

○文献

「Stratification in Drying Films Containing Bidisperse Mixtures of Nanoparticles」 Langmuir 2018, 34, 7161–7170

Yanfei Tang, Gary S. Grest, and Shengfeng Cheng

Department of Physics, Center for Soft Matter and Biological Physics, and Macromolecules Innovation Institute, Virginia Polytechnic Institute and State University, Blacksburg, Virginia 24061, United States Sandia National Laboratories, Albuquerque, New Mexico 87185, United States

○要旨

溶媒と二分散ナノ粒子(サイズ d_l の大粒子とサイズ d_s の小粒子を含む)懸濁液について分子動力学(MD)シミュレーションを用いて、乾燥中のナノ粒子分布に関する蒸発速度と体積分率の影響を調査した。研究の結果、small on top(上層側に小粒子が蓄積する)の積層構造は $Pes \phi_s \geq c$ ($C=1$) (Pes : ペクレ数、 ϕ_s : 小粒子の体積分率) の時に発生することが分かった。

small on top の積層構造に関する $Pes \phi_s$ の閾値は、溶媒の絶対粘度として取り扱うモデルの予測に対して α の 2 乗の因子により大きくなる ($\alpha=d_l/d_s$: 大粒子と小粒子のサイズ比)。更にシミュレーションの結果から、溶媒の蒸発速度が減少するときに、small on top(上層側に小粒子が蓄積する)の積層構造は、既存の理論によって予測されないほど促進することがわかった。この想定されない挙動は、気液界面での蒸発潜熱による溶媒密度勾配に伴う熱拡散に従って説明される。超高速蒸発に対して、勾配が大きく、気液界面へ向かってナノ粒子が移動する。この誘発効果は、小粒子がより大きい(α が小さい)程強く、蒸発速度がより遅い(しかし乾燥フィルム内にナノ粒子の均一分布するほどは遅くない)とき、small on top の積層構造がより明確になる。

同様の効果は、 Pes は大きい ϕ_s が小さいとき、 $Pes \phi_s$ が閾値を超える場合、large on top(上層側に大粒子が蓄積する)の積層構造の発生につながる可能性がある。研究結果から、蒸発による粒子分離と集合のモデル化及び超高速蒸発によってもたらされる密度勾配の重要な役割を示すとき、溶媒を含む重要性が明確になった。