キューブ状ヘマタイト粒子分散系における凝集形態の転移に関する
2次元モンテカルロ・シミュレーション佐藤 明^{*1}, 岡田 和也^{*2}

Two-dimensional Monte Carlo simulations on transition of aggregate structures of a suspension composed of cubic hematite particles

Akira SATOH^{*1} and Kazuya OKADA^{*2}^{*1} Faculty of Systems Science and Technology, Akita Prefectural University
84-4 Ebinokuchi, Tsuchiya-aza, Yuri-honjo-shi, Akita 015-0055, Japan^{*2} Department of Machine Intelligence and Systems Engineering, Akita Prefectural University
84-4 Ebinokuchi, Tsuchiya-aza, Yuri-honjo-shi, Akita 015-0055, Japan

Received 1 September 2015

Abstract

We have investigated transition of aggregate structures of a suspension composed of cubic hematite particles in the situation of thermodynamic equilibrium. Monte Carlo simulations have been carried out in order to investigate the dependence of the transition of aggregate structures on the magnetic field strength for various cases of the magnetic particle-particle interaction strength. From the viewpoint of applying a magnetic particle suspension to a surface changing technology, we here consider a two-dimensional system of the cubic hematite particles. Radial distribution functions and order parameters are used for quantitatively discussing in the present results. The main results obtained here are summarized as follows. The cluster formation of magnetic particles significantly appears for a strong magnetic interaction larger than a certain value. In a weak applied magnetic field, the particles tend to aggregate to form thin chain-like clusters if the magnetic particle-particle interaction is relatively small. If the magnetic field is increased, these thin chain-like clusters become thick chain-like clusters. In no external magnetic field, the particles tend to aggregate to form clusters that have large grid-like structures if the magnetic particle-particle interaction is sufficiently large. If the magnetic field is increased, these clusters become thicker chain-like clusters with these grid-like structures. This clearly implies that an applied magnetic field induces the transition of aggregate structures in a cubic hematite particle suspension.

Key words : Cubic hematite particle, Aggregation phenomenon, Aggregate structure, Monte carlo method, Cluster formation, Radial distribution function, Order parameter

1. 緒 言

一般的な形状の磁性ミクロ・ナノ粒子は、機械工学の分野に限らず、あらゆる学際領域において、応用が期待されている。近年では、医用工学への応用の研究として、高機能化した薬剤入りの磁性複合粒子をガン細胞部に磁場により誘導し集中的に投薬する drug delivery system への応用 (Häfeli et al., 1997) や、交流磁場の作用下での磁性粒子の運動により発生する熱を用いて癌腫瘍を死滅させる温熱療法に関する研究も盛んに行われている (Narayan, 2009)。流体工学分野で従来から行われてきた磁気粘性流体の基礎研究ならびに応用研究も引き続き活発に行われている (Wereley, 2013)。流体工学分野における応用で主に着目される特性は磁気粘性効果であり、その流体的な特性を制御するのが機械工学分野での研究の主たる対象である。一方、前述の医用工学への応用は磁性粒子の高次機能性付加の材料科学的な研究や磁場による磁性粒子の運動制御などの研究が対象とするものである。さらには、界面科学の分野では、材料表面に磁性粒子を所望の特性を発揮するように配向付着させる配向制

No.15-00484 [DOI: 10.1299/transjsme.15-00484], J-STAGE Advance Publication date : 29 October, 2015

^{*1} 正員, 秋田県立大学 システム科学技術学部 (〒015-0055 秋田県由利本荘市土谷字海老ノ口 84-4)^{*2} 学生員, 秋田県立大学 システム科学技術学部
E-mail of corresponding author: asatoh@akita-pu.ac.jp

御技術の構築を見据えた基礎研究も推進されている（作田, 佐藤, 2010）. 以上の例からわかるように, 磁性粒子サスペンションの応用は, 機械工学と他分野の学際領域において大きく展開される現況に至っている.

従来行われてきた研究対象の磁性粒子サスペンションは, 磁性流体に代表されるように, 球状磁性粒子を母液に懸濁したコロイド分散系を対象とするものが主であった（Yamaguchi et al., 2011）. しかしながら, 微粒子の調製法の技術開発の進展に伴い, 現在では, 様々な幾何学形状や磁性特性を有する磁性粒子の創製（Matijevic and Scheiner, 1978, Ozaki et al., 1984, Sugimoto et al., 1998, Aoshima et al., 2012）が可能となり, 例えば, 棒状粒子, 扁平粒子, キューブ状粒子などの分散系の調製が可能となっている. 従って, 従来の機械工学的な研究に加えて, 前述の学際領域での応用展開を見据えたさらなる基礎および応用研究の進展が期待されているところである.

