

目次

序章 分散・凝集理論の系譜

- 0.1 分散・凝集の過程と状態
- 0.2 分散・凝集の理論発展の系譜

第1章 分散・凝集状態を支配する粒子・溶液界面構造と特性

- 1.1 界面エネルギーと濡れ
- 1.2 吸着と吸着層の構造
- 1.3 帯電機構
- 1.4 電気二重層
- 1.5 水系の界面動電現象
- 1.6 非水系の界面電気現象

第2章 分散・凝集状態を支配する粒子間相互作用

- 2.1 表面間力と粒子間相互作用
- 2.2 van der Waals 力 (凝集促進因子)
- 2.3 電気二重層相互作用
- 2.4 DLVO 理論
- 2.5 ヘテロ凝集
- 2.6 非 DLVO 力

第3章 分散凝集のダイナミクス

- 3.1 はじめに
- 3.2 ポピュレーションバランス方程式
- 3.3 Brown 運動による凝集
- 3.4 流れ場における凝集
- 3.5 乱流凝集の後期過程を考慮したモデル

第4章 数値シミュレーション

- 4.1 離散要素法
- 4.2 Langevin 動力学
- 4.3 直接数値シミュレーション

第5章 演習問題

- 5.1 第1章
- 5.2 第2章
- 5.3 演習問題解答

1.3 帯電機構

図 1.12 Stern の電気二重層モデルの概念図

位は指数関数的に減衰する。Stern 層でのイオンの吸着を考慮しない場合、KCl や NaCl などの 1:1 型の対称電解質溶液中では、表面電荷密度と表面電位、拡散層内の電荷密度 σ_d の関係は、Gouy-Chapman モデルにより、

$$\sigma = -\sigma_d = \left(\frac{2\epsilon_r \epsilon_0 \kappa k_B T}{e} \right) \sinh \left(\frac{e \psi_d}{2k_B T} \right) \quad (1.3.12)$$

と書ける。ここで、 $\epsilon_r \epsilon_0$ 誘電率、 κ は Debye 長の逆数であり電解質の濃度 n を用いて、

$$\kappa = \left(\frac{2e^2 n}{\epsilon_r \epsilon_0 k_B T} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (1.3.13)$$

と定義される。

モデルパラメータとして pK, Γ_T, C_s の値を決めてやり、(1.3.7)-(1.3.12) 式からなる連立方程式を解けば、様々な pH、電解質濃度での表面電荷密度 σ と表面電位 ψ_0 が求められる。このモデルは、Stern 層での KCl などの支持電解質からのイオンの吸着を無視するモデルで、1pK basic Stern(1pK-BS) モデルと呼ばれる。

59

濃厚分散系の基礎理論を詳述！

1.5 水系の界面動電現象

図 1.30 水銀液滴内外の流速分布および球形固体粒子周囲の電気泳動流速分布。 $u(r)$ は粒子表面に平行な接線成分の r 依存を示す。縦軸の 1 目盛りは $\epsilon_r \epsilon_0 E / \eta$ を表す。

$r \rightarrow \infty$ における流速 $u(\infty)$ が電気泳動速度 U に負号を付けた量になる。電気泳動速度 U をさらに電場で割った量が電気泳動移動度 $\mu = U/E$ である。液滴の粘度 $\eta_d \rightarrow \infty$ で液滴は固体になり、流速分布 $u(r)$ は固体粒子周囲の流速分布 $u(r)$ に帰着する。液滴内部で液体の流動が起きるために、固体表面の場合と違って、液滴表面上の流速 $u(0)$ はゼロにならずに、有限の値をとる。この結果、ゼータ電位の値が等しくても、液滴粒子の電気泳動速度は固体粒子の電気泳動速度より大きな値を示す。

水銀の電気泳動移動度 μ に対する一般式 [43] から以下の近似式が導かれている [44]。この式は液滴に対する Henry の式に対応する。

$$\mu = \frac{2\epsilon_r \epsilon_0 \zeta}{3\eta} \left\{ 1 + \frac{1}{2 \left(1 + \frac{1.86}{\kappa a} \right)^3} \right\} \left\{ \frac{\eta}{3\eta_d + 2\eta} \kappa a + \frac{3(\eta_d + \eta)}{3\eta_d + 2\eta} \right\} \quad (1.5.24)$$

(1.5.24) 式は水銀のように電気泳動の間、表面が等電位に保たれる液滴に適用できる。

91

初学者にも優しい図解が豊富！

第4章 数値シミュレーション

せず、粒子間の微小な重なりによって法線接触変位 δ_{ij}^n を表現する (図 4.1)。接触力は変位に対する粘弾性応答と捉え、Voigt モデルに基づき弾性項と粘性項の足し合わせて記述する。

$$F_{ij}^{cn} = \left(k_{ij}^n \delta_{ij}^n - \gamma_{ij}^n \dot{\delta}_{ij}^n \right) n_{ij} \quad (4.1.6)$$

k_{ij}^n と γ_{ij}^n は、それぞれ弾性係数と粘性減衰係数である。法線接触変位 δ_{ij}^n と法線相対速度 $\dot{\delta}_{ij}^n$ は次式で与えられる。

$$\delta_{ij}^n = \max(a_i + a_j - r_{ij}, 0) \quad (4.1.7)$$

$$\dot{\delta}_{ij}^n = \dot{v}_{ij} \cdot n_{ij} \quad (4.1.8)$$

ここで、 $\dot{v}_{ij} = v_i - v_j$ である。粒子同士の接触時に $\delta_{ij}^n > 0$ となることを (4.1.7) 式は表している。(4.1.6) 式の粘性項は粒子間衝突時のエネルギー散逸を表し、粒子の塑性などの効果を現象論的に記述している。4.1.3 項の解析から分かるように、粘性減衰係数を次式で表すと、係数 λ は衝突

図 4.1 2 粒子間の接触

220

数値シミュレーション手法も収録！