

Smoothed Profile法による荷電コロイド粒子の 電気泳動シミュレーション

JST&京大工 金 鋼 (Kang Kim)¹

JST & Dept. of Engineering, Kyoto Univ.

九大工 名嘉山 祥也 (Yasuya Nakayama)

Dept. of Engineering, Kyushu Univ.

京大工 山本 量一 (Ryoichi Yamamoto)

Dept. of Engineering, Kyoto Univ.

荷電コロイド分散系では溶媒中を運動する溶媒分子やイオンの空間・時間スケールはコロイド粒子におけるそれらより何桁も小さく、スケールの異なる階層構造が存在しており、時として二つの自由度が絡み合って複雑な現象が生み出される。このようなマルチスケールの階層性が計算機シミュレーションによる解析を困難にしている最大の要因であると言え、そこでこの問題を克服するために Smoothed Profile(SP) 法というこれまでにないまったく新しいシミュレーション方法の開発を行っている [1-6]。SP法ではコロイドに対しては粒子描像でそのまま扱う一方でイオンに関してはその速い自由度を完全に消去するのではなく、連続体として粗視化されたメソスケールの密度場として与え適切な密度汎関数を通じて物理的に正しく考慮する。また通常は階段関数によって表現されるコロイド粒子表面と溶媒の界面を、滑らかな界面関数を用いて固定直交格子上で表わすことで、計算機上で取り扱いやすい形式を与える。このように粒子描像と連続体描像を併用することで、両者の自由度とそれらのあいだの相互作用を物理的に正しく記述しマルチスケールにまたがる複雑な現象を解析していくことを大きな特徴としてもっている。

特に荷電コロイドの電気泳動のような界面動電現象においては、粒子とイオン分布の挙動は流体力学相互作用と静電相互作用の競合によって決定されるが、SP法によるシミュレーションでは粒子(運動方程式)・イオン分布(移流拡散方程式)・溶媒流動場(Navier-Stokes方程式)の3つの自由度を同時に時間発展させており、荷電コロイド分散系における電気泳動過程を正しくシミュレートすることができる(Fig. 1 左)。SP法による電気泳動シミュレーションの定量的な妥当性を検討するために、電気泳動度とゼータ電位の関係について O'Brien-White による解析結果と比較すると、シミュレーション結果は非常に良く解析結果を再現できることを確認している。さらに多粒子コロイド分散系への適用が容易なことから(Fig. 1 右)、多体効果・流体効果・静電効果を考慮したシミュレーションを実現することができ、荷電コロイド粒子の電気泳動現象についてこれまでの理論では予言不可能な現象について議論できると期待している [6]。

¹E-mail: kin@cheme.kyoto-u.ac.jp

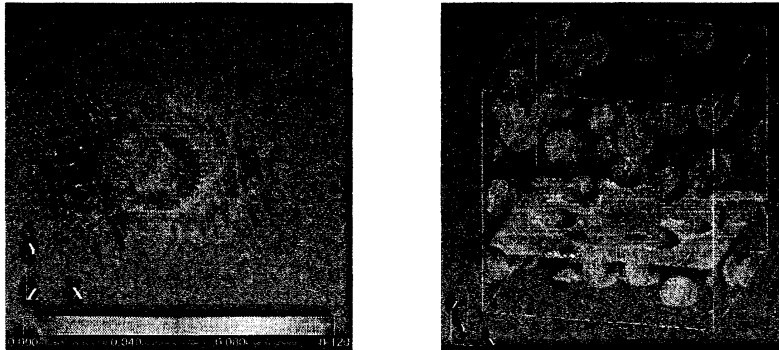


Fig. 1: (左) $+x$ 方向に印加された外部電場によって電気泳動する荷電コロイド粒子の様子。濃淡は電荷密度分布を、矢印は溶媒速度場をあらわす。(右) 32 個のコロイド粒子が電気泳動する様子。

参考文献

- [1] R. Yamamoto, Phys. Rev. Lett. **87**, 075502 (2001).
- [2] R. Yamamoto, Y. Nakayama and K. Kim, J. Phys.: Condens. Matt. **16**, S1945 (2004).
- [3] K. Kim and R. Yamamoto, Macromol. Theory Simul. **14**, 278 (2005).
- [4] Y. Nakayama and R. Yamamoto, Phys. Rev. E. **71**, 036707 (2005).
- [5] Y. Nakayama, K. Kim and R. Yamamoto, cond-mat/0601322.
- [6] K. Kim, Y. Nakayama and R. Yamamoto, cond-mat/0601534.