以上の研究背景より, 本研究では, 対角方向に磁化されたキューブ状ヘマタイト粒子（Aoshima et al., 2012）から構成される分散系を対象に, 粒子間の磁気的な相互作用の大きさと印加磁場の強さを変化させ, 粒子の凝集構造の形態の転移現象を明らかにすることを目的とする. ここでは, 材料の表面特性を磁性粒子の付着配向により改質する表面改質技術への応用を念頭に置き, 2次元系を対象とする. このような磁性粒子分散系が熱力学的平衡状態にあるとして, 磁場中で生じる粒子の凝集構造に関して, 熱力学的平衡状態を検討するのに最適なモンテカルロ法を用いたシミュレーションを用いて詳細に検討する. 具体的には, 粒子が十分大きく重力によって沈降し立方体の一面が底面に接しているとの仮定の下で, 粒子は重力方向に垂直な2次元平面内でのみ並進と回転の運動を行うという制限された運動（凝集現象）を取り扱うことになる. このため, 図1 (a) のような磁気モーメントが上向き斜め方向の粒子と図1 (b) のような磁気モーメントが下向き斜め方向の粒子が, 等しい数で分散された系を対象とする. 凝集構造の定性的な検討のためにスナップショットを, 定量的な検討のために秩序パラメータや動径分布関数に着目して, 凝集形態の転移に及ぼす諸々の要因の影響を解明することを試みる.

2. 粒子モデル

本研究ではシミュレーションのために, キューブ状ヘマタイト粒子（Aoshima et al., 2012）として, 粒子中心に対角方向を向く磁気モーメント $\mathbf{m}$ を有する一辺 d のキューブ状粒子モデルを採用する. 母液に懸濁した粒子まわりには, 通常電気2重層や界面活性剤層による斥力層で被覆され, 安定な分散系が得られるように調製されている. しかしながら, これらの斥力層の重なりにより生じる粒子間相互作用のエネルギーや力の式が現段階では得られていないので, 本研究では, 粒子はこのような斥力層で被覆されていないと仮定する. なお, このような取り扱いはモンテカルロ法では可能であるが, 粒子の動力学的な挙動を問題とする分子動力学法やブラウン動力学法では, 粒子間斥力の式が既知でないとシミュレーションは不可能である. さらに, 被覆層（非常に薄い）がないとする粒子モデルを用いても, 物理的な特徴の本質を把握することは十分可能である. 以上の観点から, 本粒子モデルを用いたモンテカルロ・シミュレーションによる検討は, 動力学的な特性解明への研究展開を計る上で, 貴重な第一歩の研究であると言えることができる.

粒子 j に対する粒子 i の相対位置ベクトルを $\mathbf{r}_{ij}$, 粒子 i の磁気モーメントを $\mathbf{m}_i$ とすると, 粒子 i と j との磁気的な相互作用のエネルギー $u_{ij}^{(m)}$ と, 粒子 i と一様な印加磁場 $\mathbf{H}$ ($H=|\mathbf{H}|$) との相互作用のエネルギー $u_i^{(H)}$ は, それぞれ次のようになる（Satoh, 2010）.

Fig.1 Particle model with two types of magnetic moment direction: (a) upward diagonal direction and (b) downward diagonal direction.

$$u_{ij}^{(m)} = kT \lambda / r_{ij}^3 \{ \mathbf{n}_i \cdot \mathbf{n}_j - 3(\mathbf{n}_i \cdot \mathbf{t}_{ij})(\mathbf{n}_j \cdot \mathbf{t}_{ij}) \} \quad (1)$$

$$u_i^{(H)} = -kT \zeta \mathbf{n}_i \cdot \mathbf{H} / H \quad (2)$$

ここに、 $\mathbf{n}_i, \mathbf{t}_{ij}$ は単位ベクトルであり、 $\mathbf{n}_i = \mathbf{m}_i / m$, $\mathbf{t}_{ij} = \mathbf{r}_{ij} / r_{ij}$, $m = |\mathbf{m}_i|$, $r_{ij} = |\mathbf{r}_{ij}|$ である。また、 λ は粒子間の磁気的な相互作用の大きさ、 ζ は粒子と印加磁場との相互作用の大きさを表す無次元パラメータであり、それぞれ $\lambda = \mu_0 m^2 / (4\pi d^3 kT)$, $\zeta = \mu_0 m H / (kT)$ である。ここに、 k はボルツマン定数、 T は液温であり、 μ_0 は真空の透磁率である。

