

G115

基板上微粒子分散液の流動-乾燥連成シミュレーション

(東大院工) ○ (正) 小池修*・(正) 藤田昌大・(正) 山口由岐夫

背景と目的

微粒子系薄膜などの機能性材料を作成する効率的な手段として、微粒子分散液の基板の塗布・乾燥が挙げられる (Fig.1)。微粒子系の構造形成過程の解明には、乾燥に伴う溶液の流動場の詳細な情報が不可欠である。

一方、当研究室では、微粒子系構造形成シミュレータ: SNAP-L^[1], SNAP-F^[2] の開発が進行中である。前者は、乾燥に伴う任意形状粒子の分散・凝集を模擬でき、溶媒中棒状粒子の配向過程の議論に適用されている^[3]。後者は、粒径より高い流体解像度によって、濃厚粒子系の流動場を高精度に模擬できる。適用例として、せん断場における微粒子分散液のレオロジー特性の報告がある^[4]。

今回の対象は、微粒子分散液の流動・乾燥過程であり、それを原理的な方程式から数値計算する研究事例は少ないと考えられる。本研究では、SNAP-LとSNAP-Fを融合させ、微粒子分散液の流動と乾燥を同時シミュレーションする三次元モデルを開発した。そして、このモデルを用いて微粒子分散液における、粒子運動と流動場を追跡することを目的とする。

シミュレーション・モデル

運動方程式として、粒子に対しては回転も考慮したNewtonの運動方程式、流体に対しては、流体熱揺動を取り込んだfluctuating Navier-Stokes方程式を採用する。粒子に働く相互作用として接触力、DLVO力、毛管力、流体力、及び重力をモデル化する。また、粒子運動をoff-latticeで、流れ場をon-latticeで扱うハイブリッド法の下、粒子濃度関数と流体力を通じて粒子運動と流れ場を連動させる^[2]。

乾燥に伴う自由表面の運動に関して、溶媒の乾燥率を考慮した、VOF (Volume of Fluid) に対する移流方程式を構築する。また、表面張力を体積力で表現するCSF (Continuum Surface Force) モデルを採用し、VOFの空間分布から表面張力を計算する。

シミュレーション結果

シミュレーション対象としてFig1.(a)を模擬し、ポリスチレン粒子水分散液に対する、自由表面せん断流れのシミュレーションを行う。尚、計算条件は次

のように設定する。粒径 $a = 100$ nm, 粒子体積率 25 %; 計算領域を $6a \times 6a \times 6a$ とし、基板からの界面高さ $4.2a$ とする。基板は 1.0 m/s の速度で移動させる。Fig.2に示すように、基板の移動により流れが形成されるにつれて、粒子同士が接触している。尚、粒子の色は配位数を示し、青から緑にかけて多い。また、粒子が毛管力で界面に引き上げられていることも分かる (Fig.2b)。本講演では、蒸発の効果を含めた計算結果も議論する。

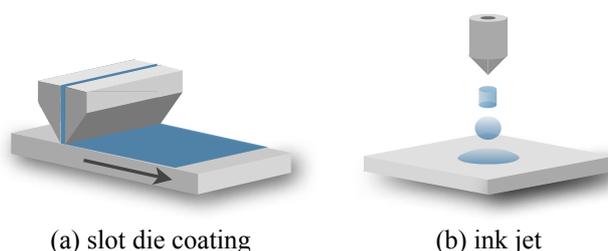


Fig.1 Schematic illustrations of coating-drying process

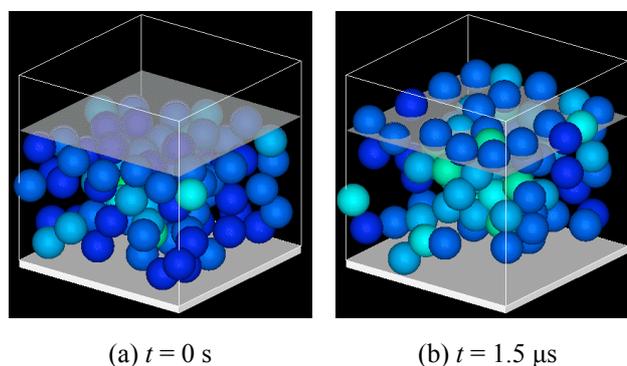


Fig.2 Snapshot of shear flow of fine particle suspension with free surface

参考文献

- [1] O. Koike et al., Jpn. J. Appl. Phys. **47**, 8124, (2008).
- [2] M. Fujita, and Y. Yamaguchi, Phys. Rev. E **77**, 026706 (2008).
- [3] 太田誠一, 小池修, 稲澤晋, 藤田昌大, 山口由岐夫, 化学工学会第40回秋季会講演要旨 (2008).
- [4] 安藤努, 小池修, 藤田昌大, 山口由岐夫, 化学工学会第41回秋季会講演要旨 (2009).

*E-mail osamu_koike@sogo.t.u-tokyo.ac.jp