コロイド分散系のシミュレーション

荒木 武昭

コロイド分散系の動的挙動は、流動特性、凝集過程、沈降過程など、その基礎的な重要性に加え、実用的にもきわめて重要な問題を含むため、これまでさまざまな面から精力的に研究がなされてきた。この系を扱う際、コロイド粒子に働く力として、直接的な粒子間相互作用のほかに、分散媒を介した長距離に及ぶ流体力学的相互作用を考慮しなければならない。この流体相互作用は本質的に動的な多体的効果であるため、理論的な取り扱いが極めて難しく、数値シミュレーションに大きな期待がかかり広く研究が行われている。しかしながら、計算機の著しい発達に加え、多くの研究者によりさまざまな計算モデルや近似補正が提案されてはきたものの、コロイド系の動的挙動、とくに流体力学的効果に関して未解明の問題が多く残されているのが現状である。

従来の計算手法におけるもっとも大きな困難のひとつは、粒子界面における固体-液体境界条件の扱いである。そこで、筆者らは固体であるコロイド粒子を高い粘性をもつ変形しない液体粒子として扱い、分散媒との粘度比が無限大になった極限がコロイド分散系に対応するという考えに立ち、「流体粒子ダイナミクス法—fluid particle dynamics (FPD)—」を考案した¹⁾。この手法は、流れ場は通常の流体計算と同様に、空間を正方格子、またはスタガード格子状に分割し差分法を用いて時間発展させ (on-lattice)、また、粒子の運動に対しては分子動力学法のように連続空間上で解く (off-lattice) という hybrid 方式をとっている。具体的には、ある時刻のコロイド粒子の配置から、コロイドを有限の厚さの界面をもつ濃度場で記述することで、系全体を連続的な流体とみなす。その濃度と比例した非一様な粘度をもつこの流体について、Navier-Stokes 方程式を解き、流れ場を時間発展させる。その流れ場を個々の粒子に対して平均化し、粒子の速度を求め新たな粒子配置を計算する。

図1は、この手法を用いたコロイド粒子の凝集過程の様子である。流体相互作用をあらわに扱わない Brown 動力学法などによる数値シミュレーションでは、同じ粒子濃度、粒子間ポテンシャルを用いた場合、粒子はクラスター状に凝集し発展する。一方、流体相互作用を取り入れたこの手法では、粒子間に働く流体力学的効果によって、粒子は直線的な鎖状に凝集する傾向が生じ、それがつながることで、粒子濃度が低くても系はネットワーク構造を形成す

図1 FPD法によるコロイド分散系の凝集過程に関する数値シミュレーション
 t は粒子間相互作用と同程度の力が粒子に働いた場合、粒子径だけ移動するのにかかる時間によって規格化した換算時刻である。

るようになる。このネットワーク構造が系全体の過渡的なゲル状態を形成し、それが高分子系などで見られる粘弾性相分離現象と本質的に同じ現象を表現しているものと筆者らは考えている²⁾。

また、シミュレーション法としての拡張性の高さは、FPD法の大きな特徴であると考えている。たとえば、この手法では、粒子の重心運動だけでなく、回転運動も自動的に計算されるため、コロイド系のレオロジーや沈降現象などに関する数値シミュレーションを容易に行うことができる。また、連続体として表した分散媒にイオン濃度やネマチック液晶配向場の自由度を新たに導入することで荷電コロイド分散系や最近注目されている液晶に分散したコロイド粒子のダイナミクスを研究することもでき、現在その方向での研究も進めている³⁾。今後、この手法が広くさまざまな問題に応用され、コロイド分散系の動的挙動の基礎理解、ひいては実用的な問題にも役立つことを期待している。

この研究は、東京大学生産技術研究所の田中 肇教授と共同で行ったものである。

文 献

- 1) H. Tanaka, T. Araki: *Phys. Rev. Lett.*, **85**, 1338 (2000)
- 2) H. Tanaka: *J. Phys.: Condens. Matter*, **12**, R207 (2003); 田中肇; 高分子, **52**, 572 (2003)
- 3) H. Kodama, K. Takeshita, T. Araki, H. Tanaka: *J. Phys.: Condens. Matter*, **16**, L115 (2004)