2008.3.30
白井達郎

3 成分系塗膜乾燥シミュレーションの 2 成分系への適用

混合溶剤を用いた場合（3 成分系）の塗膜乾燥シミュレーションを、単溶剤の場合（2 成分系）の塗膜乾燥シミュレーションに適用する際の留意事項、適用結果を、PVAC-Toluene 系を例に説明する。

単溶剤のシミュレーションに適用するためには、ごく微量の仮想の第 3 成分を加えたケースで計算するのが常套手段であるが、ここでは同じ Toluene を微量添加するとした場合について述べる。このようにすると、PVAC-Toluene-Toluene 系ということになって、物理的な意味合いは曖昧なものになるが、取り扱い上はより簡便になる。

使用したプログラムは、自由体積理論モディファイ版の改良版 [1)]であるが、考え方は他の 3 成分系シミュレーションにも当てはまる。計算のインプット条件とその計算結果（一部）を表 1 に示す。

表 1 から分かる様に、以下に示すような条件でシミュレーション計算を行った。

（1）溶剤 1、2 の物性値は、Toluene の値とし、同一にする。

（2）溶 1－ポリマー、溶剤 2－ポリマー間の相互作用係数は、同一値とする（表 1 ①）。

（3）溶剤 1－溶剤 2 間の相互作用係数は、1.0 とする（表 1 ②）。

（4）溶剤 2 の初期濃度は、ごく小さな値とする（表 1 ③）。

この計算結果を検証するため、同一乾燥条件の文献値と比較した。その結果を図 1 に示す。

表１　インプット条件と計算結果の一部

==========
PHISICAL PROPERTIES
==========

SOLID (POLYMER)

Heat Capacity of Polymer (J/g.K)	= 1.650
Density of Polymer (g/cm^3)	= 1.1800

SOLVENT-1

Heat Capacity of Solvent-1 (J/g.K)	= 1.650
Heat of Vaporization of Solvent-1 (J/g)	= 360.00
Diffusion Coefficient of Solvent-1 in Air (cm^2/s)	= 0.08490
Vapor Pressure Parameter A of Solvent-1	= 6.954640
Vapor Pressure Parameter B of Solvent-1	= 1344.800
Vapor Pressure Parameter C of Solvent-1	= 219.482
Density of Solvent-1 (g/cm^3)	= 0.860
Molecular Weight of Solvent-1	= 92.13

SOLVENT-2

Heat Capacity of Solvent-2 (J/g.K)	= 1.650
Heat of Vaporization of Solvent-2 (J/g)	= 360.00
Diffusion Coefficient of Solvent-2 in Air (cm^2/s)	= 0.08490
Vapor Pressure Parameter A of Solvent-2	= 6.954640
Vapor Pressure Parameter B of Solvent-2	= 1344.800
Vapor Pressure Parameter C of Solvent-2	= 219.482
Density of Solvent-2 (g/cm^3)	= 0.860
Molecular Weight of Solvent-2	= 92.13

BASE FILM

Heat Capacity of Base Film (J/g.K)	= 1.250
Density of Base Film (g/cm^3)	= 1.370

==========
FITTING PARAMETERS
==========

Interaction Parameter χ 1p	= 0.393	①同一値とする
Interaction Parameter χ 2p	= 0.393	
Interaction Parameter χ 12	= 1.000	②1.0とする
Mass Trans. Coeff. Correct. Param. Keff1	= 1.00	
Mass Trans. Coeff. Correct. Param. Keff2	= 1.00	
Diffusion Coeff. Correct. Factor Fter1	= 1.00	
Diffusion Coeff. Correct. Factor Fter2	= 1.00	

==========
SOLVENT-1/POLYMER DIFF. COEFF. PARAMS
==========

F1	= 0.001142
F2	= -2485.30
F3	= -0.53510
F4	= -0.061170
F5	= -1.76018E+02
F6	= -1.79301E+03
F7	= -3.59842E+03
F8	= 8.28272E+04
F9	= 6.25718E+05
F10	= 1.69319E+06
F11	= 1.59368E+06

