

コロイドエピタキシーにおける重力テンパリングによる欠陥の低減化のモンテカルロシミュレーション

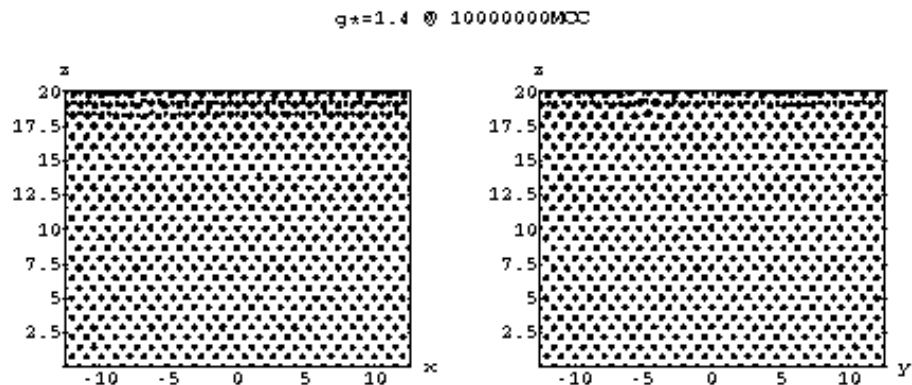
(^A徳島大院ソシオテクノ、^B富山大院工) 森篤史^A、鈴木良尚^A、松尾繁樹^A、伊藤研策^B

【はじめに】

アルダー転移の発見は、1957年まで遡る^(1,2)。コロイド結晶がアルダー転移の実験的実現だとして注目された時期もあるが、現在では、フォトニック結晶としてのコロイド結晶の研究が盛んである。コロイド結晶をフォトニック結晶として用いる場合、欠陥の低減が課題である。1997年のパイオニア的な研究^(3,4)を受け、我々は重力下の剛体球結晶中の欠陥の低減についてモンテカルロシミュレーション⁽⁵⁻⁹⁾を実施して来た。文献(9)では、一旦大きな重力で結晶を大きく成長させた後に、モデレートな重力に戻して“熱処理”を行う「重力テンパリング」の可能性を指摘した。今回は、この論文の結果の一部を示すとともに、重力テンパリングのシミュレーションのプレリミナリーな結果を発表する。

【結果と考察】

文献(7)では、重力数 $g^* = mgs/k_B T$ を段階的に制御する方法で、正方格子基板上に剛体球結晶を成長させた。文献(8)では、



最初から一定の重力数の重力を印加した。文献(9)では、特に $g^* = 1.4$ と 1.6 の場合に注目し、 $g^* = 1.6$ においては、結晶中に欠陥が存在するが、 $g^* = 1.4$ においては、ほぼ無欠陥の結晶が得られることを指摘した(図)。これは、重力テンパリングによって完全結晶が得られる可能性を示している。実際に $g^* = 1.6$ から一時的に $g^* = 1.4$ に戻して欠陥を低減させるシミュレーションについては、当日報告する予定である。他の g^* 制御についても実行予定である。

【参考文献】

- (1) W. W. Wood and J. D. Jacobson, J. Chem. Phys. **27** (1957) 1207.
- (2) B. J. Alder and T. E. Wainwright, J. Chem. Phys. **27** (1957) 1208.
- (3) J. Zhu *et al.*, Nature **387** (1997) 883.
- (4) A. van Blaaderen *et al.*, Nature **385** (1997) 321.
- (5) A. Mori *et al.*, J. Chem. Phys. **124** (2006) 174507.
- (6) A. Mori *et al.*, Mol. Phys. **106** (2007) 187.
- (7) A. Mori, J. Cryst. Growth **318** (2011) 66.
- (8) A. Mori *et al.*, World. J. Eng. **9** (2012) 37.
- (9) A. Mori *et al.*, Chem. Lett. **41** (2012), in press; <http://arxiv.org/abs/1207.0857>.