

Schriftenreihe
Lehrstuhl für Partikelverfahrenstechnik

Zur Modellierung von Kapillarbrücken
zwischen nanoskaligen Partikeln

Michael Dörmann



Zur Modellierung von Kapillarbrücken zwischen nanoskaligen Partikeln

Zur Erlangung des akademischen Grades eines
DOKTORS DER INGENIEURWISSENSCHAFTEN (Dr.-Ing.)
der Fakultät für Maschinenbau
der Universität Paderborn

genehmigte
DISSERTATION

von
Dipl.-Wirt.-Ing. Michael Dörmann
aus Bad Driburg

Tag des Kolloquiums: 05.12.2017

1. Gutachter: Prof. Dr. Hans-Joachim Schmid
2. Gutachter: Prof. Dr. Hans-Jürgen Butt

Schriftenreihe Lehrstuhl für Partikelverfahrenstechnik

Band 4

Michael Dörmann

**Zur Modellierung von Kapillarbrücken
zwischen nanoskaligen Partikeln**

D 466 (Diss. Universität Paderborn)

Shaker Verlag
Aachen 2018

Bibliografische Information der Deutschen Nationalbibliothek

Die Deutsche Nationalbibliothek verzeichnet diese Publikation in der Deutschen Nationalbibliografie; detaillierte bibliografische Daten sind im Internet über <http://dnb.d-nb.de> abrufbar.

Zugl.: Paderborn, Univ., Diss., 2017

Copyright Shaker Verlag 2018

Alle Rechte, auch das des auszugsweisen Nachdruckes, der auszugsweisen oder vollständigen Wiedergabe, der Speicherung in Datenverarbeitungsanlagen und der Übersetzung, vorbehalten.

Printed in Germany.

ISBN 978-3-8440-5745-4

ISSN 2198-1302

Shaker Verlag GmbH • Postfach 101818 • 52018 Aachen

Telefon: 02407 / 95 96 - 0 • Telefax: 02407 / 95 96 - 9

Internet: www.shaker.de • E-Mail: info@shaker.de

Vorwort

Die vorliegende Arbeit entstand während meiner Zeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Lehrstuhl für Partikelverfahrenstechnik an der Universität Paderborn von 2011 bis 2016.

Mein besonderer Dank gilt meinem Doktorvater Prof. Dr. Hans-Joachim Schmid, dass er mir die Arbeit an diesem interessanten Forschungsthema ermöglicht hat und für die Unterstützung während der gesamten Promotionszeit. Er stand immer mit guten Ratschlägen zur Seite und hat aber auch die notwendigen kritischen Fragen gestellt. Dadurch war ich immer motiviert meine Arbeit mit dem nächsten Schritt fortzusetzen.

Bei Herrn Prof. Dr. Hans-Jürgen Butt bedanke ich mich für die Übernahme des Koreferats dieser Arbeit.

Ich danke meinen Kollegen und Freunden am Lehrstuhl für die abwechslungsreiche und schöne Zeit am Lehrstuhl und für die Diskussionen über das Thema und die daraus entstandenen Ideen. Außerdem war es mir dadurch möglich, einen Einblick in viele verschiedene Forschungsthemen zu erhalten. Ebenfalls danke ich meinen Kollegen von anderen Universitäten und Arbeitsgruppen für die Diskussionen und Kooperationen.

Meinen Eltern gilt ein großes Dankeschön für die Unterstützung während des Studiums und besonders für das große Vertrauen. Ohne dieses Vertrauen hätte ich dies alles nicht erreicht.

Weiterhin danke ich meinen Schwestern mit ihren Familien und meinem leider bereits verstorbenen Großvater für die Unterstützung und die schöne Zeit neben der Promotion, was ein guter Ausgleich war.

Außerdem bedanke ich mich bei der Deutschen Forschungsgemeinschaft (DFG) für die finanzielle Förderung des Projektes im Rahmen des Schwerpunktprogramms „Partikel im Kontakt – Mikromechanik, Mikroprozessdynamik und Partikelkollektive“ und für die regelmäßigen Workshops, die den Austausch mit vielen anderen Gruppen ermöglichten.

Zusammenfassung

Kapillarbrücken sind sehr wichtig bei der Betrachtung der Wechselwirkungen zwischen Partikeln, da sie starke Haftkräfte ausüben. Die Bestimmung der genauen Kapillarkräfte ist jedoch komplex, weshalb in der Regel Näherungen verwendet werden. So gibt es bisher keine umfassende Untersuchung der Kapillarkräfte bei nanoskaligen Partikeln. Weiterhin ist zu beachten, dass bei kleineren Partikeln die Rauheit einen größeren Einfluss erhält.

