

L303

交流電場を用いた微粒子の秩序形成のシミュレーション

(京大工) ○ (学) 丸岡 明広, (京大工) (正) 山本 量一*

1.はじめに

電解質溶媒中の荷電コロイド分散系に交流電場を印可することによって、1)粒子が引力相互作用し鎖状構造が形成され、2)その粒子鎖同士が引力相互作用し束状構造を形成する、という現象が報告されている^[1]。

粒子鎖の形成については、電気二重層の分極によって生じる双極子的な相互作用がそのメカニズムであるという報告がなされている。しかし、粒子鎖同士の相互作用については未だ詳細な検討がなされておらず、そのメカニズムは未解明である。

当研究室では、電気二重層の分極を考慮できる直接数値計算法であるSPM(Smoothed Profile Method)^[2]を開発しており、本研究では当該手法を実装したシミュレータKAPSELを用いて粒子鎖状構造の相互作用メカニズムの検討を行った。

2.数値計算法

数値計算法として、SPMを用いた。本手法では、流体を非圧縮条件の Navier-Stokes 方程式(2)、イオンを移流拡散方程式(3)、粒子を Newton 方程式(5)で解く。

・流体

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0 \quad (1)$$

$$\rho(\partial_t + \mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} = -\nabla p + \eta \nabla^2 \mathbf{v} - \rho_e (\nabla \psi - \mathbf{E}) + \phi \mathbf{f}_p \quad (2)$$

・イオン

$$\partial_t C_\alpha^* = -\nabla \cdot C_\alpha^* \mathbf{v} + f_\alpha^{-1} \nabla \cdot [(\mathbf{I} - \mathbf{nn}) \cdot C_\alpha^* \nabla \mu_\alpha] \quad (3)$$

$$\mu_\alpha = k_B T \ln C_\alpha^* + z_\alpha e (\psi(\mathbf{r}) - \mathbf{E} \cdot \mathbf{r}) \quad (4)$$

・粒子

$$M_p \dot{\mathbf{V}}_i = \mathbf{F}_i^H + \mathbf{F}_i^C \quad \dot{\mathbf{R}}_i = \mathbf{V}_i \quad (5)$$

$$\mathbf{I}_p \cdot \dot{\mathbf{Q}}_i = \mathbf{N}_i^H \quad (6)$$

$\phi \mathbf{f}_p$ は粒子の剛体性を保証する体積力であり、 ϕ は $[0,1]$ の値を連続的にもつ界面関数である。単位ベ

クトル \mathbf{n} は $\mathbf{n} \equiv -\nabla \phi / |\nabla \phi|$ で定義される。また、

C_α^* は計算のための補助変数であり、実際のイオン数密度との関係は以下の通りである。

$$C_\alpha(\mathbf{r}, t) = [1 - \phi(\mathbf{r}, t)] C_\alpha^*(\mathbf{r}, t) \quad (6)$$

\mathbf{E} は外部電場であり、本研究では $\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 \sin(2\pi f t)$ なる交流電場を与える。

3.計算結果

粒子鎖間相互作用力の電場・周波数依存性の計算結果を Fig.1 に示す。横軸が無次元化した鎖間距離、縦軸が無次元化した鎖間相互作用力である。

系に印加する電場強度を大きく、又は周波数を小さくすると粒子鎖間相互作用力が大きくなる。また、 $f=0.01$ 以下で相互作用力の強さがは頭打ちになる。これは、粒子間の相互作用力が双極子-双極子相互作用に起因するというメカニズムを仮定した場合の電場・周波数依存性と一致する。したがって、粒子鎖間の相互作用についても電気二重層の分極による双極子-双極子相互作用がそのメカニズムであると考えられる。

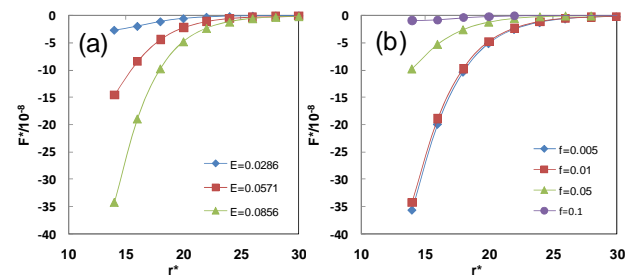


Fig.1 鎖間相互作用力の(a)電場・(b)周波数依存性

参考文献

- [1] Lumsdon, S.O., Kaler, E.W. & Velev, O.D. *Langmuir* **20**, 2108-2116(2004)
 [2] Kim, K., Nakayama, Y. & Yamamoto, R. *Phys. Rev. Lett.* **96**, 208302-4(2006).

*ryoichi@cheme.kyoto-u.ac.jp