## 2.0 浆料初始粘度模型

### 2.0.1 模型目标

准确预测催化剂浆料在低剪切速率下的初始表观粘度 ()。该粘度值将作为后续高速剪切模型、涂布模型等的重要输入参数。理解初始粘度有助于优化浆料配方，确保其具有良好的加工性能和稳定性。

### 2.0.2 关键输入参数

* **固相参数**:
  + 催化剂颗粒密度 ()
  + 碳载体颗粒密度 ()
  + 催化剂固含量 (, 重量百分比)
  + 碳载体固含量 (, 重量百分比)
  + 初级颗粒平均粒径 ()
  + 颗粒堆积因子/最大体积分数 ()
* **离聚物参数**:
  + 离聚物密度 ()
  + 离聚物固含量 (, 重量百分比)
  + 离聚物分子量 () (可选，用于更复杂的模型)
* **溶剂参数**:
  + 溶剂密度 ()
  + 溶剂粘度 ()
  + 溶剂介电常数 () (可选，用于考虑静电相互作用的模型)
* **其他**:
  + 温度 ()

### 2.0.3 关键输出

* **浆料初始表观粘度 ()**

### 2.0.4 关键理论与公式

催化剂浆料通常是浓缩悬浮液，其粘度行为复杂。可以从以下几个层面考虑：

1. **基准溶剂粘度**:
2. **固相颗粒的贡献**:
   1. **Einstein方程 (稀溶液)**: (不适用于浓缩浆料，但可作为理论起点)
   2. **Krieger-Dougherty方程 (浓缩悬浮液)**: 这是一个广泛应用的经验模型，考虑了颗粒体积分数 () 和最大堆积体积分数 ()。 其中， 是总的固相体积分数（催化剂+碳载体）， 是特性粘度 (intrinsic viscosity)，对于球形颗粒通常取2.5。 是一个关键参数，取决于颗粒形状、尺寸分布和聚集状态，通常在0.5-0.7之间。
3. **离聚物/粘结剂的贡献**:
   1. 离聚物溶解在溶剂中会增加有效连续相的粘度。可以先计算离聚物溶液的粘度 ，然后将其作为 Krieger-Dougherty 方程中的 "溶剂" 粘度。
   2. **Huggins方程或Kraemer方程**: 用于描述聚合物稀溶液的粘度。 (Huggins) 其中 是增比粘度， 是聚合物浓度， 是Huggins常数。
   3. 对于更浓的离聚物溶液，可能需要更复杂的模型或经验数据。
4. **颗粒-颗粒相互作用和颗粒-离聚物相互作用**:
   1. 这些相互作用会导致颗粒的有效体积分数增加，或者形成网络结构，显著提高粘度。
   2. **Quemada模型**: 另一个广泛用于浓缩悬浮液的模型，形式上与Krieger-Dougherty类似，但对 的解释和应用有所不同。
   3. **Casson模型 / Herschel-Bulkley模型**: 这些模型可以描述具有屈服应力的非牛顿流体行为，这在一些催化剂浆料中很常见。对于“初始粘度”，我们通常关注低剪切速率下的行为，或者通过这些模型拟合得到表观粘度。
      1. Herschel-Bulkley:
      2. 表观粘度: 在极低剪切速率下，如果存在屈服应力 ，粘度会趋于无穷大。实际应用中可能需要定义一个参考剪切速率下的粘度，或者使用剪切速率趋于零时的极限粘度（如果n=1且，则为牛顿流体）。
5. **综合模型思路**: 一个实用的方法可能是： a. 计算离聚物在溶剂中的有效粘度 (考虑离聚物浓度)。 b. 将含有离聚物的溶剂作为连续相，然后使用Krieger-Dougherty或Quemada模型计算固相颗粒引入的粘度增加，得到浆料粘度 。 其中 可能是有效体积分数，考虑了颗粒表面的吸附层或溶剂化层。

### 2.0.5 实现逻辑

1. **计算各组分体积分数**:
   1. 根据输入的各组分质量分数 () 和密度 ()，计算它们在浆料中的体积分数 () 以及总固相体积分数 () 和总浆料中离聚物体积分数 。
   2. 需要注意，离聚物可能部分溶解在溶剂中，部分吸附在颗粒表面。这里的 指的是如果所有离聚物都作为分散相时的体积分数，或者是在计算有效溶剂粘度时所用的浓度。
2. **计算有效连续相粘度 (如果考虑离聚物对溶剂的影响)**:
   1. 使用Huggins方程或其他聚合物溶液粘度模型，基于离聚物在溶剂相中的浓度，计算包含离聚物的有效溶剂粘度 。
3. **应用浓缩悬浮液模型**:
   1. 将 (或者直接用 如果离聚物影响单独考虑或较小) 作为基础粘度。
   2. 将总的有效固相体积分数 (可能包括颗粒本身及吸附层) 和最大堆积体积分数 代入Krieger-Dougherty或Quemada等模型，计算浆料的相对粘度或绝对粘度。
   3. 的取值至关重要，可以根据文献中相似体系的数据，或通过实验标定。
4. **参数校准与选择**:
   1. 由于浆料体系的复杂性，模型中的一些参数（如 , 的实际值, Huggins常数 ）可能需要通过少量实验数据进行校准，或者引用针对类似催化剂浆料体系的文献值。
   2. 如果浆料表现出明显的非牛顿行为（如屈服应力），则可能需要选择能描述该行为的模型（如Herschel-Bulkley），并明确初始粘度是指在特定低剪切条件下的表观粘度，或者外推到零剪切的粘度（若存在）。

### 2.0.6 与其他模型的关联

* **输出**:
  + 浆料初始粘度 ($\eta\_{app,0}$): 作为“2.1 高速剪切模型”中计算初始团聚体尺寸和剪切力的重要输入。
  + 浆料初始粘度 ($\eta\_{app,0}$): 也可能作为后续“涂布模型”的输入参数，影响湿膜的流平性和厚度均匀性。
* **依赖**:
  + 该模型不直接依赖于其他前序模型，而是基于浆料的原始配方参数。