーワード：統計型モデル、微粒子分散系、ポピュレーションバランス、粘度、凝集体

1. はじめに

微粒子が分散媒に懸濁された状態をサスペンションと呼ぶ。塗料や食品、ポリマーコンポジット作製、近年は電池素材などでサスペンションの微粒子分散状態は重要であり、分散状態の高度制御が求められている。そのために分散剤の開発が盛んに行われているが、微粒子および分散媒に最適な分散剤を探索するのは試行錯誤的であり、分散状態の予測は困難を極める。とくに比表面積が大きい、微細な粒子が分散される場合、凝集体と呼ばれる、いわば粒子の塊が生じ、そのため粘度が非常に大きくなる。したがって凝集体の形成はサスペンションの流動性に大きく影響を与える。加えて最終製品に大きな影響を与えるので、凝集体の大きさ、分布等を正確に把握する必要がある。

近年では微粒子の分散状態、サスペンションの流動特性を把握するために、離散要素法 (Distinct Element Method: DEM) などの微粒子の挙動を直接計算する数値解析が行われることが多いが、微視的な数値解析では、マクロなサスペンションの特性を把握するには明らかに限界があり、今後次世代京コンピュータが開発されても、極少量の情報しか得られないのは自明である。

ここでは平均的な凝集体の大きさを予測する統計型分散モデルを紹介する。粒子一つ一つを計算するのではなく、この統計型分散モデルでは、凝集体の大きさの変化をポピュレーション

バランスをとることによって平均的に把握する。そのため計算負荷が非常に小さく、サスペンションの制御方法を検討するのに非常に有用であると考えられる。

2. 統計型分散モデル

ここで紹介する分散モデルは、微細な時間・空間における平均的凝集体がいくつの微粒子 (一次粒子) で形成されているかを、微粒子凝集速度と、凝集体破壊速度のバランスで求めるものである。前述のように逐次微粒子の運動を計算したのでは、計算負荷が非常に大きく、実用上ほとんど役に立たない。素材の分散状態を制御するのにそこまでの微細な情報が必要となるケースはほとんどなく、どの程度の回転数で攪拌混合すれば、実用上十分な性能が得られるかの情報があればよいのである。本モデルでは粒子個々の運動ではなく、ブラウン運動やせん断による凝集を統計的に扱うので、計算負荷が非常に小さい。

微粒子の凝集に関しては、ブラウン運動によって微粒子が接触する遅い凝集 (ブラウン凝集) とせん断流動によって微粒子が凝集する速い凝集 (せん断凝集) の二種類がそれぞれ Swift-Friedlander¹⁾ および Higashitani-Matsuno²⁾ によって整理されている。薄井³⁾ は、せん断によって凝集体を破壊するせん断破壊を加えて、微粒子の凝集体内の個数の経時変化を与えるポピュレーションバランスモデルを構築した (Usui Model: 図-1)。以下がそのモデル式である。

$$\frac{dk}{dt} = \frac{4\alpha_b k_b T N_0}{3\eta_0} + \frac{4\alpha_s \phi k \dot{\gamma}}{\pi} - \frac{3\pi d_0^3 k}{4F_0 N_b} \left(\frac{k}{1-\varepsilon} - 1 \right) \eta \dot{\gamma}^2 \dots \dots (1)$$

ここで k [-] はそれぞれ凝集体を形成する一次粒子の個数であり、 t [s], k_b [$\text{J}\cdot\text{K}^{-1}$], T [K], N_0 [-], η_0 [$\text{Pa}\cdot\text{s}$], ϕ [-] および $\dot{\gamma}$ [s^{-1}] はそれぞれ時間、ボルツマン定数 ($= 1.38 \times 10^{-23} \text{ J}\cdot\text{K}^{-1}$), 絶対温度, 微粒子総数, 分散媒粘度, 固体体積分率およびせん断速度であり, d_0 [m], ε [-] および η [$\text{Pa}\cdot\text{s}$] はそれぞれ一次粒子径, ボイド率およびサスペンション粘度である。また α_b [-] および α_s [-] はそれぞれブラウン凝集項およびせん断凝集項



〔氏名〕 すずき ひろし
〔現職〕 神戸大学大学院工学研究科応用化学専攻教授
〔趣味〕 音楽
〔経歴〕 1988年京都大学工学部機械系学科 助手。1991年広島大学工学部機械工学科 助教授。1998年神戸大学自然科学研究科 助教授。2007年神戸大学大学院工学研究科 准教授。2010年同 教授。2017-2018年化学工学会粒子流体プロセス部会 部会長。2008年日本レオロジー学会論文賞。2010年化学工学会研究賞。

【図表について】電子ジャーナルサイト「J-STAGE」ではカラーでご覧いただけます。https://www.jstage.jst.go.jp/browse/shikizai-char/ja/