

# 荷電コロイド結晶沈降過程の粗視化モデルによるシミュレーション

名古屋市立大学 奥 透、村井雅子、山本政彰、豊玉彰子、山中淳平

【はじめに】 荷電コロイド粒子は、それらの間に働く強い静電反発力により、溶媒中に安定に分散し、剛体球系に比べて非常に低い粒子密度で結晶化する。分散媒中に pH 勾配 [1] や温度勾配 [2] などを与えることにより結晶化を制御でき、それらを利用して cm オーダーの巨大な単結晶を作ることが可能である。結晶の格子面間隔は 100 nm のオーダーであり、可視光のブラッグ回折により虹彩色を示す。また、コロイド結晶をゲルによって固め [3]、力学的な変形を加えることによって光学特性を変化させることができ、やわらかいフォトニック結晶としての応用が期待されている。

荷電コロイド結晶を重力場中に置くと、鉛直方向に格子歪みが生じる。初期に一様な粒子密度の分布が、重力下で不均一な分布へ時間変化する様子、すなわちコロイド結晶の沈降過程は、分光学的な手法により実験的に観察できる。それによれば、沈降平衡での粒子密度プロファイルの特徴的長さは、剛体球系などの場合に比べて極端に大きい。これは、結晶に限らず荷電コロイドの液体状態においても観察されており [4]、荷電系に特有の現象である。

荷電コロイド粒子間の相互作用は、Yukawa 型のポテンシャル（遮蔽されたクーロンポテンシャル）により良く近似できることが、計算機シミュレーション [5] や密度汎関数理論 [6] によって示されている。我々は、Yukawa ポテンシャルにより相互作用する粒子系の結晶状態における粗視化された連続体モデルを構築し、沈降過程の粒子密度プロファイルの時間発展に関するシミュレーションを行った。

【結果と考察】 図 1 に粒子濃度分布の時間発展に対するシミュレーション結果と実験結果の比較を示す。両者の一致は良好である。特に、塩濃度の高い方でよく一致する。これは、Yukawa 系が塩濃度が高い場合により近似となることと整合している。

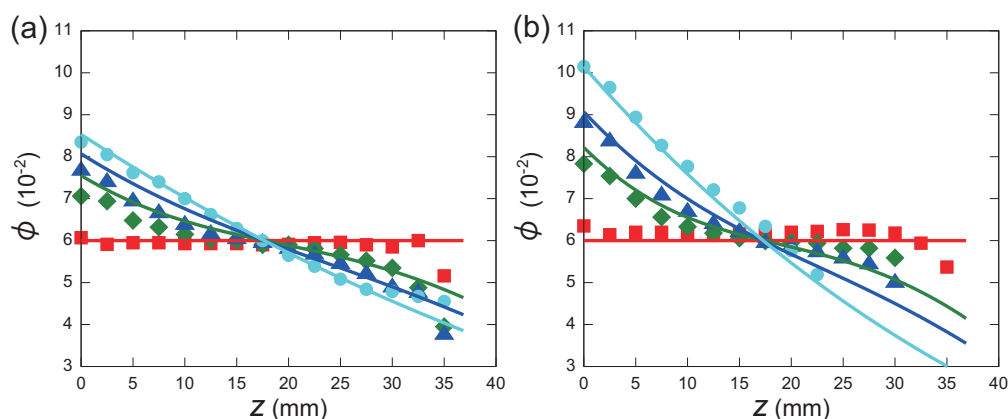


図 1: 塩濃度  $c_s = 10 \mu\text{M}$ , Lindemann ratio  $\delta_L = 0$  (a) および  $c_s = 15 \mu\text{M}$ ,  $\delta_L = 0.15$  (b) に対する粒子の体積分率  $\phi(z, t)$  の時間変化。  $z$  は鉛直方向の座標、  $t$  は時間を表す。シンボルは実験データで  $t = 0$  (squares), 2 (diamonds), 4 (triangles), 13 (circles) days に対する分布を表す。実線はそれらに対応するシミュレーションによる結果である。

## 【参考文献】

- [1] J. Yamanaka et al., J. Am. Chem. Soc. **126**, 7156 (2004).
- [2] A. Toyotama et al., J. Am. Chem. Soc. **129**, 3044 (2007).
- [3] A. Toyotama et al., Langmuir, **25**, 589 (2009).
- [4] M. Raša, A. P. Philipse, Nature **429**, 857 (2004).
- [5] M. Robbins, K. Kremer, and G. S. Grest, J. Chem. Phys. **88**, 3286 (1988).
- [6] R. van Roij, M. Dijkstra, and J.-P. Hansen, Phys. Rev. E **59**, 2010 (1999).