==========
SOLVENT-2/POLYMER DIFF. COEFF. PARAMS
==========

F1	= 0.001142
F2	= -2485.30
F3	= -0.53510
F4	= -0.061170
F5	= -1.76018E+02
F6	= -1.79301E+03
F7	= -3.59842E+03
F8	= 8.28272E+04
F9	= 6.25718E+05
F10	= 1.69319E+06
F11	= 1.59368E+06

==========
CALCULATION ACCURACY
==========

Increment of z (m) = 2.00000
Number of Layers = 40

==========
OPERATING CONDITION
==========

ZONE 1

Initial Coating Thickness (cm) = 0.025400
Initial Composition of Solvent 1 (g/cm^3) = 0.7790
Initial Composition of Solvent 2 (g/cm^3) = 0.0010 ③微量とする
Base Film Thickness (cm) = 0.0508000
Web Speed (m/s) = 0.100
Initial Temperature (℃) = 57.00
Outer Temperature (℃) = 77.00
Zone Length (m) = 70.00
Solvent-1 Partial Pressure in Gas (mmHg) = 0.00
Solvent-2 Partial Pressure in Gas (mmHg) = 0.00
Base-side Heat Trans. Coeff. (W/cm^2.K) = 0.00110000
Coat-side Heat Trans. Coeff. (W/cm^2.K) = 0.00110000

[SIMULATION RESULTS]

TIME (s)	LENGTH (m)	TEMP (deg-C)	AV CONC(1) (g/cm3)	AV CONC(2) (g/cm3)	SOL REMAIN (%)	COAT THICK (cm)
0.000	0.000	57.00	0.7790	0.0010	100.0	0.02540
1.000	0.100	56.46	0.7779	0.0010	98.4	0.02504
2.000	0.200	55.95	0.7767	0.0010	96.9	0.02469
3.000	0.300	55.47	0.7756	0.0009	95.4	0.02435
4.000	0.400	55.01	0.7744	0.0009	94.0	0.02401
5.000	0.500	54.58	0.7733	0.0009	92.6	0.02368
6.000	0.600	54.17	0.7721	0.0009	91.2	0.02336
7.000	0.700	53.78	0.7710	0.0009	89.8	0.02305
8.000	0.800	53.42	0.7698	0.0009	88.5	0.02274
9.000	0.900	53.07	0.7686	0.0009	87.1	0.02244
10.000	1.000	52.74	0.7674	0.0008	85.8	0.02214
11.000	1.100	52.43	0.7662	0.0008	84.6	0.02184
12.000	1.200	52.13	0.7649	0.0008	83.3	0.02155
13.000	1.300	51.85	0.7637	0.0008	82.1	0.02127
14.000	1.400	51.58	0.7624	0.0008	80.8	0.02099
15.000	1.500	51.33	0.7611	0.0008	79.6	0.02071
16.000	1.600	51.09	0.7598	0.0008	78.4	0.02043
17.000	1.700	50.86	0.7585	0.0007	77.3	0.02016
18.000	1.800	50.64	0.7571	0.0007	76.1	0.01989
19.000	1.900	50.43	0.7558	0.0007	74.9	0.01963
20.000	2.000	50.24	0.7544	0.0007	73.8	0.01937
21.000	2.100	50.05	0.7530	0.0007	72.7	0.01911
22.000	2.200	49.87	0.7515	0.0007	71.6	0.01885
23.000	2.300	49.70	0.7500	0.0007	70.4	0.01859
24.000	2.400	49.54	0.7485	0.0007	69.3	0.01834
25.000	2.500	49.39	0.7470	0.0006	68.2	0.01809
26.000	2.600	49.24	0.7454	0.0006	67.2	0.01784
27.000	2.700	49.10	0.7438	0.0006	66.1	0.01759
28.000	2.800	48.97	0.7422	0.0006	65.0	0.01734
29.000	2.900	48.85	0.7405	0.0006	64.0	0.01710
30.000	3.000	48.73	0.7388	0.0006	62.9	0.01685
31.000	3.100	48.62	0.7371	0.0006	61.8	0.01661
32.000	3.200	48.51	0.7353	0.0006	60.8	0.01637
33.000	3.300	48.41	0.7335	0.0005	59.8	0.01613
34.000	3.400	48.31	0.7316	0.0005	58.7	0.01589
35.000	3.500	48.22	0.7297	0.0005	57.7	0.01565
36.000	3.600	48.13	0.7277	0.0005	56.7	0.01542
37.000	3.700	48.05	0.7257	0.0005	55.7	0.01518
38.000	3.800	47.97	0.7236	0.0005	54.6	0.01495
39.000	3.900	47.90	0.7215	0.0005	53.6	0.01472
40.000	4.000	47.83	0.7193	0.0005	52.6	0.01449