In dieser Arbeit werden Kapillarbrücken zwischen Partikeln durch eine numerische, kontinuumsmechanische Berechnung der Meniskusform untersucht. Der Fokus liegt hierbei auf nanoskaligen Partikeln. Der Einfluss verschiedener Parameter auf die entstehenden Kräfte wird ermittelt und die Zusammensetzung der Kapillarkraft betrachtet. Es wird unter anderem eine Kontaktsteifigkeit für Kapillarbrücken hergeleitet und gezeigt, dass die kontinuumsmechanische Bestimmung von Kapillarbrücken auch bei Partikeln mit sehr geringen Durchmessern möglich ist.

Zur Betrachtung rauer Partikeln wird eine Modellierungsmöglichkeit vorgestellt, mit der Partikeln mit zufälligen Rauheiten modelliert werden können. Durch die Anpassung der Parameter ist es möglich, verschiedene Partikelformen zu modellieren. Außerdem werden Ansätze für eine Methode zur Bestimmung dreidimensionaler Kapillarbrücken gezeigt, wie sie zwischen rauen Partikeln auftreten.

Summary

Capillary bridges are very important in the investigation of particle interactions due to the resulting high adhesion forces. The determination of the exact forces is complex and hence, often approximations are used. Therefore, there is no extensive analysis of the capillary forces between nanoscale particles. Furthermore, the roughness of the particles has a bigger influence for smaller particles.

In this work capillary bridges between particles will be investigated with a numerical, continuum-mechanical determination of the meniscus shape. The emphasis is on nanoscale particles. The influence of different parameters on the resulting forces will be examined and the composition of the total capillary force will be determined. A contact stiffness for capillary bridges will be derived and it will be shown that continuum-mechanical methods can be used to calculate capillary bridges between particles with very small diameters.

To examine rough particles a modelling method will be shown to develop particles with statistical roughnesses. By adjusting the parameters, different particle shapes can be modeled. Furthermore, first ideas for a method to determine three-dimensional capillary bridges will be given, as these exist between rough particles.

Liste der Vorveröffentlichungen

Veröffentlichungen und Konferenz-Proceedings

Dörmann, M.; Schmid, H.-J.: **Distance-dependency of capillary bridges in thermodynamic equilibrium.** Powder Technology 312 (2017), pp. 175-183.

Laube, J.; Dörmann, M.; Schmid, H.-J.; Mädler, L.; Colombi Ciacchi, L.: **Dependencies of the Adhesion Forces between TiO₂ Nanoparticles on Size and Ambient Humidity.** Journal of Physical Chemistry C, 121 (2017) 28, 15294-15303.

Dörmann, M.; Schmid, H.-J.: **Continuum-mechanical simulation of capillary bridges between nanoscale particles.** Proceeding: International Congress on Particle Technology (PARTEC), Nürnberg, Deutschland (2016)

Dörmann, M.; Schmid, H.-J.: **Simulation of Capillary Bridges between Particles.** Procedia Engineering 102 (2015), pp 14-23.

Dörmann, M.; Schmid, H.-J.: **Simulation of Capillary Bridges between Nanoscale Particles.** Langmuir, 30 (2014) 4, pp 1055–1062.

Vorträge und Poster

Dörmann, M.; Schmid, H.-J.: **Kontinuumsmechanische Simulation von Kapillarbrücken zwischen Nanopartikeln.** Jahrestreffen des Fachausschusses "Agglomerations- und Schüttguttechnik", Bingen am Rhein, Deutschland (2016)

Dörmann, M.; Schmid, H.-J.: **Threedimensional Simulation of Capillary Bridges between Nanoscale Particles.** Conference of the International Association of Colloid and Interface Scientists, Mainz, Deutschland (2015)

Dörmann, M.; Schmid, H.-J.: **Threedimensional Simulation of Capillary Bridges between Nanoscale Particles.** International Conference for Conveying and Handling of Particulate Solids, Tel Aviv, Israel (2015)

Dörmann, M.; Schmid, H.-J.: **Dreidimensionale Simulation von Kapillarbrücken zwischen Nanopartikeln.** Jahrestreffen des Fachausschusses "Agglomerations- und Schüttguttechnik", Magdeburg, Deutschland (2015)

Dörmann, M.; Schmid, H.-J.: **Simulation von Kapillarbrücken zwischen Partikeln.** Jahrestreffen des Fachausschusses "Agglomerations- und Schüttguttechnik", Magdeburg, Deutschland (2014)