3. モンテカルロ法

粒子間相互作用が非常に強い系の場合には、一度結合した粒子同士はほとんど解離しなくなるので、系の平衡状態への収束が非常に緩慢となり、物理的に妥当な結果を得ることができない。シミュレーションの進行過程で生じたクラスタをあたかも単一の粒子のごとく移動させるステップを導入することで、収束を加速させる方法が cluster-moving モンテカルロ法である (Sato, 2003)。本研究ではこの cluster-moving モンテカルロ法を採用した。クラスタを構成している粒子は2次元平面内でのみ並進と回転の運動を行うものとしているが、クラスタの運動は並進運動のみを行い、回転運動は考えないものとする。これはクラスタの回転移動が物理的にあり得ない粒子の重なりを発生させる可能性があるためである。並進移動の場合にはそのような粒子同士の重なりを発生させることはない。本方法のアルゴリズムの主要部分を示すと次のようになる。

- a. クラスタの形成を調べる
- b. クラスタを1つ選ぶ
- c. 選択したクラスタと相互作用するクラスタとの間の相互作用のエネルギー U^{old} を計算する
- d. そのクラスタを新しい位置にランダムに移動させ、相互作用のエネルギー U^{new} を計算する
- e. もしエネルギーの変化量 $\Delta U = (U^{new} - U^{old})$ が $\Delta U < 0$ ならクラスタの移動を採用しステップ b から繰り返す
- f. もしエネルギー $\Delta U \geq 0$ なら、一様乱数列から乱数 R ($0 < R < 1$) を取り出し
 - f1. $\exp(-\Delta U / kT) \geq R$ なら、クラスタの移動を作用し、ステップ b から繰り返す
 - f2. $\exp(-\Delta U / kT) < R$ なら、クラスタを元の位置に戻し、ステップ b から繰り返す

4. 秩序パラメータ

系全体の秩序性の定量的な評価を行うために、磁気モーメントの方向に関する秩序パラメータを用いる。本研究で用いた秩序パラメータ $S_1^{(m)}$ と $S_2^{(m)}$ は以下のように定義される。

$$S_1^{(m)} = \frac{1}{N_{pair}} \left\langle \sum_{i=1}^N \sum_{j=1, (j>i)}^N P_2(\cos \psi_{ij}^{(p)}) \right\rangle_{time}, \quad S_2^{(m)} = \frac{1}{N_{pair}} \left\langle \sum_{i=1}^N \sum_{j=1, (j>i)}^N \cos(4\theta_{ij}^{(p)}) \right\rangle_{time} \quad (3)$$

ここに、 $P_2(-)$ はルジャンドルの陪多項式であり、 $P_2(\cos \psi_{ij}^{(p)}) = (3 \cos^2 \psi_{ij}^{(p)} - 1) / 2$, $\psi_{ij}^{(p)}$ は粒子 i, j の磁気モーメントのなす角度、 $\theta_{ij}^{(p)}$ は粒子 i, j の磁気モーメントを底面に投影したときのそれら磁気モーメント方向のなす角度、 N_{pair} は対象となる粒子の組み合わせの数であり、 $N_{pair} = N(N-1)/2$ となる。また、 $\langle \rangle_{time}$ は時間平均である。

5. 結果と考察

特に断らない限り、次のようなパラメータの値を設定してシミュレーションを実行した。粒子の体積分率 ϕ_V を $\phi_V = 0.1$ 、粒子数 N を $N = 400$ 、粒子間相互作用のエネルギーのカットオフ距離を $r_{cutoff}^* (= r_{cutoff} / d) = 10$ 、無次元パラメータは $\zeta = 0 \sim 20$, $\lambda = 0 \sim 10$ と設定した。さらに、予備計算より、総モンテカルロ・ステップ数 N_{simplx} は $N_{simplx} = 5,000,000$ とした。また、図 1 (a) のような磁気モーメントが斜め上向きの粒子と図 1 (b) のような磁気モーメントが斜め下向きの粒子の数は同数に配置した。スナップショットの図においては、赤色 (濃い色) の粒子は前者の粒子、

