

反対電荷をもったコロイド粒子のクラスター形成

名古屋市立大学 増田竜大、小田井香奈、奥蘭 透、豊玉彰子、山中淳平

【はじめに】近年、コロイド粒子系におけるクラスター（有限個粒子の自己集合体）の形成あるいは凝集に関する研究が盛んに行われている。その主な理由は、コロイド粒子間の相互作用を制御する実験技術の向上により様々なタイプのクラスターを作ることが可能になったこと、またそのことにより機能性物質の創製を目指したコロイド粒子による（クラスターを分子と見立てた）「分子設計」に対する化学的興味によるものである。物理学的な観点からは、例えば、ゲル化やガラス化のような多数の粒子あるいはクラスターからなる系の示すマクロな物性の変化や、自己推進する（アクティブな）粒子の集団運動およびそれによって形成されるダイナミックなクラスターに関する研究が活発に行われている。

クラスターの構造に関するこれまでの研究では、1成分の粒子系に関するものが多く、ヘテロな系あるいは多成分の粒子系での系統的な研究はほとんど行われていない。そこで本研究では、正と負の2種類の電荷をもつ2成分荷電コロイドにおけるクラスターをターゲットとし、簡単なYukawa型の2体間ポテンシャルをもつ粒子系のブラウンアンダイナミクスによる数値シミュレーションを行い、クラスターの構造およびダイナミクスに関する考察を行う。この系では、例えば負電荷を持った粒子の周りに正電荷を持った粒子が過剰に会合する傾向があり、全体として正電荷を持ったクラスターが形成される。そのため、系全体として安定なクラスターを含む「クラスター相」が実現されると考えられる。

【結果と考察】今回は、粒子の体積分率 ϕ が小さく（ $\phi \sim 10^{-3}$ ）かつ負電荷をもつ粒子（以下マイナス粒子）数と正電荷をもつ粒子（以下プラス粒子）数の比が小さな条件下でシミュレーションを行った。おもなパラメータはマイナス粒子とプラス粒子の粒径比 R および電荷数比 Q である（今回は R, Q ともに整数の場合に限定した）。これらのパラメータに対し、定常状態でのマイナス粒子の周りに会合するプラス粒子数 n を調べた。

その結果、 Q が小さな領域では、 R にかかわらず、ほぼ $n = Q + 1$ の関係が成り立っていることがわかった。このことは、中性のクラスター（ $n = Q$ ）は安定ではなく、プラス粒子によってクラスターに双極子が誘起され、それによる引力が生じ、 $n = Q + 1$ で安定化されることを示唆している。

Q が大きくなると幾何学的な制約により、プラス粒子の多重層が形成される。 $R = 1$ の場合には、1層の最大会合数は $n = 12$ であり、正20面体構造をとる。2層目は正12面体構造、3層目は正20面体構造をとることが多いがマイナス粒子との距離が大きくなるため、揺らぎが大きくなる。しかしながら、このような規則構造の形成は、応用上有益な知見であると思われる。