Dörmann, M.; Schmid, H.-J.: **Simulation of Capillary Bridges between Particles.** World Congress on Particle Technology (WCPT), Peking, China (2014)

Dörmann, M.; Schmid, H.-J.: **Untersuchungen zu Kapillarbrückenkräften zwischen Nanopartikeln und ihr Einfluss auf Pulverfließigenschaften.** Jahrestreffen des Fachausschusses "Agglomerations- und Schüttguttechnik", Weimar, Deutschland (2013)

Dörmann, M.; Schmid, H.-J.: **Investigations on capillary forces between nanoparticles and their influence on powder flow properties.** International Congress on Particle Technology (PARTEC), Nürnberg, Deutschland (2013)

Dörmann, M.; Schmid, H.-J.: **Influence of relative humidity on bulk flow properties of nanoparticles.** International Conference for Conveying and Handling of Particulate Solids, Friedrichshafen, Deutschland (2012)

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Stand des Wissens	3
2.1	Kapillarkräfte	3
2.1.1	Form der Kapillarbrücke	3
2.1.2	Kapillarbrückenkraft	8
2.1.3	Berücksichtigung der Schwerkraft	13
2.1.4	Kontinuumsmechanische Annahmen	14
2.1.5	Adsorptionsschichten und Solvatationskräfte	16
2.1.6	Kinetik von Kapillarbrücken	18
2.1.7	Vergleich der Kapillarkraft mit anderen Haftkräften	21
2.2	Theoretische Bestimmung von Kapillarkräften	22
2.2.1	Bestimmen der Form der Kapillarbrücke	23
2.2.2	Vereinfachung der Berechnung	24
2.2.3	Energetische Betrachtungen	27
2.2.4	Molekulardynamische Betrachtungen	28
2.3	Berücksichtigung von Rauheiten	29
2.3.1	Einfluss der Rauheit auf Kapillarbrücken	29
2.3.2	Berücksichtigung von Rauheiten in Modellen	31
3	Zielsetzung und Vorgehensweise	33
4	Zweidimensionale Modellierung von rotationssymmetrischen Kapillarbrücken	37
4.1	Beschreibung der Methode	37
4.1.1	Berechnung der Kapillarbrücke	37
4.1.2	Bestimmung der numerischen Parameter	44
4.2	Validierung durch andere Berechnungen	47
4.3	Vergleich mit üblichen Vereinfachungen	49
4.3.1	Toroidale Näherung	50
4.3.2	Effektiver Partikeldurchmesser	54
4.4	Verhältnis der beiden Kapillarkraftanteile zueinander	56
4.5	Einfluss verschiedener Parameter auf die Kapillarbrücke	60
4.5.1	Relative Luftfeuchte	60

4.5.2	Partikelgröße.....	62
4.5.3	Kontaktwinkel.....	75
4.5.4	Abstand.....	85
4.6	Trennung von Partikeln.....	95
4.6.1	Thermodynamisches Gleichgewicht.....	96
4.6.2	Konstantes Volumen der Flüssigkeitsbrücke.....	96
4.6.3	Vergleich beider Grenzfälle.....	100
4.7	Form des Meniskus.....	105
4.8	Vergleich mit molekulardynamischen Simulationen.....	106
5	Modellierung von rauen Partikeln.....	111
5.1	Darstellung der Methode.....	111
5.1.1	Allgemeines Vorgehen.....	111
5.1.2	Genaue Beschreibung der Methode.....	113
5.2	Einfluss der Parameter auf die Form der Partikel.....	116
5.3	Überlappen von zwei rauen Partikeln.....	124
6	Ansätze zur dreidimensionalen Modellierung von Kapillarbrücken mit der Volume-of-Fluid-Methode.....	129
6.1	Allgemeine Beschreibung der VOF-Methode.....	129
6.2	Anwendung der VOF-Methode auf Kapillarbrücken.....	132
6.2.1	Allgemeines Vorgehen.....	132
6.2.2	Festlegen des Gitters.....	134
6.2.3	Bestimmen der Volumenanteile zu Beginn der Berechnung.....	134
6.2.4	Berechnung des Normalenvektors.....	137
6.2.5	Rekonstruktion der Schnittfläche.....	139
6.2.6	Berechnung der Krümmung.....	141
6.2.7	Anpassung der Volumenanteile.....	145
6.2.8	Besonderheiten bei der Betrachtung von drei Phasen.....	147
6.3	Validierung anhand einer Kugel und eines Ellipsoids.....	151
7	Zusammenfassung und Ausblick.....	161
	Literaturverzeichnis.....	165
	Anhang.....	175