緑色（薄い色）の粒子は後者の粒子を意味する．初期状態において，これら2種類の粒子の初期配置は乱数を用いてランダムに配置しており，境界条件は全方向で周期境界条件を採用した．また，磁場が作用する方向は重力方向に垂直な2次元平面に沿って作用するものとする．以下に示す結果は，以上のように値を取って得られたものである．結果の定量的な評価を行うために，式(3)に示した粒子の磁気モーメントの方向に関する秩序パラメータ $S_1^{(m)}$ と $S_2^{(m)}$ に着目する (Sato, 2014) ．

まず， $\xi=0$ の磁場が作用しない場合の結果について検討する．図2は外部磁場が作用しない場合の凝集構造のスナップショットであり，図2(a)は粒子間相互作用が $\lambda=4$ ，図2(b)は $\lambda=7$ ，図2(c)は $\lambda=10$ の場合の結果である．また，図3は動径分布関数の結果，図4は，式(3)に示した粒子の磁気モーメントの方向に関する系の秩序パラメータ $S_2^{(m)}$ の結果である．なお，大きな格子構造を取るとき，系は秩序パラメータ $S_2^{(m)}$ が大きな値を示すことになる．図2(a)の $\lambda=4$ のように，粒子間の磁気的な相互作用が小さい場合，粒子の磁気モーメントは不規則な方向を向き凝集体は形成されていない．図2(b)の $\lambda=7$ の場合，比較的長い鎖状クラスタが存在している．しかしながら，このクラスタは崩壊・形成を繰り返す不安定なものであるため，さらに大きく成長することはない．図2(c)の $\lambda=10$ のように磁気的な相互作用が十分大きい場合，大きな格子構造が見られる．これは，粒子間の磁気的な相互作用が強くなることで，粒子あるいは小さなクラスタ同士の結合が促進されるためクラスタが成長し，格子構造を有する大きな凝集体を形成するためである．この凝集体の内部構造を注意深く観察すると，例えば磁気モーメントが斜め上方向を向いた粒子まわりには，側面が接触する4カ所の位置に，斜め下方向の粒子が配置していることがわかる．このような配置が最もエネルギー的に有利（低い）である配置となることが，式(1)の相互作用のエネルギーの式を用いた解析より示すことができるが，ここではこのような証明は省略することにする．次に図3に示す動径分布関数について論じる． $\lambda=4$ の場合は顕著なピークを有しておらず，気体的な特徴を示しており，粒子は凝集構造を形成せず単独で存在することを示している． $\lambda=7$ の場合は $\lambda=4$ の場合に比べ最近接粒子間距離に相当する第1ピークが $r^* (=r/d) = 1$ 付近で鋭くなっていることがわかる．また，小さな第2ピークが $r^*=2.3$ 付近に見られる．第2ピークよりも長距離側には目立ったピークは存在せず，関数の値は1に収束する．これは，大きな格子構造を持たない小さな鎖状クラスタが存在することを示している． $\lambda=10$ のように磁気的な相互作用の影響が支配的になると，最近接粒子間距離に相当する大きな第1ピークが $r^*=1$ 付近に生じる．第2ピークの位置は第1ピークの $\sqrt{2}$ 倍に近く，第3ピークの位置は第1ピークの2倍に近く，第4ピークは第1ピークの $\sqrt{5}$ 倍の距離に相当する．第2ピーク以後の顕著なピーク値の存在は正方格子構造を取り得る範囲の拡大を意味しており，このことから格子構造を有する大きな凝集体の形成が裏付けられる．図4に示す磁気モーメントに関する秩序パラメータの特徴は凝集構造の大きな変化すなわち内部構造の形態転移の存在を示している．すなわち，粒子間の磁気的な相互作用が小さい $\lambda=5$ 程度までは，秩序パラメータの値はほぼゼロの値を示し

Fig.2 Aggregate structures for no applied magnetic field: (a) $\lambda=4$; (b) $\lambda=7$; (c) $\lambda=10$. For the case of $\lambda=4$, particles do not significantly aggregate to form clusters. In contrast, for the case of $\lambda=10$, aggregates with crystal-like structures are formed.

Fig.3 Radial distribution functions for no applied magnetic field. As the magnetic particle-particle interaction strength is increased, the first peak significantly increases and for the case of $\lambda=10$, there appear several high peaks in a weak solid-like manner.