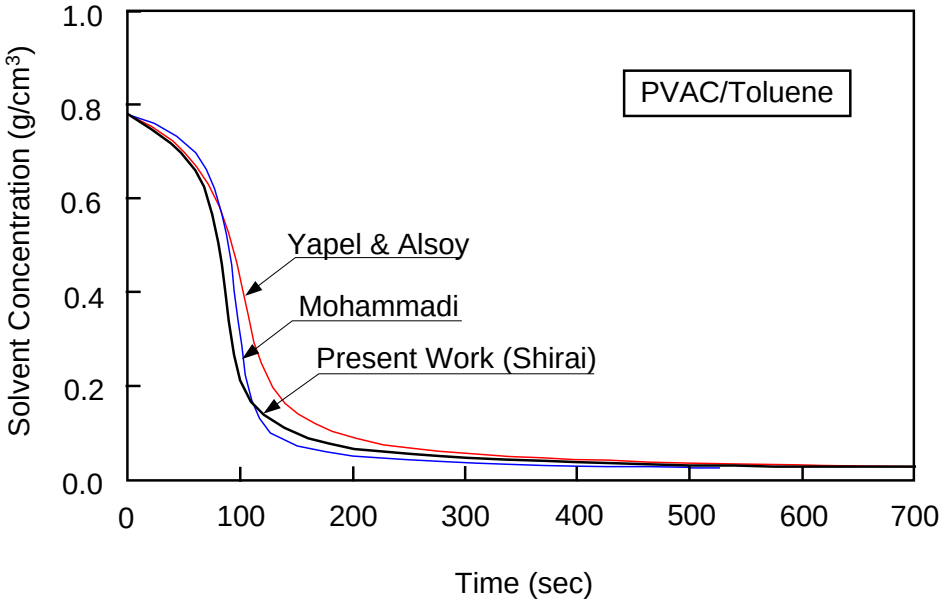

図 1　シミュレーション計算結果の検証

図 1 中の Yapel [2)]のものが、元となるシミュレーション結果であり、Alsoy [3)]、Mohammadi [4)]等が各々のシミュレーションプログラムの検証に用いている。図中の Present Work (Shirai)が、表 1 の計算結果によるものであり、自由体積理論を元にモディファイした理論に基づいた 3 成分系プログラム [1)]を、2 成分系に適用した計算結果であるが、まずまずの一致性を示していると言えよう。

（参考文献）

1) 白井達郎，混合溶剤塗膜乾燥シミュレーションの改良と最適化の検討，プラスチックス, Vol. 58, No. 6, P.183, No.7, P. 66 and No.8, P.75 (2007)

2) Yapel, R. A., A Physical Model of the Drying of Coated Films, MS Thesis, Univ. of Minesota (1988)

3) Alsoy, S., Modeling of Polymer Drying and Devolatilization Processes, PhD Thesis, Pennsylvania State Univ. (1998)

4) Mohammadi, R. P., Mechanism of Bubble Formation During the Drying of Polymer Films, PhD Thesis, Pennsylvania State Univ. (2005)