

Smoothed Profile法によるコロイド分散系のシミュレーション

京都大学大学院理学研究科¹, JST/PRESTO²

山本 量一^{1,2}, 名嘉山 祥也², 金 鋼²

ソフトマターをはじめ、機能性材料として重要な物質の多くは空間的にも時間的にも全くスケールの違う階層構造で成り立っている場合がほとんどであり、最先端のシミュレーションといえどもすべての階層を同じレベル (計算手法) で取り扱うことは現実問題として不可能です。例えばコロイドや生体分子の溶液であれば、溶媒を構成する分子の大きさや運動の時間スケールはコロイド粒子や生体分子のそれらより何桁も小さく、シミュレーションのスケールを前者にあわせると意味のある結果を得るまでに世界最速のスーパーコンピュータを用いても天文学的な計算時間が必要になります。逆にコロイドや生体分子の方にスケールをあわせようとする、今度は多かれ少なかれ現実と乖離したモデル (トイモデルなど) を用いざるを得ず、実際の物質との対応が希薄になってしまいます。このようなマルチスケールの階層性こそがソフトマターなどにおいてシミュレーションを困難にしている最大の要因となっています。この原理的問題を克服した新しいシミュレーション法の開発が望まれており、流体粒子法 [1] などすでに先駆的な試みが実施されています。我々はそのような手法の1つとして、コロイドと溶媒の界面に Smoothed Profile を用いたシミュレーション法を提唱し、研究を開始しています。この方法はソフトマターのような速いダイナミクスと遅いダイナミクスが共存する系において特に有効となります。前者の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したメソスケールの変数として与え、モデルとして妥当な密度汎関数を通じてそれらの自由度を物理的に正確に、なおかつコンピュータで扱いよい形で扱うのが Smoothed Profile 法の最も大きな特長となっています。

我々の方法は適応の範囲が大変広く、水中の生体分子や界面が関与する問題、ナノテクノロジーによる機能性材料開発、マイクロ流体デバイスやマイクロラボ等の諸問題への応用が可能と考えています。各種溶媒に分散するコロイド粒子への応用についてはすでに成果が得られており、「荷電コロイド分散系の構造形成 (図1右)」と「ニュートン流体中でのコロイド粒子の沈降 (図1左)」について、2次元でのデモンストレーションの結果を示します [2]。

最近注目を集めているマイクロ流体デバイスやマイクロラボでは流体力学効果が本質的に重要であり、問題の解決や設計に Smoothed Profile 法の応用が期待できます。このようなメソスケールの移動現象では流体のレイノルズ数が小さいために、いわゆる乱流の効果は無視することが可能です。逆に熱や物質の拡散の効果が大きくなり、イオンの分布や分子の配向など溶媒の内部自由度の影響も重要になります。これらのことから、メソスケールの移動現象では化学プラントのような大きなスケールで発生する流動現象とは質的に異なる知識と技術が必要となります。現在

¹ E-mail: ryoichi@scphys.kyoto-u.ac.jp

我々はプログラム開発を効率的に行うために2次元の系を扱っていますが、現実の物質への適応を目指して3次元系への拡張を計画しています。

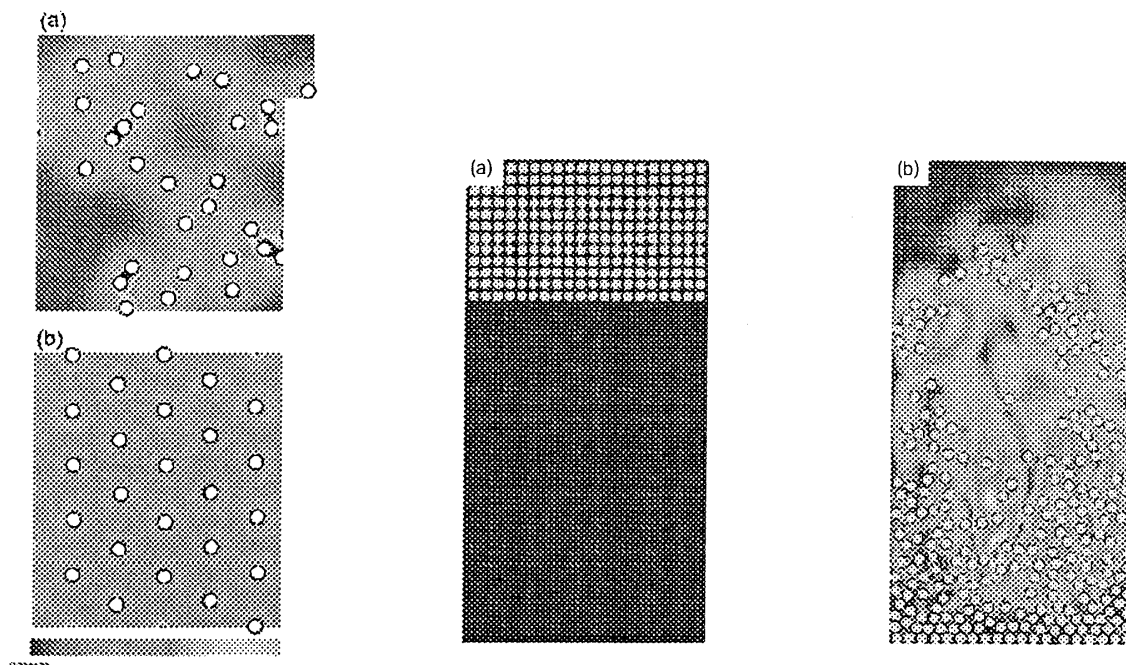


図 1: [左]: 対イオン雰囲気中で分散する荷電コロイド粒子 (白丸) の構造形成: (a) 初期状態 (ランダム)、(b) 最終状態 (2次元ウィグナー結晶)。色は対イオンの密度を表し、コロイド近傍の赤い部分に多く存在し、青い部分にはほとんど存在しない。我々の方法では、電場のポアソン方程式にコロイド表面での境界条件が必要ないため静電ポテンシャルを高速に計算することが出来る [2]。[右]: 非圧縮ニュートン流体中を重力により沈降するコロイド粒子 (黄丸): (a) 初期状態、(b) 中間状態 (流体力学相互作用により渦が発生して粒子の運動が大きく乱されるが、レイノルズ数が小さいのでいわゆる乱流とは異なる)、(c) 終期状態 (まだ渦が残っているが流体の粘性によりやがてすべてが静止する)。色は流体の速度の大きさを表し、赤い部分では速く、青い部分では静止している。我々の方法ではコロイド表面での境界条件が不要なく、従来の方法に比べて劇的に速くナビエ・ストークス方程式を時間発展させることが出来る [2]。

関連論文

- 1) H. Tanaka and T. Araki, Phys. Rev. Lett. 85 1338 (2000); H. Kodama, K. Takeshita, T. Araki, and H. Tanaka, J Phys.; Condens. Matt. 16, L115 (2004).
- 2) R. Yamamoto, Phys. Rev. Lett. 87, 075502 (2001); R. Yamamoto, Y. Nakayama, and K. Kim A Smooth Interface Method for Simulating Colloidal Dispersions, J. Phys.; Condens. Matt. 16, S1945 (2004); K. Kim and R. Yamamoto, cond-mat/0403350; Y. Nakayama and R. Yamamoto, cond-mat/0403014.