Fig.4 Order parameter of magnetic moment direction as a function of magnetic interaction strength. The curve exhibits almost zero until approximately $\lambda=5$ and steeply increases since approximately $\lambda=7.5$.

ており、粒子は全く凝集しないことを示している。秩序パラメータの値は $\lambda=7$ 付近で徐々に増加するので、この値付近で粒子は凝集しクラスタを形成し出すことを示している。また、 $\lambda=7.6$ 付近で秩序パラメータが急激に増加し、 $\lambda=8$ 付近で非常に大きな値に到達するに至る。このことは、図2 (a) もしくは図2 (b) のような状態から、図2 (c) のような大きな格子構造を有する内部構造へと形態が転移することを定量的に示唆しているものである。粒子の運動は立方体の下面を底面に接触させ運動するという2次元的に拘束された運動をするので、粒子同士は互いに平行な面と面で接触するという、非常に秩序を増加させる凝集構造となる。そのため、図2 (c) のような格子構造へ遷移する場合には、粒子間の磁気的な相互作用が非常に狭い範囲で秩序パラメータが急激に増加したと推測される。

次に粒子間の磁気的な粒子間相互作用が比較的弱い $\lambda=7$ で固定して、磁場を変化させた場合について検討する。磁場は2次元平面に沿った方向に印加されている。図5は磁気的な粒子間相互作用を $\lambda=7$ で固定し磁場の強さを増加した場合の凝集構造のスナップショットであり、図5 (a) は磁場の強さが $\xi=5$ 、図5 (b) は $\xi=20$ の場合の結果である。さらに、図6は動径分布関数の結果であり、図7は式(3)に示した粒子の磁気モーメントに関する系の秩序パラメータ $S_1^{(m)}$ の結果である。図7においては参考までに $\lambda=0, 10$ の結果も示してある。なお、本印加磁場の環境下では、粒子が凝集して形成された各クラスタ内の構成粒子の磁気モーメントに関して、その方向性の秩序が大きくなるほど、系の秩序パラメータの値が大きくなることになる。図5 (a) の $\xi=5$ の場合、図2 (b) のような崩壊・形成を繰り返す数個の粒子からなる小さなクラスタはあまり形成されず、粒子の磁気モーメントが磁場方向を向いた細い鎖状クラスタを形成していることがわかる。図5 (b) の $\xi=20$ の場合、 $\xi=5$ の場合よりも格子構造を持つ太い鎖状クラスタが磁場方向に形成していることがわかる。これは、磁場の影響によって粒子の磁気モーメントが磁場方向に拘束されたことにより粒子同士が面と面で接近したクラスタを構成しやすくなるためである。粒子同士が最近接粒子間距離の面と面で接近すると、粒子間の磁気的な相互作用が比較的小さな場合でも安定した細く長い鎖状クラスタが形成される。この細く長い鎖状クラスタが太い鎖状クラスタに成長し、それがさらに単独で存在する粒子を吸収することにより格子構造を有するさらに太い鎖状クラスタを形成するに至ったものと考えられる。次に図6に示す動径分布関数について論じる。図3に示した印加磁場の影響が $\xi=0$ のときに比べ、 ξ の値が大きくなるほど関数の値は全体的に大きくなっており、 $r^*=\sqrt{5}$ のピーク値も大きくなっている。これは、磁場の影響が強くなるにつれて、格子構造を有する大きなクラスタが形成されていることを意味している。換言すると、数個の粒子からなる格子構造をもたない小さなクラスタから、格子構造を有する太い鎖状クラスタへの凝集構造の形態転移が、磁場の増加によって生じていると言うことができる。図7の秩序パラメータの結果は、凝集体の内部構造の変化を明確に示しており、参考として示した $\lambda=0$ および $\lambda=10$ の結果も用いて考察してみる。 $\lambda=0$ のときには、磁場の影響が大きくなるにつれて、秩序パラメータの値が緩やかに大きくなっていることがわかる。これは、単独で存在する粒子が磁場の影響により磁場方向に配向することから秩序パラメータ

