

分散コロイド粒子の基板近傍における層構造化のメカニズムの検討

(京都大学大学院工学研究科) 天野 健一、石原 平、西 直哉、作花 哲夫

【はじめに】

コロイド粒子を結晶のように整列させたものをコロイド結晶と呼ぶ。コロイド結晶は次世代の太陽電池や光源として注目されている量子ドットや、光ファイバーや光学材料として注目されているフォトニック結晶の材料となる。コロイド結晶が生成される際、任意の基板またはコロイド結晶自身の表面近傍において、分散コロイド粒子は層構造化している。コロイド分散系には塩や高分子電解質の濃度、コロイド粒子の粒径や表面電位など様々な条件設定が出来るが、どのような時にどのようなメカニズムで層構造化が起きるのか分かれば、上記の材料開発において役立つと考えられる。そこで、本研究では実験（コロイドプローブ原子間力顕微鏡）と理論（液体の統計力学）を組み合わせた我々の新規分析手法^(1,2)を用いて、基板近傍における分散コロイド粒子の層構造とその形成メカニズムについて研究した。コロイド分散系は分子動力学シミュレーションで研究するには粒径や高分子電解質のサイズがあまりにも大きすぎる。また、粗視化シミュレーションでは経験的なポテンシャルやパラメーターを導入する必要があるため、得られた結果の妥当性の判断に難しさがある。このため本研究では実験と理論を組み合わせる手法で研究した。

【結果と考察】

コロイドプローブ原子間力顕微鏡によって、コロイド分散系中におけるコロイドプローブと基板間のフォースカーブ⁽³⁾が M. Piech と J. Y. Walz によって測定されている。我々はそのフォースカーブを、コロイドプローブと基板間の二体間フォースとコロイド粒子らによって誘起されたフォースに分割した。そして、我々の分析手法を用いて後者のフォースカーブを基板近傍のコロイド粒子らの数密度分布に変換した。その結果、バルクにおけるコロイド粒子の数密度や体積分率が高いほど基板近傍で層構造化が起きやすい事が分かった。また、コロイド粒子の表面電位 (ζ 電位) の絶対値が大きいほど、基板近傍における層構造化が顕著になる事が判明した。これは、バルクにおいてコロイド粒子同士が強く反発し合った結果、一部のコロイド粒子が基板近傍に追いやられたためと考えられる。言い換えると、基板近傍で層構造化が強くなると、そこにいるコロイド粒子間の反発も大きくエネルギー的に損失となるが、バルクにおける反発のエネルギー損失を抑えた方が系全体としては安定となるため上記の挙動が得られたと考えられる。分析結果の妥当性の判断のため、純粋な理論計算による検証計算も行ったので、発表ではその結果についても紹介する。

【参考文献】

- (1) K. Amano et al., *Phys. Chem. Chem. Phys.* **18** (2016) 15534.
- (2) K. Amano et al., *Langmuir* **32** (2016) 11063.
- (3) M. Piech and J. Y. Walz, *J. Colloid Interface Sci.* **253** (2002) 117.