ディスク状ヘマタイト粒子分散系の磁気粘性効果に関する ブラウン動力学シミュレーション

On the Magneto-Rheological Properties of a Disk-Like Hematite Particle Dispersion by Means of Brownian Dynamics Simulations

○正 佐藤 明 (秋田県大)

Akira SATOH, Akita Prefectural University, 84-4, Ebinokuchi, Tsuchiya-aza, Yuri-honjo, Akita 015-0055

We have investigated the orientational distribution and magneto-rheological characteristics of a disk-like hematite particle dispersion by means of Brownian dynamics simulations. In the situation of a strong applied magnetic field, the particles can freely rotate about the magnetic moment direction together with their magnetic moment aligning along the magnetic field direction, which leads to a linear peak-type orientational distribution, not a single peak-type distribution that is usual for a ferromagnetic particle dispersion. Since the magnetic moment is more strongly restricted to the magnetic field direction with increasing field strength, the viscosity due to the magnetic properties of the particles increases more significantly. An increase in the magnetic particle-particle interaction strength leads to a decrease in the viscosity, and in the range of a magnetic interaction strength where column-like clusters are formed, the viscosity does not show a significant change with increasing magnetic interaction strength.

Key Words: Magnetic Colloidal Dispersion, Brownian Dynamics Method, Disk-like Hematite Particle, Simple Shear Flow, Orientational Distribution Function, Magneto-Rheology

1. 緒言

本研究は、通常の並進と回転のブラウン運動に加え、スピン回転ブラウン運動も考慮したブラウン動力学シミュレーション⁽¹⁾を実行し、ディスク状ヘマタイト粒子分散系の一様磁場中での配向分布とレオロジー特性を検討することを目的とする。

2. 粒子モデル

ディスク状ヘマタイト粒子⁽²⁾として、中心を通る平面で軸方向に平行な平面で切った断面形状が spherocylinder 粒子の断面形状と一致するような粒子でモデル化する。粒子は粒子の軸方向と垂直な方向に磁化されているものとする。このようなモデルを用いると、一様磁場中における粒子と磁場との相互作用により、粒子の磁気モーメントを磁場方向に向かせようとするトルク $T^{(M)}$ が粒子に作用する。多粒子分散系では、粒子間の磁気的な相互作用により、粒子 j が粒子 i に力 $F_{ij}^{(m)}$ およびトルク $T_{ij}^{(m)}$ を作用することになる。

3. 粘度の評価法

粒子の磁気特性ならびに粒子の界面活性剤層の斥力に起因するせん断粘度 η_{yx}^m はせん断応力 τ_{yx}^m によって $\eta_{yx}^m = \tau_{yx}^m / \dot{\gamma}$ で定義される。前報⁽³⁾と同様に、 $\eta_{yx}^M = \eta_{yx}^m / (\eta_s n_0 V_p)$ で定義される無次元粘度 η_{yx}^M に着目する。なお、 V_p は棒状粒子の体積、 η_s は母液の粘度、 n_0 は粒子の数密度である。本研究では磁気粘性効果をより詳細に議論するため、粘度 $\eta_{yx}^M = \eta_{yx}^{tot} = \eta^F + \eta^{TH} + \eta^{TF}$ をその構成要素 η^F , η^{TH} , η^{TF} に分解して特性を調べることになる。 η^{TH} は磁場と磁気モーメントの相互作用に基づくトルクから生じる粘度、 η^F と η^{TF} はそれぞれ粒子間相互作用に起因して生じる力およびトルクに基づく粘度である。なお、せん断流は x 軸方向に印加されている。

4. 粒子の配向分布関数

配向分布関数 Ψ は粒子の配向特性を表す関数で、この値が大きいほどその方向に向く確率が大きくなる。配向分布関数を用いると、粒子の方向および磁気モーメントの方向が (θ, ϕ, ψ) から $(\theta + d\theta, \phi + d\phi, \psi + d\psi)$ の微小範囲内に見出される確率が $\Psi(\theta, \phi, \psi) S d\theta d\phi d\psi$ で表される。結果の可視化のた

めに、配向分布関数 $\Psi(\theta, \phi, \psi)$ をスピン角 ψ に関して積分した配向分布関数 $\Psi_{\theta\phi}$ に着目する。ここに、 θ は z 軸からの天頂角、 ϕ は x 軸から y 軸方向に取った方位角、 ψ は粒子軸まわりのスピン角である。

5. 結果と考察

5-1 配向分布関数の印加磁場の強さへの依存性 図1はペクレ数を $Pe=1$ 、粒子間相互作用の強さをコラム状クラスターが顕著に形成される $\lambda=50$ 、磁場を強磁場の環境下である $\xi=20$ の場合の配向分布関数である。分布形状の特徴をより明確に定量的に把握するために、 $\theta=90^\circ$ での ϕ の変化に対する $\Psi_{\theta\phi}$ 分布を図2に示す。

磁場が非常に弱い場合 ($\xi=1$)、コラム状クラスターは特定の方向に顕著に配向することはないが、図1に示す強磁場の場合、 $\phi=0^\circ$ 付近に θ 方向にほぼ一定の尾根状の線形ピーク型の配向分布の特徴が現れるようになる。図2の分布も考慮すると、この傾向が磁場の強さの増加とともに非常に顕著になることがわかる。これは、磁場の強さが増すとともに粒子の磁気モーメントは磁場方向 (y 軸方向) により強く拘束されることによるものである。さらに、せん断流の影響に対しても支配的となるので、粒子は磁気モーメントを磁場方向に一致させながら、その軸まわりに自由に回転運動を行うことができるようになる。これが θ 方向に線形のピーク値を持つ配向分布となる理由である。

Fig. 1 Profile of the orientational distribution function for $Pe=1$, $\lambda=50$ and $\xi=20$

Fig.2 Profiles of the orientational distribution function for $Pe=1$ and $\lambda=50$.