の値が大きくなるためである。 $\lambda=7$ のときには、 $\lambda=0$ のときと同様に磁場の影響が大きくなるにつれて、秩序パラメータの値が増加していく。しかしながら、 $\lambda=0$ のときと大きく異なる点は、 $\lambda=7$ の場合の曲線が磁場の増加とともに $\lambda=10$ の場合の曲線にかなり近づくようになり、 $\xi=20$ においてはかなり一致するようになる点である。一方 $\lambda=0$ の場合の曲線はほぼ収束しているように見えるが、 $\lambda=10$ の場合の $\xi=20$ のときの値に比べて小さな値で収束している。この $\lambda=7$ の場合の曲線の特徴は、磁場の影響により磁場方向に配向する太い鎖状クラスターが安定的に存在するため、磁気モーメント間の相互作用が磁場方向への配向特性を促進し、粒子が単独で存在するときに比べて粒子の磁気モーメントの秩序性が大きくなるためと考えられる。

Fig.5 Aggregate structures for the magnetic interaction strength $\lambda=7$: (a) $\xi=5$; (b) $\xi=20$. As the magnetic field is increased, thin chain-like clusters aggregate to form thick chain-like clusters.

Fig.6 Radial distribution functions for the magnetic interaction strength $\lambda=7$. As the magnetic field is increased, the curves exhibit a liquid-like characteristic.

Fig.7 Order parameter of magnetic moment directions as a function of magnetic field strength. For the cases of $\lambda=0$ and 7 , the curves gradually increase, whereas for the case of $\lambda=10$, the curve steeply increases since approximately $\xi=2$.

最後に粒子間の磁気的な相互作用が非常に強い $\lambda=10$ で固定して、磁場を変化させた場合について検討する。図 8 は磁場の強さが凝集構造にどのような影響を与えるかを調べたものであり、図 8 (a) は磁場の強さが $\xi=3$ 、図 8 (b) は $\xi=5$ の場合の結果である。図 8 (a) の $\xi=3$ の場合、磁場の影響により図 2 (c) のような格子構造を持つ大きなクラスターが崩壊し始めていることがわかる。図 8 (b) の $\xi=5$ の場合、磁場方向に配向する太い鎖状クラスターを形成していることがわかる。これは、磁場の影響が強くなることにより粒子の磁気モーメントが磁場方向に配向するため、等方的に大きな格子構造を持つクラスターが壊れ、磁場方向に配向する鎖状クラスターへと形態が変化することを意味している。図 7 に示した秩序パラメータからもこの凝集形態の変化が裏付けられる。すなわち、 $\lambda=10$ のときは、磁場の強さが $\xi=2$ から $\xi=5$ の間で秩序パラメータの値が急激に大きくなっていることがわかる。これは、図 2 (c) のような大きな格子構造を持つクラスターから図 8 (b) のような磁場方向に配列する格子構造をもつ太い鎖状クラスターへ凝集形態が転移することを示している。

Fig.8 Aggregate structures for the magnetic interaction strength $\lambda=10$: (a) $\zeta=3$; (b) $\zeta=5$. For the case of $\zeta=3$, a packed aggregate is formed, but for the case of a slightly larger field $\zeta=5$, this aggregate is elongated along the field direction to form a thick chain-like cluster.

6. 結 言

本研究では、磁性キューブ状粒子からなるサスペンションを対象に、粒子の凝集構造に関する内部構造の形態転移現象を、モンテカルロ・シミュレーションにより詳細に検討した。粒子間相互作用が比較的小さい場合には、崩壊・形成を繰り返す小さな鎖状クラスタを形成する。磁場を増していくと、粒子間相互作用が比較的小さい場合でも、格子構造をもつ太い鎖状クラスタへと成長するようになる。これは、磁場が増すと粒子の磁気モーメントが磁場方向に拘束されるので安定的な細い鎖状クラスタが形成され、それらがさらに合体して格子構造を有する太い鎖状クラスタを形成するからである。粒子間相互作用の大きさが熱エネルギーに対して十分支配的な場合には、格子構造を有する大きな塊り状のクラスタを形成する。この状態で磁場を増していくと、磁場方向に配向する格子構造をもつ太い鎖状クラスタへと凝集形態が転移する。これは、磁場の影響により粒子の磁気モーメントが磁場方向に配向するため、その結果、等方的な凝集形態から、太い鎖状クラスタの形態へと転移が生じる。このように凝集体の内部構造の形態転移が磁場の影響や粒子間相互作用の要因により複雑に生じることが明らかになった。

