

## コロイド系の動的構造形成・応答シミュレーション：分散から塗布・乾燥まで

(東大環安セ<sup>1)</sup>) ○辰巳 怜<sup>1</sup>

Numerical simulation of the formation and response of colloidal structures during fabrication process: dispersing, coating, and drying (<sup>1</sup>*Environmental Science Center, The University of Tokyo*) ○Rei Tatsumi<sup>1</sup>

Various functional materials such as battery electrodes and electronic materials are produced from colloidal suspensions. In the fabrication of these materials, the non-equilibrium structure formation of colloidal particles is induced during the operations: dispersing, coating, and drying. Since the formed colloidal structures affect operational efficiency and material performance, we have developed a numerical simulator to understand the relationship between the structure formation and the operational conditions. We will discuss the results that have been obtained by the numerical simulations.

**Keywords :** Colloid; Direct numerical simulation; Langevin dynamics; Rheology

コロイド系の塗布・乾燥プロセスにより電池電極や電子材料などの様々な機能材料が作製される(図1)。材料性能は粒子が形成する高次構造により決定付けられるため、その制御が課題となる。また、構造形成はレオロジー特性や乾燥特性にも反映され、塗布・乾燥プロセスそのものにも影響を及ぼす。

コロイド系の構造形成については、DLVO 理論などの粒子間ポテンシャルに基づく平衡論・速度論を用いて分散・凝集がこれまで議論されてきた。しかし、塗布・乾燥プロセスでは、流動場や乾燥場(気液界面の作用)という外場が駆動する動的な構造形成を考える必要がある。そのための方法として、流動場・乾燥場の下での粒子の微視的運動から構造形成過程を解析・可視化する数値シミュレータ SNAP (Structure of NAno Particles) を開発し、考察を進めてきた<sup>1-3)</sup>。本講演では、SNAP を通じてこれまでに得てきた知見を紹介する。

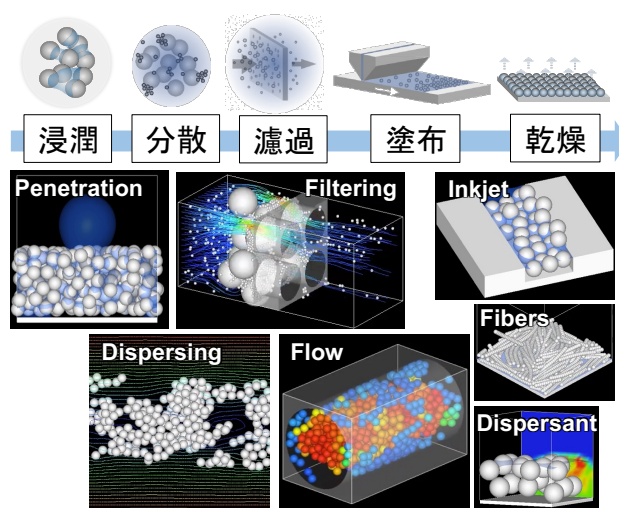


図1. コロイド系からの材料作製プロセスと各単位操作の SNAP による数値計算例。

1) SNAP 研究会, [https://www.product-innovation.or.jp/snap/index\\_snap2019.html](https://www.product-innovation.or.jp/snap/index_snap2019.html).

2) 辰巳怜, 色材協会誌 **94**(2), 52 (2021).

3) 辰巳怜, 小池修, 山口由岐夫, 化学工学 **80**(3), 179 (2016).