Fig.3 Dependence of the viscosity on the magnetic field strength ξ for $Pe=1$ and $\lambda=50$.

Fig. 4 Dependence of the viscosity on the magnetic particle-particle interaction strength λ for $Pe=1$ and $\xi=5$

5-2 配向分布関数の粒子間相互作用の強さへの依存性 図には示さないが、粒子間相互作用の強さへの依存性は次の通りである。粒子間相互作用が $\lambda=40\sim50$ 間でコラム状クラスタが顕著に形成され始める。粒子間相互作用を $\lambda=50$ と大きくした場合、線形ピーク型から一点ピーク型の分布の特徴に移行する傾向が強くなり、粒子は単純せん断流の角速度ベクトル方向 (z 軸方向) に配向するようになる。これは、粒子間相互作用によって形成されたコラム状クラスタが z 軸方向に配向する傾向を有するようになるためである。

5-3 粘度の印加磁場の強さへの依存性 図3により、正味の粘度は磁場の強さとともに著しく増加していることがわかる。この正味の粘度の増加への寄与は主に印加磁場によって磁気モーメントが強く磁場方向に拘束されることから生じる粘度成分 η^{TH} であり、磁場の増加とともに顕著な寄与となる。一方、磁場が非常に弱い領域においては、粒子間相

互作用の力に起因する成分 η^F の寄与が主である。これは種々の方向を向いたコラム状クラスタ内の粒子同士やクラスタ同士がせん断流下で引き離されるような力が働くことに起因している。粘度成分 η^{TF} が磁場の強さとともに負の値が顕著になるのは非常に興味深い。

5-4 粘度の粒子間相互作用の大きさへの依存性 図4はペクレ数 $Pe=1$ 、印加磁場の強さを $\xi=5$ に設定して得た結果である。正味の粘度 η^{ol} が粒子間相互作用の大きさとともに減少し、コラム状クラスタが形成される $\lambda=50$ 付近で大きく変化しなくなることがわかる。この領域における正味の粘度に寄与するのは、印加磁場との相互作用による磁気トルクに起因する粘度 η^{TH} によるものである。粘度 η^{TH} が粒子間相互作用の大きさとともに減少するのは、コラム状クラスタを形成するとクラスタ内の粒子同士の相互作用により、磁気モーメントが必ずしも磁場方向に配向しなくなるからである。粒子間相互作用が弱い $\lambda \leq 40$ の領域で粘度 η^{TF} が負になるのは各粒子の磁気モーメントが磁場方向を向く傾向があるなど、そのような磁気モーメント同士には互いの粒子の磁気モーメントを反対方向に向かせようとするトルクが発生するためである。従って、そのような磁気モーメントの配置を実現させるコラム状クラスタを形成する $\lambda=50$ 付近では η^{TH} の値はほぼゼロとなることわかる。

5-5 粘度のペクレ数への依存性 ペクレ数の値のみが大きくなるということは、せん断流の影響が磁場や粒子間磁気力よりも支配的になることを意味している。従って、凝集構造の形態が変化しない限り、粘度がペクレ数とともに単調に減少する特徴を有する。

6. 結 言

ディスク状ヘマタイト粒子分散系を対象として、単純せん断流中でのディスク状粒子の配向特性と磁気粘性効果をブラウン動力学シミュレーションにより検討した。本ブラウン動力学シミュレーションでは、通常の回転ブラウン運動の他に、粒子軸まわりのスピン回転ブラウン運動を考慮していることが大きな特徴である。強磁場の環境下では、粒子は磁気モーメントを磁場方向に一致させながら、その軸まわりに自由に回転運動を行うことができるようになるので、一点ピーク型ではなく線形のピーク値を持つ配向分布となる。せん断流が支配的になると、もしくは、粒子間相互作用が強くなると、一点ピーク型の分布の特徴が強く表れるようになる。これは、粒子間相互作用によって形成されたコラム状クラスタが磁場方向に配向するようになるためである。磁気モーメントは磁場の強さとともに強く磁場方向に拘束されるので、粘度は著しい増加を示す。粒子間相互作用の大きさの増加とともに粘度は減少し、コラム状クラスタが形成される粒子間相互作用の大きさの付近で大きく変化しなくなる。これは、コラム状クラスタ内の粒子同士の相互作用により、磁気モーメントが必ずしも磁場方向に配向しなくなるからである。凝集構造の形態が変化しない限り、粘度はペクレ数とともに単調に減少する。

引用文献

- (1) 佐藤 明, 棒状ヘマタイト粒子分散系へのブラウン動力学法の適用に際しての問題点の検討, 日本機械学会論文集 B 編, 78-793 (2012), 1495-1511.
- (2) Ozaki, M., Kratochvil, S., and Matijevic, E., Formation of monodispersed spindle-type hematite particles, Journal of Colloid and Interface Science, 102 (1984), 146-151.
- (3) 佐藤 明, 棒状ヘマタイト粒子分散系の逆磁気粘性効果に及ぼすスピン回転ブラウン運動の影響, 日本機械学会論文集 B 編, 78-786 (2012), 231-243.