文 献

- Aoshima, M., Ozaki, M. and Satoh, A., Structural analysis of self-assembled lattice structures composed of cubic hematite particles, *Journal of Physical Chemistry C*, Vol. 116 (2012), pp. 17862-17871.
- Häfel, U., Schütt, W., Teller, J. and Zborowski, M. (Eds.), *Scientific and Clinical Applications of Magnetic Carriers* (1997), Springer.
- Matijevic, E. and Scheiner, P., Ferric hydrous oxide sols: III. Preparation of uniform particles by hydrolysis of Fe(III)-chloride, -nitrate, and -perchlorate solutions. *Journal of Colloid and Interface Science*, Vol. 63 (1978), pp. 509-524.
- Narayan, R. (Ed.), *Biomedical Materials* (2009), pp.477- 491, Springer.
- Ozaki, M., Kratochvil, S. and Matijevic, E., Formation of monodispersed spindle-type hematite particles, *Journal of Colloid and Interface Science*, Vol. 102 (1984), pp. 146-151.
- 作田 康裕, 佐藤 明, 磁性扁平粒子からなる高濃度サスペンションの相転移と内部構造発現現象に関する擬 2 次元モンテカルロ・シミュレーション, *日本機械学会論文集 B 編*, Vol. 76, No. 761 (2010), pp. 28-34.
- Satoh, A., *Introduction to Molecular-Microsimulation of Colloidal Dispersions* (2003), Elsevier.
- Satoh, A., *Introduction to Practice of Molecular Simulation* (2010), Elsevier.
- Satoh, A., On aggregate structures in a rod-like hematite particle suspension by means of Brownian dynamics simulations, *Molecular Physics*, Vol. 112 (2014), pp. 2122-2137.

- Sugimoto, T., Itoh, H. and Mochida, T., Shape control of monodisperse hematite particles by organic additives in the gel-sol system, *Journal of Colloid and Interface Science*, Vol. 205 (1998), pp. 42-52.
- Wereley, N. M. (Ed.), *Magnetorheology: Advances and Applications* (2013), Royal Society of Chemistry.
- Yamaguchi, H., Kamiyama, S. and Jeyadevan, B. (Eds), *Proceedings of 12th International Conference on Magnetic Fluid, Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, Vol. 323 (2011), pp. 1191-1422.

References

- Aoshima, M., Ozaki, M. and Satoh, A., Structural analysis of self-assembled lattice structures composed of cubic hematite particles, *Journal of Physical Chemistry C*, Vol. 116 (2012), pp. 17862-17871.
- Häfeli, U., Schütt, W., Teller, J. and Zborowski, M. (Eds.), *Scientific and Clinical Applications of Magnetic Carriers* (1997), Springer.
- Matijevic, E. and Scheiner, P., Ferric hydrous oxide sols: III. Preparation of uniform particles by hydrolysis of Fe(III)-chloride, -nitrate, and -perchlorate solutions. *Journal of Colloid and Interface Science*, Vol. 63 (1978), pp. 509-524.
- Narayan, R. (Ed.), *Biomedical Materials* (2009), pp.477- 491, Springer.
- Ozaki, M., Kratochvil, S. and Matijevic, E., Formation of monodispersed spindle-type hematite particles, *Journal of Colloid and Interface Science*, Vol. 102 (1984), pp. 146-151.
- Sakuda, Y. and Satoh, A., Quasi-2D Monte Carlo simulations of phase transitions and internal aggregate structures in a highly dense suspension composed of magnetic plate-like particles, *Transactions of the Japan Society of Mechanical Engineers, Series B*, Vol. 76, No. 761 (2010), pp. 28-34 (in Japanese).
- Satoh, A., *Introduction to Molecular-Microsimulation of Colloidal Dispersions* (2003), Elsevier.
- Satoh, A., *Introduction to Practice of Molecular Simulation* (2010), Elsevier.
- Satoh, A., On aggregate structures in a rod-like hematite particle suspension by means of Brownian dynamics simulations, *Molecular Physics*, Vol. 112 (2014), pp. 2122-2137.
- Sugimoto, T., Itoh, H. and Mochida, T., Shape control of monodisperse hematite particles by organic additives in the gel-sol system, *Journal of Colloid and Interface Science*, Vol. 205 (1998), pp. 42-52.
- Wereley, N. M. (Ed.), *Magnetorheology: Advances and Applications* (2013), Royal Society of Chemistry.
- Yamaguchi, H., Kamiyama, S. and Jeyadevan, B. (Eds), *Proceedings of 12th International Conference on Magnetic Fluid, Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, Vol. 323 (2011), pp. 1191-1422.